

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

Физические основы многопараметрической кристаллографии: диагностика дефектов нескольких типов в монокристаллических материалах и изделиях нанотехнологий

В. Б. Молодкин¹, М. В. Ковальчук^{2,4}, В. Ф. Мачулин³,
Э. Х. Мухамеджанов⁴, С. В. Лизунова¹, С. И. Олиховский¹,
Е. Г. Лень¹, Б. В. Шелудченко¹, С. В. Дмитриев¹, Е. С. Скакунова¹,
В. В. Молодкин¹, В. В. Лизунов¹, В. П. Кладько³, Е. В. Первак¹

¹*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,
бульв. Акад. Вернадского, 36
03680, ГСП, Киев-142, Украина*

²*Учреждение Российской академии наук «Институт кристаллографии
им. А. В. Шубникова РАН»,
Ленинский проспект, 59,
119333 Москва, Россия*

³*Институт физики полупроводников им. В. Е. Лашкарёва НАН Украины,
просп. Науки, 41,
03028 Киев, Украина*

⁴*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»,
пл. Курчатова, 1,
123182 Москва, Россия*

Работа посвящается раскрытию физической природы и разработке принципов практического применения обнаруженного недавно авторами явления уникальной структурной чувствительности и информативности зависимостей от условий дифракции картины многократного брэгговского и диффузного рассеяния рентгеновских лучей, нейтронов, электронов и других заряженных частиц в монокристаллах с дефектами. Это явление принципиально отсутствует при однократном рассеянии, т.е. в случае кинематической дифракции. Показывается, что эта обнаруженная по существу зависимость от условий дифракции характера влияния дефектов на картину динамического рассеяния проявляется как уникально чувствительная к дефектам многообразность картины при её экспериментальном наблюдении в различных дифракционных условиях. Утверждается, что это явление обусловлено формированием кристаллом с дефектами в процессе многократного рассеяния самоорганизованных стоячих брэгговского и диффузных волновых полей, управляемых условиями дифракции и зависящих от характеристик дефектов. Формирование такого зонда с

атомноразмерной периодичностью и соответствующей уникальной разрешающей способностью обеспечивает сильную зависимость характера последующего многократного взаимодействия кристалла с этим волновым полем от их взаимной локализации, которые (и взаимодействие, и локализация) управляются как условиями дифракции, так и характеристиками дефектов. В результате динамическая картина рассеяния оказывается зависящей от условий дифракции и характеристик дефектов взаимосвязанным образом (в отличие от кинематического случая). В работе рассмотрены разнообразные механизмы конкурентного воздействия разного рода эффектов многократности на результат взаимодействия указанного зонда с кристаллом и формирования чувствительной к отклонениям от периодичности многообразности за счёт обеспечения тем или иным способом взаимосвязанности зависимостей картины динамического рассеяния от условий дифракции и характеристик дефектов, которая и является причиной, обуславливающей открытое явление. Это явление используется для создания основ диффузодинамической комбинированной дифрактометрии многопараметрических монокристаллических материалов и многослойных систем с дефектами нескольких типов. Излагаются результаты создания необходимых для многопараметрических систем с усложнённой структурой теоретических моделей, разработки принципов практической реализации и анализа возможностей многопараметрической диагностики, т.е. однозначного решения обратной задачи восстановления по картине многократного рассеяния в различных условиях динамической дифракции характеристик нескольких типов дефектов и различных параметров сверхструктуры монокристаллических материалов и изделий нанотехнологий.

Роботу присвячено розкриттю фізичної природи та розробці принципів практичного застосування виявленого нещодавно авторами явища унікальної структурної чутливості та інформативності залежностей від умов дифракції картини багатократного Брегґового і дифузного розсіяння Рентґенових променів, нейтронів, електронів і інших заряджених частинок у монокристалах з дефектами. Це явище принципово відсутнє при однократному розсіянні, тобто у випадку кінематичної дифракції. Показується, що ця виявлена по суті залежність від умов дифракції характеру впливу дефектів на картину динамічного розсіяння проявляється як унікально чутлива до дефектів багатобразність картини при її експериментальному спостереженні в різних дифракційних умовах. Стверджується, що це явище обумовлено формуванням кристалом з дефектами в процесі багатократного розсіяння самоорганізованих стоячих Брегґового і дифузних хвильових полів, які регулюються умовами дифракції і залежать від характеристик дефектів. Формування такого зонду з атомоворозмірною періодичністю і відповідною унікальною роздільною здатністю забезпечує сильну залежність характеру подальшої багатократної взаємодії кристаллу з цим хвильовим полем від їх взаємної локалізації, які (і взаємодія, і локалізація) регулюються як умовами дифракції, так і характеристиками дефектів. В результаті динамічна картина розсіяння виявляється залежною від умов дифракції та характеристик дефектів взаємозв'язаним чином (на відміну від кінематичного випадку). В роботі розглянуто різні механізми конкурентної дії різного роду ефектів багатократності на резуль-

тат взаємодії зазначеного зонда з кристалом та формування чутливої до відхилів від періодичности багатобразности за рахунок забезпечення тим або іншим способом взаємозв'язаності залежностей картини динамічного розсіяння від умов дифракції та характеристик дефектів, яка і є причиною, що обумовлює відкрите явище. Це явище використовується для створення основ дифузодинамічної комбінованої дифрактометрії багатопараметричних монокристалічних матеріалів та багат шарових систем з дефектами декількох типів. Викладаються результати створення необхідних для багатопараметричних систем з ускладненою структурою теоретичних моделей, розробки принципів практичної реалізації та аналізу можливостей багатопараметричної діагностики, тобто однозначного розв'язання оберненої задачі відновлення за картиною багатократного розсіяння в різних умовах динамічної дифракції характеристик декількох типів дефектів та параметрів надструктури монокристалічних матеріалів і виробів нанотехнологій.

The paper deals with both the disclosure of the physical nature and the development of the practical application principles of recently discovered authoring phenomenon of unique structural sensitivity and informativity dependences on diffraction conditions of pattern of multiple Bragg and diffuse x-ray scattering as well as scattering of neutrons, electrons and another charged particles in a monocrystal with defects. This phenomenon is absent in principle with single scattering, i.e. within the kinematical diffraction case. As shown, this discovered dependence of character of defect influence on the dynamical diffraction pattern on diffraction conditions is evinced as multiformity of pattern uniquely sensitive to defects under experimental observation of it within the different diffraction conditions. As ascertained, this phenomenon is determined by formation (by crystal with defects) of the self-organizing standing Bragg and diffuse wave fields during the multiple scattering process, which are governed by diffraction conditions and depend on defect characteristics. Formation of such sonde with atom-dimensional periodicity and according unique resolving power provides strong dependence of character of follow-up multiple interaction between the crystal and this wave field on their relative localization; both interaction and localization are governed by diffraction conditions and defect characteristics. As a result, dynamical scattering pattern is appeared, depending on diffraction conditions and defect characteristics in interplay manner (in contrast to kinematical case). In a given paper, different mechanisms of competitive influence of various-type multiplicity effects on the result of both interaction of the mentioned sonde with a crystal and formation of multiformity sensitive to deviations from the periodicity due to providing interrelationship of dynamical diffraction pattern dependences on diffraction conditions and defect characteristics (as a reason determining phenomenon at issue) are considered. This phenomenon is used for creation of basis for diffuse-dynamical combined diffractometry of multiparameter monocrystal materials and multilayer systems with defects of several types. The results of both creation of theoretical models, which are necessary for multiparameter systems with complicated structure, and development of practical realization principles and analysis of multiparameter diagnostic opportunities, i.e. unambiguous solution of inverse problem of the reconstruction of both characteristics of defects of sev-

eral types and various superstructure parameters for monocrystal materials and nanotechnology articles by multiple scattering pattern in the various dynamical diffraction conditions, are stated.

Ключевые слова: динамическая дифракция, многократное диффузное рассеяние, микродефекты, многопараметрическая диагностика наносистем, многослойная система.

(Получено 22 июля 2011 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

В отличие от классической кристаллографии [1–6], которая изучает параметры только идеально периодических кристаллических решёток, кристаллография на диффузном рассеянии [7] 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.

Как показано авторами в самое последнее время в работах [8–15], именно эффекты многократности диффузного рассеяния, как рентгеновских лучей, так и нейтронов и других частиц, главным образом блоховский (стоячий) характер его волнового поля и экстинкция за счёт рассеяния на дефектах, обеспечили появление зависимости от условий дифракции характера влияния дефектов на картину динамического рассеяния и, следовательно, возможность экспериментальной реализации впервые многопараметрической диагностики, т.е. однозначного решения обратной задачи восстановления по картинам многократного рассеяния в различных условиях дифракции характеристик сразу нескольких типов дефектов, как правило, одновременно присутствующих в кристаллах, и вместе с этим большого числа параметров сверхструктуры монокристаллических изделий нанотехнологий, что сегодня наиболее актуально.

Дальнейшее более эффективное использование указанной возможности многопараметрической диагностики обеспечивается последовавшим бурным развитием исследований этой проблемы. Так, на основе квантово-механического рассмотрения [16], устанавливается и детально аналитически описывается интерференционно-ориентационная, т.е. принципиально динамическая, природа этого недавно открытого [8] авторами важного для диагностики явления — зависимости от параметров, характеризующих различные условия дифракции, характера влияния дефектов на картину рассеяния при динамической дифракции излучения в кристаллах с дефектами. Обнаруживается и активно анализируется уникальная струк-

турная чувствительность этих зависимостей и причины её принципиального отсутствия при кинематическом рассеянии [17]. Это обнаруженное явление наблюдается как многообразность [18] диффузодинамической картины и обеспечивает уникальную возможность создания на этой основе управляемой многопараметрической кристаллографии (в том числе и наносистем). В результате создаётся уникально информативный структурный метод стоячих диффузных волн, а точнее, взаимодействующих между собой за счёт процессов многократного рассеяния стоячих брэгговских и целого пакета стоячих диффузных волн [19]. Настоящая статья предполагает обзор, углубление, развитие и обобщение результатов работ по созданию основ многопараметрической кристаллографии [1–85].

2. ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ В КРИСТАЛЛАХ С ДЕФЕКТАМИ НЕСКОЛЬКИХ ТИПОВ

2.1. Дифференциальные отражательные способности

2.1.1. Общие выражения

С целью нахождения в рамках динамического рассмотрения выражений для когерентной и диффузной составляющих дифференциальной отражательной способности необходимо сначала определить исходные выражения для амплитуд брэгговского и диффузного волновых полей индукции в кристалле, которые создаются при падении из вакуума на кристалл плоской гармонической волны $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r} + i\omega t/c}$, где \mathbf{r} — пространственная координата, t — время, ω и c — соответственно частота и скорость света, E_0 — амплитуда падающей волны. Такие амплитуды можно найти, решая волновое уравнение

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

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

В отличие от 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:

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

где \mathbf{G} — вектор обратной решётки, соответствующий периодиче-

ской «в среднем» составляющей восприимчивости кристалла, умноженный на 2π , \mathbf{q} — переданный импульс за счёт рассеяния на искажениях, вызванных дефектами, v_c — объем 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 [57]:

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

Переходя к важному с точки зрения практического применения двухволновому случаю динамической дифракции, в рамках развитой в [20–29] теории возмущений 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):

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

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

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

$$(-2\varepsilon_{0q} + \chi_0) D_{\mathbf{q}} + CE\chi_{-\mathbf{H}} D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}} = -(\delta\chi_{\mathbf{q}} D_0 + C\delta\chi_{-\mathbf{H}+\mathbf{q}} D_{\mathbf{H}}), \quad (6)$$

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

где ошибки возбуждения определены как

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

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

и компоненты Фурье флуктуационной части восприимчивости кристалла задаются выражением:

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

где

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

$E = e^{-L_{\mathbf{q}}}$ — фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера, $\chi_0, \chi_{\pm\mathbf{H}}$ — фурье-компоненты восприимчивости кристалла, C — поляризационный множитель ($C = 1$ для σ -поляризации, $C = \cos 2\theta_B$ для π -поляризации, где θ_B — угол Брэгга). Выражение (7), определяющее фурье-компоненту восприимчивости кристалла с дефектами $\chi_{\mathbf{G}+\mathbf{q}}$, которая рассматривается как сумма фурье-компонент средней восприимчивости $\chi_{\mathbf{G}} \exp(-L_{\mathbf{G}}) \delta_{0,\mathbf{q}}$ и флуктуационной части восприимчивости $\delta\chi_{\mathbf{G}+\mathbf{q}}$, позволяет при решении неоднородных систем (5) и (6) воспользоваться методом модифицированной теории возмущений [23, 24].

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 теории возмущений, получим следующую основную систему уравнений для сильных брэгговских волн:

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

где дисперсионные поправки к восприимчивости, которые обусловлены учётом процессов двукратного рассеяния на полях смещений атомов от дефектов, определяются выражениями [20–29]:

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

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

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

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 поляризуемости.

Для дисперсионных поправок (11) справедливы [20–29] выражения $\Delta\chi_{00} \approx \Delta\chi_{HH} \cong \frac{\mu_{\text{ds}}}{K}$ (μ_{ds} — коэффициент экстинкции, обусловленный диффузным рассеянием; см. разд. 2.1.4) и $\Delta\chi_{H0} \approx \Delta\chi_{0H} \approx 0$.

2.1.2. Геометрия дифракции по Брэггу

Решая систему уравнений (8) с использованием граничных условий для плоскопараллельной кристаллической пластинки в случае брэгг-дифракции:

$$D_T(\mathbf{r}) = \sum_{\delta} D_0^{\delta} e^{-i\mathbf{K}_0^{\delta} \cdot \mathbf{r}} = E_0 e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \Big|_{z=0}, \quad D_S(\mathbf{r}) = \sum_{\delta} D_H^{\delta} e^{-i\mathbf{K}_H^{\delta} \cdot \mathbf{r}} = 0 \Big|_{z=t},$$

$$D_S(\mathbf{r}) = E_S(\mathbf{r}) \Big|_{z=0}, \quad \mathbf{K}_0^{\delta} = \mathbf{K} + K\Delta_{\delta}\mathbf{n}, \quad \mathbf{K}_H^{\delta} = \mathbf{K}_0^{\delta} + \mathbf{H}$$

(здесь $E_S(\mathbf{r}) = E_H^a e^{-i\mathbf{K}_H^a \cdot \mathbf{r}}$ — амплитуда дифрагированной волны в вакууме, $\mathbf{K}'_H = \mathbf{K}_H^{\delta} - K\Delta_{\delta}\mathbf{n}$, t — толщина кристалла), можно получить следующие выражения для амплитуд проходящей и отражённой когерентных волн:

$$D_0^{\delta} = (-1)^{\delta} E_0 \frac{B_{\delta}}{B_1 - B_2}, \quad D_H^{\delta} = c^{(\delta)} D_0^{\delta}, \quad (12)$$

где

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

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

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

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

$\Lambda = \lambda|\gamma_H|\sqrt{b}/\sigma$ — длина экстинкции, $\delta = 1, 2$, γ_0 и γ_H — направляющие косинусы падающей и дифрагированной волн соответственно, $\alpha = -\Delta\theta \sin 2\theta_B$.

Решения для амплитуд (12) показывают, что при падении из вакуума плоской волны в кристалле образуется два сильных динамических волновых поля, определяемых амплитудами D_0^1 , D_0^2 и представляющих собой слабо и сильно поглощающиеся стоячие волны. Такая ситуация возникает из-за того, что максимумы образовавшихся сильно поглощающихся стоячих волновых полей попадают на атомные плоскости и их поглощение, которое пропорционально восприимчивости в среде, становится значительным, тогда как максимумы амплитуды второго стоячего волнового поля попадают в межплоскостное пространство, и поглощение таких волн значительно слабее. Из формул (12) видна также появившаяся при динамической дифракции резкая ориентационная зависимость от отклонений (y) по отношению к точному выполнению условия Вульфа–Брэгга коэффициентов преломления (Δ_δ^r) и поглощения (Δ_δ^i), где Δ_δ^r и Δ_δ^i — соответственно вещественная и мнимая части динамической поправки Δ_δ . При этом отклонение (y) в одну сторону от точного выполнения условия Вульфа–Брэгга приводит к выживанию только слабо поглощающегося волнового поля, а в другую — только сильно поглощающегося.

Таким образом, для когерентной компоненты отражательной способности в геометрии дифракции по Брэггу можно получить [29]:

$$R_{\text{coh}}(\Delta\theta) = \frac{\text{ch}x_r - \cos x_i}{L_+ \text{ch}x_r + \sqrt{L_+^2 - 1} \text{sh}x_r - L_- \cos x_i + \sqrt{1 - L_-^2} \sin x_i}, \quad (13)$$

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

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

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

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

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

$\chi_{\text{нr}}$ и $\chi_{\text{ни}}$ — \mathbf{H} -ые фурье-компоненты соответственно действительной и мнимой частей восприимчивости χ , $\chi_{0\text{r}}$ и $\chi_{0\text{i}}$ — нулевые фурье-компоненты действительной и мнимой частей восприимчивости χ .

Нетрудно проследить, что при выполнении условия толстого кристалла, когда $\mu_0 t \gg 1$ (μ_0 — линейный коэффициент фотоэлектрического поглощения), выполняется условие $x_r \gg 1$, что позволяет упростить (13). Тогда для когерентной компоненты дифференциальной отражательной способности при дифракции по Брэггу можно получить:

$$R_{\text{coh}}(\Delta\theta) = L_+ - \sqrt{L_+^2 - 1}. \quad (14)$$

Диффузно рассеянные волны возникают вследствие рассеяния сильных брэгговских волн на флуктуационных полях статических смещений атомов кристалла, которые вызваны хаотически распределёнными микродефектами, и тоже формируют в кристалле динамическое волновое поле. В двухволновом случае амплитуды диффузно рассеянных проходящей D_q и дифрагированной $D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}}$ плоских волн, которые образуют диффузные блоховские волны, удовлетворяют системе неоднородных уравнений (6). Эти уравнения описывают процессы многократного перерассеяния диффузных волн D_q и $D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}}$ на периодической части кристаллического потенциала, а также процессы однократного рассеяния из сильных брэгговских волн с амплитудами D_0 и $D_{\mathbf{H}}$ в диффузные волны с амплитудами D_q и $D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}}$.

Для учёта процессов двукратного рассеяния на отклонениях от периодичности кристаллического потенциала в диффузных волнах следует сохранить в правой части уравнений (6) все амплитуды $\mathbf{q}' \neq \mathbf{q}$, $\mathbf{q} + \mathbf{H}$. Затем эти амплитуды можно выразить через D_0 , $D_{\mathbf{H}}$, D_q , $D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}}$ с использованием уравнений (4) и подставить в уравнения (6). После этого первого итерационного шага коэффициенты при D_q и $D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}}$ в уравнениях (6) получают поправки $\Delta\chi'_{\text{GG}'}$, которые полностью совпадают по форме с дисперсионными поправками к волновым векторам сильных брэгговских волн $\Delta\chi_{\text{GG}'}$ (11), но зависят от углов выхода $\Delta\theta'$:

$$\begin{aligned} (-2\varepsilon_{0\mathbf{q}} + \chi_0 + \Delta\chi'_{00})D_q + (CE\chi_{-\mathbf{H}} + \Delta\chi'_{0\mathbf{H}})D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}} &= -(\delta\chi_q D_0 + C\delta\chi_{-\mathbf{H}+\mathbf{q}} D_{\mathbf{H}}), \\ (CE\chi_{\mathbf{H}} + \Delta\chi'_{\mathbf{H}0})D_q + (-2\varepsilon_{\mathbf{H}\mathbf{q}} + \chi_0 + \Delta\chi'_{\mathbf{H}\mathbf{H}})D_{\mathbf{H}\mathbf{q}} &= -(C\delta\chi_{\mathbf{H}+\mathbf{q}} D_0 + \delta\chi_{\mathbf{q}} D_{\mathbf{H}}), \end{aligned} \quad (15)$$

где $\varepsilon_{0\mathbf{q}}$ и $\varepsilon_{\mathbf{H}\mathbf{q}}$ — ошибки возбуждения диффузно рассеянных волн, $\Delta\chi'_{\text{GG}'}$ — дисперсионные поправки, учитывающие процессы двукратного диффузного рассеяния. Поправками к коэффициентам при амплитудах D_0 и $D_{\mathbf{H}}$ в правой части системы уравнений (15), которые также возникают при выполнении указанного итерационного шага и описывают перерассеяние диффузных волн обратно в сильные брэгговские, пренебрегается как малыми величинами более высокого порядка [20–29].

Налагая граничные условия на амплитуды диффузных волн для случая дифракции по Брэггу и преобразуя полученные амплитуды плоских волн на поверхности кристалла в амплитуду диффузного рассеяния в телесный угол в направлении \mathbf{K}' , получим следующее выражение для диффузной компоненты дифференциальной отражательной способности кристаллической пластинки [20–29]:

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

$$F_{\text{dyn}} = 1 + |\zeta'| b R_{\text{coh}} + 2 \operatorname{Re}(\zeta' c^{(\delta)}), \quad p(\mu_i t) = \frac{1 - e^{-2\mu_i t}}{2\mu_i t}, \quad \zeta' = \frac{|CE\chi_{\text{H}} + \Delta\chi_{0\text{H}}^{\delta}|}{|CE\chi_{-\text{H}} + \Delta\chi_{\text{H}0}^{\delta}|},$$

где μ_i — интерференционный коэффициент поглощения. Выражения для коэффициента экстинкции за счёт диффузного рассеяния $\mu_{\text{ds}}(\Delta\theta)$ приведены в разделе 2.1.4.

2.1.3. Геометрия дифракции по Лауэ

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

$$D_T(\mathbf{r}) = \sum_{\delta} D_0^{\delta} e^{-i\mathbf{K}_0^{\delta} \cdot \mathbf{r}} = E_0 e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \Big|_{z=0}, \quad D_S(\mathbf{r}) = \sum_{\delta} D_{\text{H}}^{\delta} e^{-i\mathbf{K}_{\text{H}}^{\delta} \cdot \mathbf{r}} = 0 \Big|_{z=0}, \quad (16)$$

$$D_S(\mathbf{r}) = E_S(\mathbf{r}) \Big|_{z=t}.$$

Таким образом, решая (8) вместе с (16), можно получить следующие выражения для амплитуд сильных брэгговских волн в кристалле в геометрии дифракции по Лауэ [20–29] (здесь следует учесть, что в случае Лауэ-дифракции $\gamma_{\text{H}} = |\gamma_{\text{H}}|$, тогда как в случае дифракции по Брэггу $\gamma_{\text{H}} = -|\gamma_{\text{H}}|$):

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

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

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

Выражение для когерентной компоненты дифференциальной от-

ражательной способности в геометрии Лауэ приобретает вид:

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

$$= \frac{e^{-(\mu_0 + \mu_{ds}(y))l}}{2(1+y^2)} \left(\operatorname{ch} \frac{\xi C (\mu_0 + \mu_{ds}) l}{\sqrt{1+y^2}} - \cos 2A\sqrt{1+y^2} \right), \quad (17)$$

где $y = \frac{\Delta\theta \sin 2\theta_B}{CE|\chi_{Hr}|}$, $A = \frac{\pi C |\chi_{Hr}| l}{\lambda}$, $\xi = \frac{\chi_{Hi}}{\chi_{0i}} E$, $l = \frac{t}{\gamma_0}$.

Учитывая, что второе слагаемое в (17) при выполнении условия толстого кристалла $\mu_0 l \gg 1$ (где $\mu_0 = K\chi_{0i}$ — коэффициент фотоэлектрического поглощения) сильно осциллирует, а также то, что при разложении функции $\operatorname{ch}(x)$ на экспоненты слагаемое с отрицательной степенью будет пренебрежимо мало, для $R(y)$ в приближении полубесконечного кристалла можно получить более простое выражение:

$$R(y) = R_p(y) e^{-\mu_{ds}(y)l \left(1 - \frac{\xi C}{\sqrt{1+y^2}} \right)}, \quad (18)$$

где $R_p(y)$ — когерентная компонента дифференциальной отражательной способности идеального динамически рассеивающего кристалла при дифракции по Лауэ в приближении толстого кристалла, уточнённая учётом фактора Кривоглаза–Дебая–Валера (E):

$$R_p(y) = \frac{1}{4(1+y^2)} e^{-\mu_0 l \left(1 - \frac{\xi C}{\sqrt{1+y^2}} \right)}.$$

Следует отметить, что в отличие от идеального кристалла появившаяся там ориентационная зависимость от y за счёт блоховского (стоячего) характера волнового поля и зависимость её характера от условий дифракции здесь приобрели также зависимость от характеристик дефектов за счёт появления E и $\mu_{ds}(y)$, т.е. зависимости брэгговской составляющей картины рассеяния от условий дифракции и от характеристик дефектов стали взаимосвязанными. Решая систему уравнений для амплитуд диффузно рассеянных волн с граничными условиями, соответствующими геометрии дифракции по Лауэ, для диффузной компоненты дифференциальной отражательной способности в приближении тонкого кристалла можно получить [28]:

$$R_{\text{diff}}(\Delta\theta) = \frac{1}{K^2} \int dS_K R_D(\mathbf{k}), \quad (19)$$

$$R_D(\mathbf{k}) = P_0 \frac{C^2 E^2 K^2 \chi_{\text{Hr}}^2}{|\Delta_1 - \Delta_2|^2 |\Delta'_1 - \Delta'_2|^2} \sum_{\delta, \tau} |\Delta'_\tau - \Delta_\delta|^2 |2\gamma_0 \Delta_\delta - \chi_0|^2 |\mathbf{H}^0 \cdot \mathbf{u}(\mathbf{q})|^2 \Pi_{\delta\tau}, \quad (20)$$

где u_q — компонента Фурье поля смещений от одиночного дефекта,

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

$$\Delta_\delta = \frac{\varepsilon_0^\delta}{\gamma_0} = \frac{1}{2\gamma_0} \left(-\alpha + \chi_0 - (-1)^\delta \sqrt{\alpha^2 + C^2 E^2 \chi_{\text{H}} \chi_{-\text{H}}} \right),$$

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

$$\alpha' = \Delta\theta' \sin 2\theta_B.$$

В приближении толстого кристалла в геометрии Лауэ диффузная компонента дифференциальной отражательной способности такова:

$$R_{\text{diff}}(\Delta\theta) = \frac{C^2}{P} (1 - E^2) Q l e^{-\mu_0 l} \mu_{\text{ds}}(\Delta\theta) e^{-\mu_{\text{ds}}(\Delta\theta) l}, \quad (21)$$

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

Следует отметить, что приведенные выражения как для брэгговской, так и для диффузной составляющих картины динамического рассеяния демонстрируют существенную взаимосвязь их зависимостей от условий дифракции и от характеристик дефектов между собой. В кинематическом случае указанная взаимосвязь принципиально отсутствует.

2.1.4. Коэффициент экстинкции

Когда в динамически рассеивающем кристалле присутствуют дефекты, искажающие решётку, то кроме фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера появляется ещё один структурночувствительный параметр $\mu_{\text{ds}}(\Delta\theta)$, впервые введённый в [20] и, независимо, в [58] (в этой работе выражение для $\mu_{\text{ds}}(\Delta\theta)$ получено при условии $\Delta\theta = 0$, где $\Delta\theta$ — угловое отклонение от точного условия Вульфа–Брэгга). Параметр $\mu_{\text{ds}}(\Delta\theta)$ описывает эффективное поглощение или экстинкцию когерентных волн из-за их рассеяния на отклонениях от периодичности решётки кристалла, обусловленных дефектами, и преобразования брэгговских волн в диффузные волны, которые, в свою оче-

редь также рассеиваются динамически. В работах [20, 58] выражение для μ_{ds} имеет вид

$$\mu_{\text{ds}}(k_0) = cC^2 E^2 m_0 J(k_0), \quad J(k_0) = \frac{1}{\pi} \int dS_{\mathbf{K}'} F(\mathbf{q}) \quad (22)$$

(интегрирование в (22) проводится по сфере Эвальда вблизи узла обратной решётки); $F(\mathbf{q}) = |\nu_{\mathbf{q}}|^2$, $\nu_{\mathbf{q}} = \mathbf{H} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{q}}$, $m_0 = 2\pi v_c \left(\frac{H |\chi_{\text{HF}}|}{2\lambda} \right)^2$, λ

— длина волны излучения, \mathbf{K}' — волновой вектор диффузно рассеянной плоской волны. Поле смещения атомов решётки вдали от сферически симметричных кластеров даётся следующим выражением:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = A \frac{\mathbf{r}}{r^3}; \quad \text{тогда } \nu(\mathbf{r}) = A \frac{(\mathbf{H} \cdot \mathbf{r})}{r^3}, \quad \text{а } \nu_{\mathbf{q}} = \frac{4\pi i A}{v_c} \frac{(\mathbf{H} \cdot \mathbf{q})}{q^2} \text{ — фурье-компонента.}$$

Поскольку $q \ll K$, то в (22) удобно перейти от интегрирования по сфере к интегрированию по плоскости Π , аппроксимирующей сферу Эвальда вблизи узла обратной решётки \mathbf{H} (рис. 1). Переходя в этой плоскости к полярным координатам $\mathbf{k} = (k \cos \varphi, k \sin \varphi, k_0)$ и подставляя в (22) $dS_{\mathbf{K}'} = k dk d\varphi$, $\mathbf{H} \cdot \mathbf{q} = H q \cos \varphi \cos \theta_B$, где θ_B — угол Вульфа–Брэгга, для μ_{ds} в соответствии с [20–29] можно получить:

$$\mu_{\text{ds}} = c (C |\chi_{\text{H}}|)^2 \frac{4\pi^3 A^2 H^2}{2v_c \lambda^2} \cos^2 \theta_B \ln \frac{q_m^2}{q_c^2}; \quad (23)$$

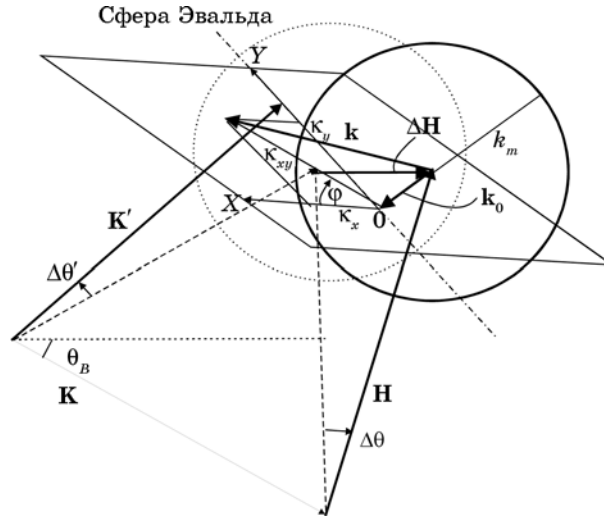


Рис. 1. Схема волновых векторов в геометрии Брэгга.

c — концентрация дефектов, $q_m = 2\pi/R_{\text{eff}}$ — граница раздела между областями диффузного рассеяния Хуаня и Стокса–Вильсона, $q_c = 2\pi/\Lambda_c$ — параметр обрезания со стороны малых q , $\Lambda_c = \lambda\sqrt{\gamma_0\gamma_H}|\chi_{\text{Hr}}|^{-1}$ — экстинкционная длина.

Поскольку для хаотически ориентированных дислокационных петель [58]

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

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

$$\mu_{\text{ds}} = c (C|\chi_{\text{H}}|)^2 \frac{4\pi^3 A^2 H^2}{v_c \lambda^2} \left(B_1 + \frac{B_2}{2} \cos^2 \theta_B \right) \ln \frac{q_m^2}{q_c^2}, \quad (24)$$

где для хаотически ориентированных дислокационных петель

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

для кластеров $B_1 = 0$, $B_2 = (4\pi A_{\text{cl}} / v_c)$, b — модуль вектора Бюргера петли, R_L — радиус петли, ν — коэффициент Пуассона,

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

$A_{\text{cl}} = \Gamma \varepsilon R_p^3$, $\Gamma = \frac{1}{3}(1 + \nu)(1 - \nu)^{-1}$, ε — деформация на границе кластера, R_p — радиус кластера (индекс p — от англ. precipitate).

Выражение (23) получено Дедериксом с целью описания интегральных брэгговских интенсивностей в предположении при интегрировании, что $\mu_{\text{ds}}(\Delta\theta) \approx \mu_{\text{ds}}(0)$, т.е. равно всегда значению, при котором направление волнового вектора падающего луча \mathbf{K} точно соответствует условию Вульфа–Брэгга. Но в связи с широким применением метода кривых качания для диагностики реальных кристаллов, а также для учёта динамических эффектов в диффузной компоненте отражательной способности, более важным является выражение для μ_{ds} , полученное в [29, 30, 58], где оно явно зависит от отклонения $\Delta\theta$ направления падающего луча от точного брэгговского условия. В результате такого отклонения узел обратной решётки \mathbf{H} не попадает точно на сферу Эвальда, а отклоняется от неё на величину k_0 (рис. 1). В этом случае удобно перейти к цилиндрической системе координат $\mathbf{q} = (\kappa \cos\varphi, \kappa \sin\varphi, q_0)$, где $\kappa = \sqrt{q^2 - q_0^2}$, $dS_{\mathbf{K}} = \kappa d\kappa d\varphi$, $\mathbf{H}_0 = (\cos\theta_B, 0, \sin\theta_B)$, и тогда вместо (23) можно получить:

$$\mu_{\text{ds}}(\mathbf{q}_0) = \frac{4\pi^3 A^2 H^2}{v_c \lambda^2} \begin{cases} \cos^2 \theta_B \ln \frac{q_m}{q_c} + \left(\sin^2 \theta_B - \frac{1}{2} \cos^2 \theta_B \right) q_0^2 \left(\frac{1}{q_c^2} - \frac{1}{q_m^2} \right), & |q_0| \leq q_c; \\ \cos^2 \theta_B \ln \frac{q_m}{q_c} + \left(\sin^2 \theta_B - \frac{1}{2} \cos^2 \theta_B \right) q_0^2 \left(\frac{1}{q_0^2} - \frac{1}{q_m^2} \right), & |q_0| > q_c. \end{cases} \quad (25)$$

Однако в приведённых выше выражениях не учитывался тот факт, что диффузное рассеяние имеет различный характер в двух областях: Хуаня и Стокса–Вильсона, и функция $|v_{\mathbf{q}}|^2$ ведёт себя в этих областях соответственно, как $\propto 1/q^2$ и $\propto 1/q^4$ [58]. Позднее, в работах [59, 60] было учтено различное поведение выражений для интенсивностей диффузного рассеяния в областях Хуаня и Стокса–Вильсона, т.е.

$$|v_{\mathbf{q}}|^2 = \left(\frac{B_1 + B_2 (\mathbf{H}^0 \cdot \mathbf{q}^0)^2}{q^2} \right) \frac{1}{q^2} \text{ в области Хуаня,} \quad (26)$$

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

где $\mathbf{q}^0 = \mathbf{q}/q$. С учётом соотношений (26) выражение для $J(k_0)$ (см. (22)) (при условии $R_{\text{eff}} \ll \Lambda$) принимает вид [61]:

$$J(k_0) = \begin{cases} b_1 \left(1 - \frac{k_0^2}{k_c^2} \right) + b_2 \ln \left(e \frac{k_m^2}{k_c^2} \right) + b_3 k_0^2 \left(\frac{1}{2k_m^2} - \frac{1}{k_c^2} \right), & |k_0| \leq k_c; \\ b_2 \ln \left(e \frac{k_m^2}{k_0^2} \right) + b_3 \left(\frac{k_0^2}{2k_m^2} - 1 \right), & k_c \leq |k_0| \leq k_m; \\ \left(b_2 - \frac{1}{2} b_3 \right) \frac{k_m^2}{k_0^2}, & |k_0| > k_m; \end{cases} \quad (27)$$

тут $k_0 = K\Delta\theta \sin 2\theta_B$, $k_c \equiv q_c$, $k_m \equiv q_m$, $b_1 = B_1 + B_2/3$, $b_2 = B_1 + \frac{1}{2} B_2 \cos^2 \theta_B$,

$$b_3 = \frac{1}{2} \cos^2 \theta_B (1 - 2\text{tg}^2 \theta_B).$$

Когда размеры дефектов соизмеримы с глубиной экстинкции Λ , диффузное рассеяние от таких дефектов концентрируется в непосредственной близости к брэгговскому пику, т.е. в области обрезания

$k \cong k_c$, и выражения (27) не являются корректными в случае крупных дефектов. В работах [59, 60] был учтён комплексный характер передаваемого импульса $\mathbf{q} = \mathbf{k} + i\zeta\mathbf{n}$, обусловленный многократностью диффузного рассеяния на периодической части восприимчивости, что позволило авторам устранить расходимость интеграла (22) вблизи узла обратной решётки при $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}$, и получить аналитические выражения для $\mu_{ds}(\Delta\theta)$, корректные и в случае крупных дефектов:

$$J(k_0) = \begin{cases} J_H(k_0) + J_{H-SW}(k_0) + J_H^*(k_0) & \text{при } |k_0| < k_m; \\ J_{SW}(k_0) & \text{при } |k_0| \geq k_m; \end{cases} \quad (28)$$

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

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

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

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

где интерференционный коэффициент поглощения μ_i в геометрии Брэгга при асимптотике $\Delta\theta'$, $\Delta\theta \gg$ полуширины брэгговского пика имеет вид:

$$\mu_i = \frac{\mu_0}{2\gamma_0} \frac{1 + \gamma_0/|\gamma_H|}{2}.$$

Рассмотрим выражение для коэффициента экстинкции в геометрии Лауэ (рис. 2) в случае больших дефектов. При интегрировании в (22) разложим волновой вектор диффузно рассеянной волны \mathbf{k} на составляющие \mathbf{k}_0 и \mathbf{k}' таким образом, чтобы $\mathbf{k}_0 \perp S_{K'}$, а \mathbf{k}' лежал в плоскости $S_{K'}$. Кроме того, в плоскости интегрирования перейдём к полярным координатам $\mathbf{k}' = (k' \cos \varphi, k' \sin \varphi)$. Тогда $q^2 = k_0^2 + k'^2 + \mu_i^2$, $\mathbf{k} = (k' \cos \varphi, k' \sin \varphi, k_0)$, $\mathbf{H}_0 = (-\sin \theta_B, 0, \cos \theta_B)$. Таким образом, для (15) получим:

$$F(\mathbf{q}) = \frac{\left(B_1 + B_2 \frac{k'^2 \cos^2 \varphi \sin^2 \theta_B + k_0^2 \cos^2 \theta_B - k_0 k' \cos \varphi \sin 2\theta_B}{k'^2 + k_0^2 + \mu_i^2} \right)}{k'^2 + k_0^2 + \mu_i^2}. \quad (29)$$

Элемент площади интегрирования в выбранной системе координат будет иметь вид $dS_{K'} = k' dk' d\varphi$. Подставляя (29) в (22) и выполняя

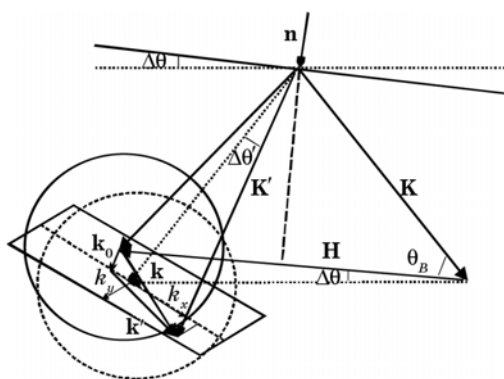


Рис. 2. Схема волновых векторов в обратном пространстве при дифракции по Лауэ.

интегрирование, с учётом различия характера рассеяния в областях Хуаня и Стокса–Вильсона для дифференциального коэффициента экстинкции когерентного рассеяния из-за ухода его части в диффузный фон в случае геометрии дифракции по Лауэ получим такие же выражения, как и (28), но с коэффициентами b_i в виде

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

и с интерференционным коэффициентом поглощения

$$\mu_1 = \frac{KCE\chi_{\text{Hr}}\chi_{\text{Hi}}}{\gamma_0 \sqrt{\chi_{\text{Hr}}^2 - \chi_{\text{Hi}}^2}},$$

при тех же асимптотиках $\Delta\theta', \Delta\theta \gg$ полуширины брэгговского пика.

В случае нескольких типов дефектов, в том числе крупных, следует учесть, что при пренебрежении корреляцией в расположении дефектов имеет место линейная суперпозиция вкладов в величины L_{H} и

$\mu_{\text{ds}}(\Delta\theta)$ от разных типов дефектов [46, 60]: $L_{\text{H}} = \sum_{\alpha=1}^n L_{\text{H}}^{\alpha}$, $\mu_{\text{ds}} = \sum_{\alpha=1}^n \mu_{\text{ds}}^{\alpha}$, где

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

2.2. Динамическая теоретическая модель трёхосевой дифрактометрии кристаллических систем с дефектами

Интенсивность дифрагированного излучения, которое регистрируется трёхосевым дифрактометром (ТОД), зависит от двух углов $\Delta\theta$ и $\Delta\theta'$, которые задают отклонение кристаллов соответственно моно-

хроматора и анализатора от их точных отражающих (брэгговских) положений по отношению к ориентации образца. В случае, когда исследуемый кристалл содержит хаотически распределённые дефекты, эта интенсивность может быть представлена в виде суммы когерентной (I_{coh}) и диффузной (I_{diff}) компонент [47]:

$$I(\Delta\theta, \Delta\theta') = I_{\text{coh}}(\Delta\theta, \Delta\theta') + I_{\text{diff}}(\Delta\theta, \Delta\theta'). \quad (30)$$

При использовании бездисперсионной схемы ТОД ($n, -n', n$) с геометрией дифракции по Брэггу на всех кристаллах кроме образца (на котором реализуется геометрия дифракции по Лауэ с индексами отражения n') когерентную и диффузную компоненты измеряемой интенсивности можно записать в виде [47–49]:

$$\begin{aligned} I_{\text{coh}}(\Delta\theta, \Delta\theta') &= \\ &= I_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx R_{\text{M}}^{n_{\text{M}}} \left\{ b_{\text{M}}^{-1} \left[-b_{\text{S}}^{-1}(x - \Delta\theta) - \Delta\theta \right] \right\} R_{\text{coh}} \left[-b_{\text{S}}^{-1}(x - \Delta\theta) \right] R_{\text{A}}(x - \Delta\theta'), \end{aligned} \quad (31)$$

$$I_{\text{diff}}(\Delta\theta, \Delta\theta') = I_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx R_{\text{M}}^{n_{\text{M}}}(x) \int_{-\infty}^{\infty} dx' r_{\text{diff}}(\mathbf{\kappa}) R_{\text{A}}(x' - \Delta\theta'), \quad (32)$$

а при использовании бездисперсионной схемы ТОД ($n, -n, n$) с геометрией дифракции по Брэггу на всех кристаллах рентгенооптической схемы выражение (31) для когерентной компоненты измеряемой интенсивности следует заменить следующим:

$$\begin{aligned} I_{\text{coh}}(\Delta\theta, \Delta\theta') &= I_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx R_{\text{M}}^{n_{\text{M}}} \left\{ b_{\text{M}}^{-1} \left[b_{\text{S}}^{-1}(x - \Delta\theta) - \Delta\theta \right] \right\} \times \\ &\times R_{\text{coh}} \left[b_{\text{S}}^{-1}(x - \Delta\theta) \right] R_{\text{A}}(x - \Delta\theta'), \end{aligned} \quad (33)$$

где I_0 — интенсивность излучения, которое падает на монохроматор, R_{M} и R_{A} — коэффициенты отражения соответственно монохроматора и анализатора, n_{M} — кратность отражения на монохроматоре, b_{M} и b_{S} — параметры асимметрии монохроматора и исследуемого кристалла, $\mathbf{\kappa} = k_x \mathbf{e}_x + k_z \mathbf{e}_z$, \mathbf{e}_x и \mathbf{e}_z — орты в плоскости рассеяния.

Функция r_{diff} в выражении (32) является проинтегрированной по вертикальной расходимости φ диффузной компонентой дифференциального коэффициента отражения исследуемого кристалла, а R_{coh} для образца в случае лауэ-геометрии в зависимости от того, проходящие или дифрагированные лучи регистрируются детектором ТОД, принимает значение или $R_{\text{coh}} = T$ (34) или $R_{\text{coh}} = R$ (35), которые в соответствии с [50, 51] и формулой (17) в обобщённых переменных приобретают вид:

$$T = \exp[-(\mu_0 + \mu_{ds})t] \frac{1}{4|y^2 + 1|^2} \left\{ \left| y + \sqrt{y^2 + 1} \right|^2 \exp(-Ktw_i) + \right. \\ \left. + \left| y - \sqrt{y^2 + 1} \right| \exp(Ktw_i) - 2 \operatorname{Re} \left[\left(y + \sqrt{y^2 + 1} \right) \left(y - \sqrt{y^2 + 1} \right)^* \exp(iKtw_r) \right] \right\}, \quad (34)$$

$$R = \frac{\exp[-(\mu_0 + \mu_{ds})t]}{4|y^2 + 1|^2} |\zeta|^2 \left\{ \exp(Ktw_i) + \exp(-Ktw_i) - 2 \cos(Ktw_r) \right\}; \quad (35)$$

здесь $w_r = \operatorname{Re} w$, $w_i = \operatorname{Im} w$, $\zeta = \left[(CE\chi_H + \Delta\chi_{H0})(CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H})^{-1} \right]^{1/2}$,

$w = \lambda\Lambda^{-1}\sqrt{y^2 + 1}$, $\Delta\chi_{GG'}$ — дисперсионные поправки к волновым векторам «сильных» брэгговских волн, обусловленные ДР (\mathbf{G} , $\mathbf{G}' = \mathbf{0}$, \mathbf{H}), $\mu_0 = -K\chi_{0i}(1/\gamma_0 + 1/\gamma_H)/2$ — нормальный коэффициент фотоэлектрического поглощения, γ_0 и γ_H — направляющие косинусы соответственно падающей и дифрагированной волн, χ_G и χ_{G_i} — усреднённая по ансамблю дефектов фурье-компонента комплексной поляризуемости кристалла $\chi(\mathbf{r}) = \chi_r(\mathbf{r}) + \chi_i(\mathbf{r})$ и фурье-компонента её мнимой части ($\mathbf{G} = \mathbf{0}$, \mathbf{H}), $E = \exp(-L_H)$ — фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера, а $\mu_{ds} = -K\operatorname{Im}(\Delta\chi_{00}/\gamma_0 + \Delta\chi_{HH}/\gamma_H)/2$ — нормальный коэффициент поглощения, который обусловлен мнимой частью дисперсионных поправок вследствие ДР на дефектах к волновым векторам «сильных» брэгговских волн в случае дифракции по Лауэ.

Как уже отмечалось, при динамическом рассмотрении диффузная составляющая дифференциального коэффициента отражения, в отличие от таковой в кинематической теории, для определённого рефлекса уже не является неизменным при произвольных условиях дифракции единым фурье-изображением полей смещений от дефектов \mathbf{u}_q , а сложным образом изменяется при изменении этих условий, например, толщины кристалла t . Так для Лауэ-дифракции диффузную составляющую можно представить в следующем виде [50, 51]:

$$R_D(\mathbf{k}) = \frac{c(1-c)v_c t}{\gamma_0|y^2 + 1||y'^2 + 1|} \left(\frac{CEK^2}{4\pi} \right)^2 \left| \frac{CE\chi_H + \Delta\chi_{H0}}{CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}} \right| \times \\ \times \sum_{\delta\tau\lambda\sigma} (-1)^{\delta+\tau+\lambda+\sigma} X_{\delta\tau} \sqrt{\zeta'_\delta} \left(X_{\lambda\sigma} \sqrt{\zeta'_\lambda} \right)^* \Pi_{\delta\zeta\lambda\sigma} (\mathbf{H} \cdot \mathbf{u}_{q\delta\tau}) (\mathbf{H} \cdot \mathbf{u}_{q\lambda\sigma})^*, \quad (36)$$

$$X_{\delta\tau} = \frac{\chi_H c'^{(\tau)}}{c^{(\delta)} \zeta'_\delta} - \chi_{-H}, \quad (37)$$

здесь c — концентрация дефектов, а множитель

$$\Pi_{\delta\tau\lambda\sigma} = \frac{\exp[-iKt(\Delta_\delta - \Delta_\lambda^*)] - \exp[-iKt(\Delta'_\tau - \Delta'_\sigma^*)]}{iKt(\Delta'_\tau - \Delta'_\sigma^* - \Delta_\delta + \Delta_\lambda^*)} \quad (38)$$

описывает интерференционное поглощение, в частности, эффект Бормана для диффузного рассеяния, Δ_δ и Δ'_τ — аккомодации волновых векторов когерентных и диффузно рассеянных волн, соответственно.

Аналогично, для случая брэгг-дифракции коэффициенты прохождения (T) и отражения (R) для когерентных волн можно представить в обобщённых переменных в виде [50, 51]:

$$T = 4|y^2 - 1|e^{-(\mu_0 + \mu_{ds})t} \left(|y + \sqrt{y^2 - 1}| e^{Ktw_i} + |y - \sqrt{y^2 - 1}| e^{-Ktw_i} - 2\operatorname{Re} \left\{ \left(y + \sqrt{y^2 - 1} \right)^* \left(y - \sqrt{y^2 - 1} \right) e^{iKtw_r} \right\} \right)^{-1}, \quad (39)$$

$$R = |\zeta| \left(e^{Ktw_i} + e^{-Ktw_i} - 2\cos Ktw_r \right) \left(|y + \sqrt{y^2 - 1}| e^{Ktw_i} + |y - \sqrt{y^2 - 1}| e^{-Ktw_i} - 2\operatorname{Re} \left\{ \left(y + \sqrt{y^2 - 1} \right)^* \left(y - \sqrt{y^2 - 1} \right) e^{iKtw_r} \right\} \right)^{-1}, \quad (40)$$

где $\mu_0 = -K\chi_{0i}(1/\gamma_0 - 1/|\gamma_H|)/2$, $\mu_{ds} = -K\operatorname{Im}(\Delta\chi_{00}/\gamma_0 - \Delta\chi_{HH}/|\gamma_H|)/2$.

Соответственно, диффузную составляющую коэффициента отражения в геометрии дифракции по Брэггу можно представить так [52, 53]:

$$R_D(\mathbf{k}) = \frac{c(1-c)v_c t}{\gamma_0} \left(\frac{CEK^2}{4\pi} \right)^2 \frac{1}{|U|^2 |U'|^2} \times \sum_{\delta\tau\lambda\sigma} (-1)^{\delta+\tau+\lambda+\sigma} X_{\delta\tau} X_{\lambda\sigma}^* \Pi_{\delta\tau\lambda\sigma} (\mathbf{H} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{q}_{\delta\tau}}) (\mathbf{H} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{q}_{\lambda\sigma}})^*, \quad (41)$$

$$X_{\delta\tau} = \frac{c^{(\tau)}}{c^{(\delta)}} \chi_H - \zeta' \chi_{-H}, \quad \Pi_{\delta\tau\lambda\sigma} = \frac{\exp[iKt(\Delta_\delta - \Delta_\lambda^* - \Delta'_\tau + \Delta'_\sigma^*)] - 1}{iKt(\Delta_\delta - \Delta_\lambda^* - \Delta'_\tau + \Delta'_\sigma^*)}, \quad (42)$$

$$|U|^2 = |y + \sqrt{y^2 - 1}| e^{Ktw_i} + |y - \sqrt{y^2 - 1}| e^{-Ktw_i} - 2\operatorname{Re} \left\{ \left(y + \sqrt{y^2 - 1} \right)^* \left(y - \sqrt{y^2 - 1} \right) e^{iKtw_r} \right\},$$

$$|U'|^2 = |y' + \sqrt{y'^2 - 1}| e^{Ktw'_i} + |y' - \sqrt{y'^2 - 1}| e^{-Ktw'_i} -$$

$$-2 \operatorname{Re} \left\{ \left(y' + \sqrt{y'^2 - 1} \right)^* \left(y' - \sqrt{y'^2 - 1} \right) e^{iKtw'_i} \right\},$$

где $w' = w'_r + iw'_i = \lambda \Lambda'^{-1} \sqrt{y'^2 + 1}$, $\zeta' = (CE\chi_{\mathbf{H}} + \Delta\chi'_{\mathbf{H}\mathbf{0}})(CE\chi_{-\mathbf{H}} + \Delta\chi'_{\mathbf{0}\mathbf{H}})^{-1}$ — длина экстинкции для диффузно рассеянных волн, $\Delta\chi'_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}$ — дисперсионные поправки к волновым векторам диффузно рассеянных волн, которые отвечают δ -му листу дисперсионной поверхности для когерентных волн ($\mathbf{G}, \mathbf{G}' = \mathbf{0}, \mathbf{H}$).

Как следует из анализа теоретических результатов разд. 2 в целом, 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 и эффекты их структурной чувствительности, эффект экстинкции за счёт диффузного рассеяния на отклонениях от периодичности кристаллов, эффект аномального роста вклада диффузной составляющей с увеличением толщины кристалла, 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 почти 50 лет. Однако только в самые последние 2–3 года стала проявляться главная их общая особенность, которая позволила радикально изменить облик современной кристаллографии. Приведённые в разд. 2 настоящей статьи теоретические результаты позволяют наглядно и убедительно продемонстрировать эту особенность. Как следует из формул (1)–(42), вскрытая общая особенность состоит в том, что все эти эффекты многократности брэгговского и диффузного рассеяния, в том числе и эффекты взаимного влияния брэгговского и диффузного рассеяния всегда приводят при всем своём многообразии (хотя и к различного рода), но во всех случаях к важному единому результату — к существенной взаимосвязи зависимостей картины динамического рассеяния от условий дифракции, с одной стороны, и от характеристик дефектов, с другой. При кинематической дифракции такие зависимости не влияют одна на другую. Кинематическое рассеяние обладает диагностическими способностями только благодаря единственной в кинематическом случае взаимосвязи зависимостей интенсивности дифрагированного излучения от характеристик дефектов, с одной стороны, и от положения точки наблюдения в пространстве обратной решётки, с другой.

При динамической дифракции кроме этого появляется обусловленная эффектами многократности дополнительная взаимосвязь указанных двух зависимостей с зависимостями интенсивности дифрагированного излучения от достаточно большого числа параметров, характеризующих условия дифракции. Как наглядно демонстрируют формулы динамической теории (1)–(42), указанные зависимости картины динамического рассеяния от условий дифракции и от характеристик дефектов оказываются взаимосвязанными, причём такая взаимосвязь указанных зависимостей достигается за счёт совместного воздействия сразу нескольких конкурирующих эффектов многократности рассеяния, каждый из которых способен обеспечить необходимую взаимосвязь. Однако результат конкуренции сам зависит от условий дифракции и от характеристик дефектов. Эта взаимосвязь и обуславливает многообразность картины динамического рассеяния и радикальное улучшение информативности диффузодинамической диагностики, что и предполагается более подробно рассмотреть ниже и в следующих разделах статьи.

Следует отметить, что полученные выражения для брэгговской и диффузной составляющих картины рассеяния описывают результат взаимодействия волнового поля дифрагирующего излучения и кристалла и по этой причине содержат множители, связанные как с характеристиками кристалла (дефектов), с одной стороны, так и с характеристиками волнового поля (условиями дифракции), с другой. В кинематической теории обусловленные этим зависимости картины рассеяния от условий дифракции и от характеристик дефектов в бесконечном кристалле факторизуются. При этом в бесконечном кристалле распределение интенсивности дифрагированного излучения в пространстве обратной решётки (в импульсном представлении) определяется только множителем в диффузной составляющей, который обусловлен отклонениями от периодичности в кристаллической решётке, вызванными дефектами. Таким образом, распределение картины рассеяния в обратном (импульсном) пространстве непосредственно определяется соответствующими распределениями компонент Фурье полей смещений атомов кристалла от дефектов, а именно распределениями флуктуационных волн в пространстве обратной решётки (по волновым векторам). Второй множитель, определяемый характеристиками дифрагирующего (рассеивающегося) волнового поля (условиями дифракции), не зависит от волнового вектора флуктуационной волны и не содержит зависимости от ориентации волнового вектора падающей на кристалл бегущей (плоской) волны, а определяется только вектором рассеяния на периодической составляющей кристалла, причём этот вектор является фиксированным. В кристаллах конечных размеров появляется свёртка указанного распределения по векторам диффузного рассеяния с компонентами Фурье функции формы кристалла, которая при размерах кристалла

много превышающих длину экстинкции, приводит к несущественному размытию картины рассеяния, одинаковому для всех векторов диффузного рассеяния. В кинематическом случае картина рассеяния не зависит отдельно от волновых векторов начального и конечного состояния рассеяния, а только от их разности, т.е. определяется распределением по векторам диффузного рассеяния. По указанной причине этот сомножитель от рассеивающегося волнового поля оказывается одинаковым для любой точки в пространстве обратной решётки. В результате в кинематическом случае зависимости картины рассеяния от характеристик дефектов и от условий дифракции разделяются и не взаимосвязываются между собой.

Ситуация радикальным образом меняется при переходе к случаю динамического (многократного) рассеяния. При этом учёт все большей степени многократности приводит к увеличению многообразия возможных вариантов вкладов в картину дифракции различных каналов многократного рассеяния. Так, в кинематическом случае картина рассеяния определяется только матричными элементами от двух частей потенциала рассеяния — периодической и флуктуационной, взятыми между начальным и конечным состояниями, которые являются плоскими (бегущими) волнами. Как отмечено выше в обоих этих матричных элементах взаимосвязь зависимостей картины рассеяния от характеристик дефектов и условий дифракции отсутствует. При динамической дифракции дополнительно к отмеченным для кинематического случая появляются вклады в интенсивность дифрагированного излучения за счёт рассеяния брэгговских стоячих волновых полей, сформированных предварительным многократным рассеянием падающей плоской волны на периодической составляющей решётки кристалла, на отклонениях от периодичности, т.е. на флуктуационной составляющей кристаллического потенциала рассеяния (или восприимчивости кристалла). Такие матричные элементы для флуктуационной составляющей кроме отмеченной выше зависимости сомножителя, обусловленного самой этой составляющей, от волновых векторов флуктуационных волн полей смещений, определяемых характеристиками дефектов, приобретают во втором сомножителе, связанном с рассеивающимся стоячим брэгговским волновым полем, определяемым условиями дифракции, дополнительную ориентационную зависимость от волнового вектора проходящей брэгговской волны в сформированном стоячем волновом поле, т.е. от отклонения $\Delta\theta$ падающей на кристалл волны от точного выполнения условия Вульфа–Брэгга, которое варьирует начало вектора рассеяния диффузной волны, изменяющее зависимость этого сомножителя от условий дифракции, так как влияет на структуру и локализацию этого волнового поля. При этом первый сомножитель контролируется варьированием конца волнового вектора диффузной волны, которое определяется характеристиками дефектов кристалла. В результате

при динамической дифракции картина рассеяния характеризуется существенной взаимосвязью зависимостей от характеристик дефектов и от условий дифракции.

Динамическая теория дифракции, рассмотренная в этом разд. 2 статьи, описывает также возможность вкладов в дифракционную картину от кроме уже проанализированных каналов многократного рассеяния, также вклада от канала, в котором учитывается влияние возможной перестройки волнового поля бегущих диффузных волн в стоячие волновые поля за счёт их последующего рассеяния на периодической составляющей рассеивающего кристалла. При этом в дополнение к рассмотренному выше это приведёт к появлению явной ориентационной зависимости в пакете стоячих диффузных волн, его структуры и локализации относительно кристалла от отклонения ($\Delta\theta'$) направления волновых векторов выходящих из кристалла диффузных волновых полей (конца их волновых векторов) от точного выполнения условия Вульфа–Брэгга, которое задаётся характеристиками дефектов, однако связано с зависимостью самой диффузной составляющей волнового поля от условий дифракции. Это обеспечивает дополнительную взаимосвязь зависимости картины динамического рассеяния от характеристик дефектов и от условий дифракции.

3. МНОГООБРАЗНОСТЬ ДИНАМИЧЕСКОЙ КАРТИНЫ РАССЕЯНИЯ В МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ И ИЗДЕЛИЯХ НАНОТЕХНОЛОГИЙ С ДЕФЕКТАМИ И ЕЁ ФИЗИЧЕСКАЯ ПРИРОДА

Рисунки 3–11, полученные с использованием теоретических ре-

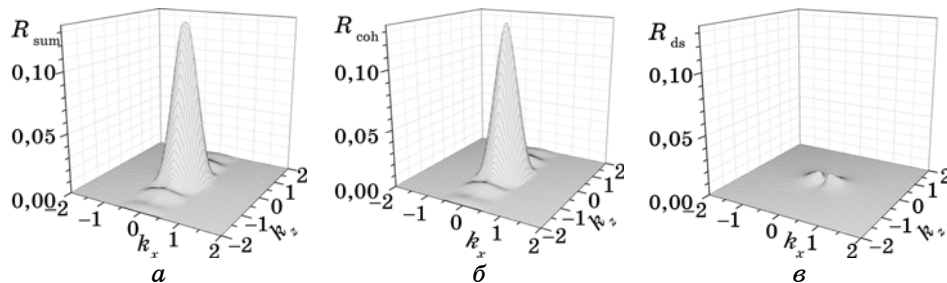


Рис. 3. Двухмерные распределения в плоскости дифракции для полной интенсивности дифракции (а), а также её брэгговской (б) и диффузной (в) составляющих. Случай Лауэ $\text{CuK}_{\alpha 1}$ 220 (сферические преципитаты кислорода в кремнии с $n_c = 4 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$, $R_0 = 0,1 \text{ мкм}$, $R_{\text{eff}} = 0,63 \text{ мкм}$, $\mu_0 t = 0,04$ ($t = \Lambda/7$, $\Lambda = 15,6 \text{ мкм}$ — длина экстинкции), k_x, k_z — отклонения в плоскости рассеяния от узла обратной решётки в единицах, обратных межплоскостному расстоянию d_{220} , $L_H = 0,008$, $\mu_{\text{ds}}(0)/\mu_0 = 0,4$ ($\mu_0 = 15686,7 \text{ м}^{-1}$)).

зультатов разд. 2, наглядно демонстрируют обнаруженную многообразность полной динамической картины рассеяния в кристаллах с дефектами за счёт изменения условий дифракции.

При этом на рис. 3–7 демонстрируется многообразность за счёт изменения толщины образца и геометрии дифракции при фиксированных длине волны и характеристиках дефектов, на рис. 8 и 9 — за счёт изменения длины волны и геометрии дифракции при фик-

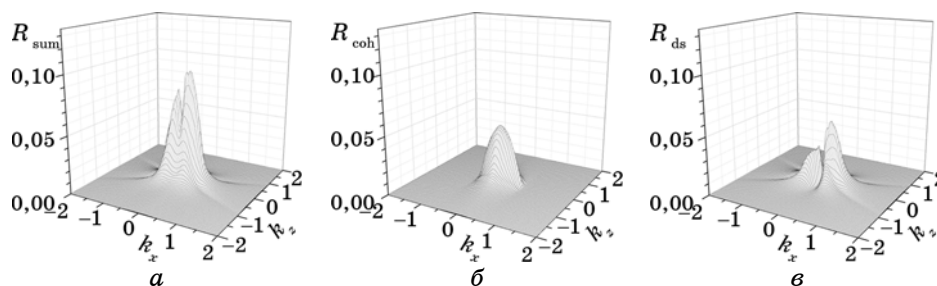


Рис. 4. То же, что и на рис. 3, но при $\mu_0 t = 1$ ($t = 65$ мкм).

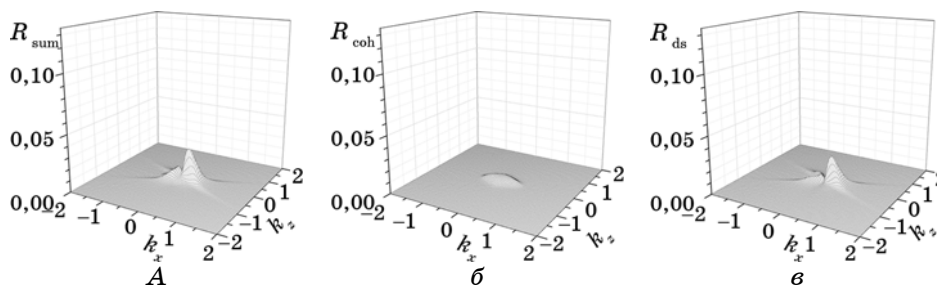


Рис. 5. То же, что и на рис. 3, при $\mu_0 t = 5$ ($t = 320$ мкм).

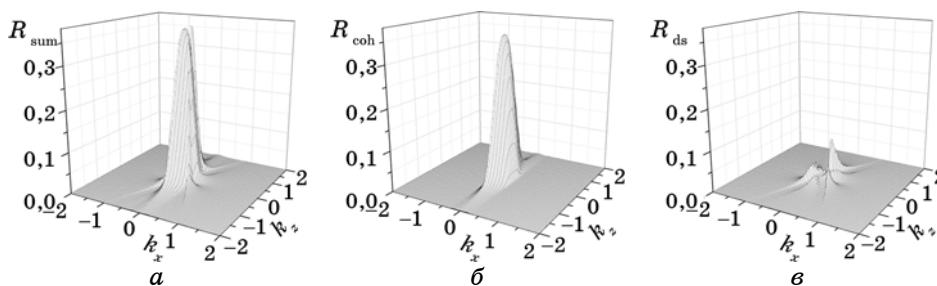
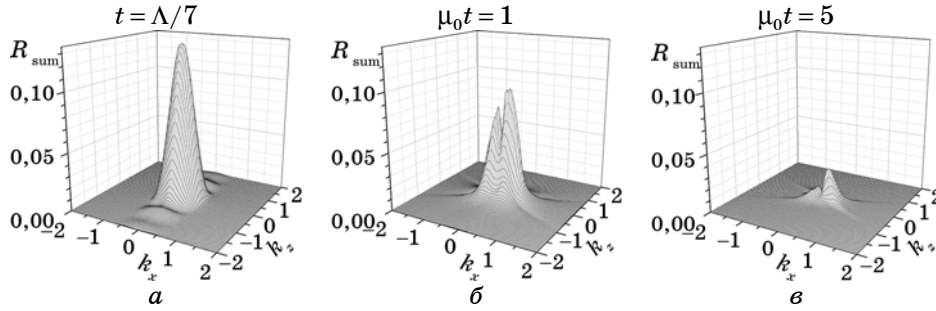


Рис. 6. То же, что и на рис. 3, но в случае Брэгга для $t = 320$ мкм ($\mu_0 t = 11,5$, $\mu_0 = 35818,7 \text{ м}^{-1}$, $\mu_{ds}(0)/\mu_0 = 0,08$). Иллюстрируется изменение картины за счёт изменения геометрии дифракции.

Кластеры



Петли

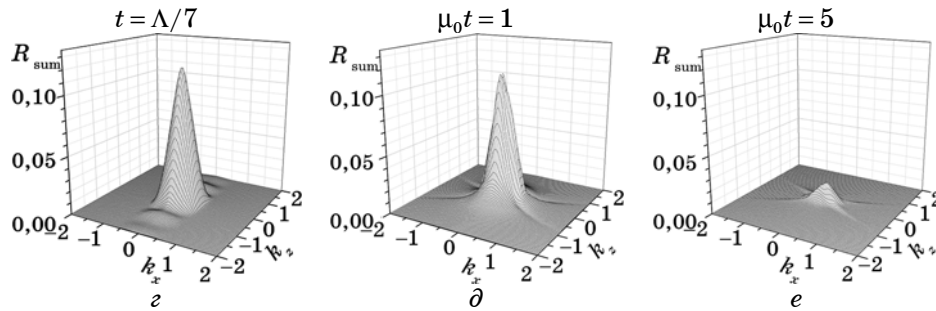


Рис. 7. Распределения полной картины динамического рассеяния при разных толщинах и для разных типов дефектов. Случай геометрии Лауэ, рефлекс $\text{CuK}_{\alpha 1} 220$: *a–в* — кластеры (см. подпись к рис. 3); *z–e* — дислокационные петли с ориентациями вектора Бюргерса $\langle 111 \rangle$ ($n_c = 4 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$, $R_0 = 0,1 \text{ мкм}$, $R_{\text{eff}} = 0,35 \text{ мкм}$, $L_H = 0,12$, $\mu_{\text{ds}}(0)/\mu_0 = 0,25$).

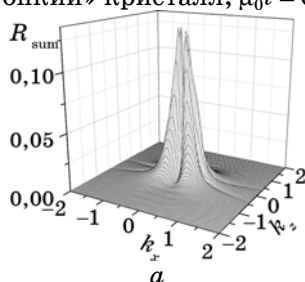
сированной толщине для дефектов разного типа, а на рис. 10 и 11 — за счёт одновременного изменения длины волны и толщины в геометрии Лауэ для случаев тонкого (рис. 10, $\mu t = 1$) и толстого (рис. 11, $\mu t = 5$) кристаллов при варьировании величины отношения длины поглощения к длине экстинкции.

На рисунке 4, по сравнению с рис. 3, наблюдается эффект аномального возрастания вклада диффузной составляющей и изменение в результате этого вида полной картины рассеяния с изменением толщины кристалла.

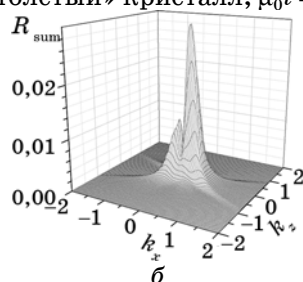
Видоизменение картин на рис. 5 в сравнении с рис. 4 обусловлено эффектами Бормана для брэгговской и диффузной составляющих и экстинкции за счёт диффузного рассеяния, а также различиями проявления этих эффектов для брэгговской и для диффузной составляющих. Рисунки 3, *a*, 4, *a*, 5, *a*, 6, *a* и рис. 7 иллюстрируют многообразие характера влияния дефектов на динамическую картину рассеяния в целом, т.е. многообразие полной картины, при изменении условий дифракции для дефектов разного типа.

Кластеры

MoK_{α1} 220
(«тонкий» кристалл, $\mu_0 t = 0,5$)

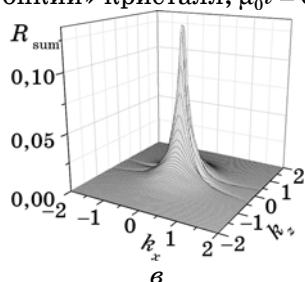


CuK_{α1} 220
(«толстый» кристалл, $\mu_0 t = 5$)



Петли

MoK_{α1} 220
(«тонкий» кристалл, $\mu_0 t = 0,5$)



CuK_{α1} 220
(«толстый» кристалл, $\mu_0 t = 5$)

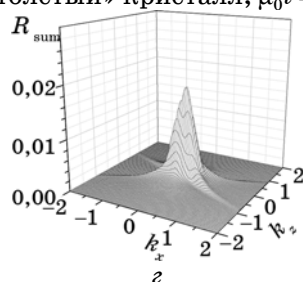
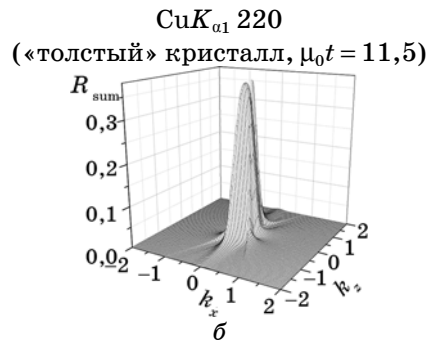
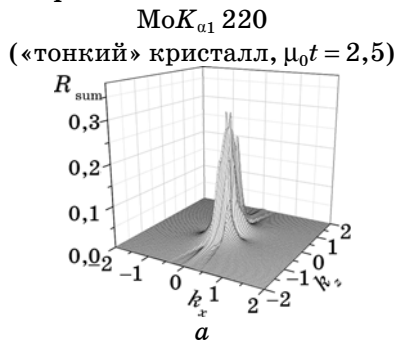


Рис. 8. Распределения полной картины динамического рассеяния в кристалле кремния толщины $t = 320$ мкм для рефлекса 220 в геометрии Лауэ для различных длин волн (a и $в$ — MoK_{α1}; $б$ и $г$ — CuK_{α1}) и разных типов дефектов: a и $б$ — кластеры (см. подпись к рис. 3); $в-г$ — дислокационные петли (см. подпись к рис. 7).

Таким образом, продемонстрированная на рис. 3–11 динамика картины рассеяния и характера влияния на неё дефектов различного типа при изменении условий дифракции различная для дефектов разного типа, оказывается обусловленной конкуренцией совместного влияния всех механизмов проявления эффектов многократности рассеяния, установленных ранее и описанных здесь и ниже более подробно в этой работе. При этом, как следует из анализа, для тонких кристаллов ($\mu_0 t \approx 1$) главную роль играют процессы, связанные с различием влияния эффектов многократности рассеяния и дефектов разного типа на брэгговскую и диффузную составляющие отражательной способности (коэффициента отражения) кристалла, а для толстых кристаллов ($\mu_0 t \gg 1$) — процессы, связанные с различием влияния многократности рассеяния и дефектов разного типа на поглощательные способности (факторы поглощения) для этих составляющих.

Как видно из рис. 3–7 в тонких кристаллах основную роль играет

Кластеры



Петли

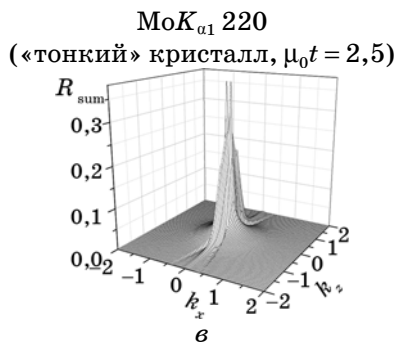


Рис. 9. Распределения полной картины динамического рассеяния в кристалле кремния толщины $t = 320$ мкм для рефлекса 220 в геометрии Брэгга для различных длин волн (*a* и *в* — MoK_{α1}; *б* и *г* — CuK_{α1}) и разных типов дефектов: *a* и *б* — кластеры (см. подпись к рис. 3); *в*–*г* — дислокационные петли (см. подпись к рис. 7).

эффект аномального возрастания с увеличением толщины кристалла вклада диффузной составляющей, обусловленный различием на несколько порядков величин эффектов экстинкции за счёт брэгговского и за счёт диффузного рассеяний. В толстых кристаллах главную роль играет различие между брэгговской и диффузной составляющими по характеру влияния дефектов разного типа на проявления для них эффектов Бормана и эффектов экстинкции за счёт диффузного рассеяния. При этом результативностью проявления указанных эффектов (рис. 10, 11) оказалось возможным управлять путём изменения отношения длины абсорбции к длине экстинкции, т.е. изменения вклада диффузной составляющей и вкладов от дефектов разного типа.

Таким образом, с изменением условий дифракции изменяются определяющие механизмы эффектов многократности и соотношение вкладов брэгговской и диффузной составляющих и вкладов от дефектов разного типа, и это приводит к изменению характера (и даже

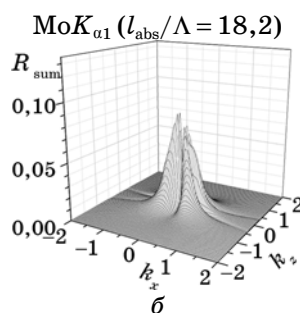
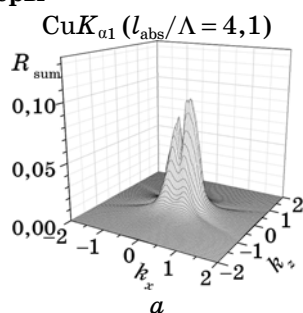
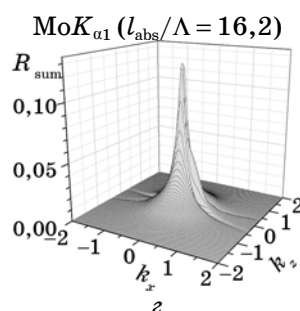
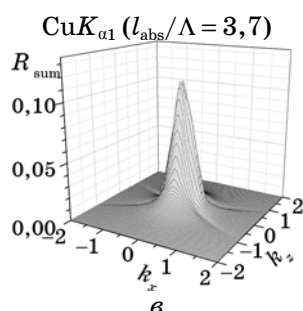
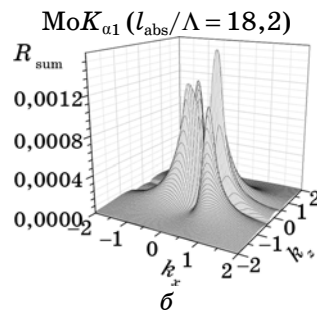
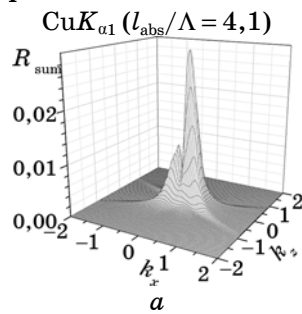
Кластеры**Петли**

Рис. 10. Распределения полной картины динамического рассеяния для рефлекса Si (220) в геометрии Лауэ для разных типов дефектов и разных длин волн (*a* и *в* — $\text{CuK}_{\alpha 1}$; *б* и *г* — $\text{MoK}_{\alpha 1}$) при $\mu_0 t = 1$ и, соответственно, при разных отношениях длины абсорбции ($l_{\text{abs}} = \mu_0^{-1}$) к длине экстинкции: *a–б* — сферические преципитаты кислорода (параметры кластеров в подписи к рис. 3, только для рис. *б* — $t = 700$ мкм и $\mu_{\text{ds}}(0)/\mu_0 = 1,31$); *в–г* — дислокационные петли с ориентациями вектора Бюргера $\langle 111 \rangle$ (параметры петель в подписи к рис. 7, только для рис. *г* — $t = 700$ мкм, $\mu_{\text{ds}}(0)/\mu_0 = 0,67$).

знака) влияния дефектов на динамическую картину рассеяния, т.е. дефекты могут как уменьшать, так и увеличивать интенсивность рассеяния в любой точке пространства обратной решётки, как и интегральную интенсивность, по сравнению с таковой в идеальном кристалле и при этом очень существенно (на порядок величины).

Различие зависимостей всех перечисленных здесь эффектов многократности рассеяния от характеристик дефектов разного типа так же, как и от условий дифракции, обеспечивают уникально чувствительную к характеристикам дефектов многообразность динамической картины, связанную с зависимостью от условий дифракции характера результирующего влияния дефектов разного типа на картину рассеяния, и обуславливают качественно новые функциональные возможности информативности диагностики, в частности, возможность многопараметрической дифрактометрии.

Кластеры



Петли

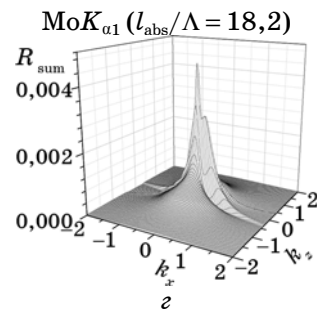
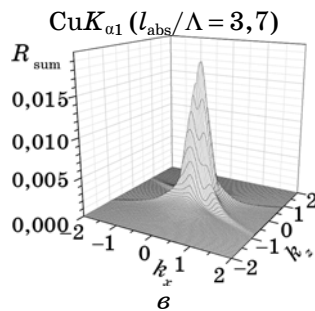


Рис. 11. Распределения полной картины динамического рассеяния для рефлекса Si (220) в геометрии Лауэ для разных типов дефектов и разных длин волн (*a* и *в* — CuK_{α1}; *б* и *г* — MoK_{α1}) при $\mu_0 t = 5$ и, соответственно, при разных отношениях длины абсорбции к длине экстинкции: *a*–*б* — сферические преципитаты кислорода (параметры кластеров в подписи к рис. 3 и 10, только для рис. *б* — $t = 3400$ мкм); *в*–*г* — дислокационные петли с ориентациями вектора Бюргерса $\langle 111 \rangle$ (параметры петель в подписи к рис. 7 и 10, только для рис. *г* — $t = 3400$ мкм).

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ АНАЛИЗА ВЛИЯНИЯ ХАРАКТЕРИСТИК ДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛАХ И УСЛОВИЙ ДИФРАКЦИИ НА КИНЕМАТИЧЕСКУЮ И ДИНАМИЧЕСКУЮ КАРТИНЫ РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ, НЕЙТРОНОВ, ЭЛЕКТРОНОВ И ДРУГИХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

4.1. Кинематический случай

Потенциал рассеяния излучения в кристаллах с дефектами, в отличие от такового для идеального кристалла, становится непериодическим и зависящим от случайных переменных, характеризующих распределение дефектов в кристалле. В теории Кривоглаза [7] такой непериодический потенциал представлен в виде суммы двух слагаемых. Первое из них — это усреднённый по случайным пере-

менным при фиксированных параметрах кристалла потенциал, который становится периодическим при хаотическом (однородном) распределении дефектов. При этом параметр периодичности отличается от аналогичного в идеальном кристалле. Второе слагаемое — флуктуационная часть, описывающая отклонения от этой новой периодичности. Периодическая часть, в отличие от модели потенциала для идеального кристалла, оказывается зависящей от статистических характеристик дефектов (в основном за счёт фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера, который Кривоглаз называл статическим фактором Дебая–Валлера) и описывает брэгговское рассеяние, которое непосредственно формируется соответствующей периодической частью потенциала реального кристалла. Зависимости интенсивности брэгговского рассеяния от других параметров, характеризующих условия дифракции, остаются такими же, как и в идеальном кристалле, и описываются отдельным множителем.

Часть потенциала реального кристалла, соответствующая введённому флуктуационному слагаемому, непосредственно формирует диффузное рассеяние (ДР), распределение интенсивности которого в пространстве обратной решётки, выраженное Кривоглазом с помощью разработанного им метода флуктуационных волн через характеристики дефектов, оказалось наиболее информативным при диагностике дефектов по характеру их результирующего влияния на полную кинематическую картину рассеяния (сумму её брэгговской и диффузной составляющих). При этом характер такого влияния для любого фиксированного рефлекса не зависит от параметров, определяющих условия дифракции, как для случая полной интегральной интенсивности рефлекса, так и для распределения её значений в каждой точке пространства обратной решётки. Последнее связано с тем, что появление дефектов всегда приводит к уменьшению брэгговской составляющей рассеяния и увеличению диффузной, а характер результирующего влияния дефектов на полную (суммарную) интенсивность определяется соотношением вкладов этих составляющих.

Как показывает анализ, в кинематической теории указанное соотношение не зависит от условий дифракции, поскольку зависимости обеих составляющих от этих условий оказываются одинаковыми (такими, как в идеальном кристалле, для каждой из составляющих — как интегральных, так и составляющих для любой отклонённой от узла точки пространства обратной решётки) и не влияют на их отношение. При этом важно, что зависимости как брэгговского, так и диффузного рассеяний от волновых векторов и характеристик дефектов, с одной стороны, и от условий дифракции, с другой, факторизуются и не влияют одна на другую. Распределение диффузного рассеяния в пространстве обратной решётки оказывается прямым однозначным фурье-изображением полей смещений ато-

мов от дефектов в кристалле. Полуширина или интегральная ширина брэгговских распределений от дефектов не зависят и определяются только размером и формой кристалла (функцией формы), а зависимость брэгговской интенсивности от характеристик дефектов определяется только отдельным фактором Кривоглаза–Дебая–Валлера, который для фиксированных отражений не зависит от условий дифракции.

4.2. Случай динамического рассеяния

При динамической дифракции, как следует из анализа результатов работ [20–24], вследствие многократности процессов рассеяния и брэгговская, и диффузная составляющие интенсивности определяются именно обеими частями потенциала. Это приводит к тому, что *динамическое брэгговское рассеяние* описывается не средним, как у Кривоглаза, а дополнительно перенормированным за счёт перерассеяния на флуктуационной части эффективным периодическим потенциалом (комплексным и нелокальным). Этот эффективный потенциал существенно отличается от среднего по конфигурациям дефектов.

Главное отличие — *появление уникально структурночувствительного фактора экстинкции вследствие диффузного рассеяния* [20]. Это новое фундаментальное понятие динамической теории впервые введено в работе В. Б. Молодкина и Е. А. Тихоновой [20], в которой установлены физическая природа и зависимости этого фактора от характеристик дефектов и условий дифракции. Данный фактор описывает предсказанный авторами работы [20] эффект ослабления брэгговских и диффузных волн вследствие их рассеяния на отклонениях от периодичности потенциала (первоначально названный эффектом эффективного поглощения). При этом за счёт эффекта, описываемого этим фактором, а также эффектов влияния дефектов на связанные непосредственно с многократностью рассеяния на самом эффективном периодическом потенциале динамические эффекты, которые аналогичны динамическим эффектам в идеальных кристаллах, интенсивность брэгговских отражений, оказалась значительно более чувствительной к характеристикам дефектов при динамической дифракции, чем таковая в кинематическом случае, определяемая только одним фактором Кривоглаза–Дебая–Валлера.

Кроме того, появились отличия от кинематического случая в зависимости интенсивности брэгговских отражений от условий дифракции, которые теперь из-за динамических интерференционных эффектов и, следовательно, блоховского характера закона дисперсии для рассеянных в кристаллах частиц, стали различными для разных волновых векторов рассеивающегося излучения (разных отклонений от точного условия Вульфа–Брэгга), причём эта зависимость «перепуталась» с зависимостью от характеристик дефектов.

То есть эти зависимости от условий дифракции и характеристик дефектов интенсивности брэгговских отражений стали существенно взаимосвязанными вследствие появления указанного выше фактора экстинкции из-за диффузного рассеяния, а также эффекта зависимости от характеристик дефектов коэффициента интерференционного поглощения, описанных в разд. 2 настоящей статьи.

Главной динамической особенностью диффузного рассеяния в соответствии с формулами разд. 2 оказалась обнаруженная существенная зависимость характера его распределения в пространстве обратной решётки не только от характеристик дефектов, но и от условий дифракции, т.е. взаимосвязь зависимостей картины диффузного рассеяния от условий дифракции и от характеристик дефектов. При этом сами зависимости непосредственно от характеристик дефектов существенно усложнились по сравнению с кинематическими за счёт эффектов многократности и также «перепутались» с зависимостями от параметров, определяющих условия дифракции. Зависимости от условий дифракции, в свою очередь, стали зависеть отдельно от начал ($\Delta\theta$) и от определяемых характеристиками дефектов распределений концов ($\Delta\theta'$) векторов рассеяния (см. разд. 2).

Как показано в [20–24], многократное перерассеяние диффузных волн на периодической части потенциала преобразует их в блоховские волновые поля, для которых в [25–27] были предсказаны *эффекты аномального прохождения и экстинкции диффузного рассеяния*, получившие многократное теоретическое [71–73] и экспери-

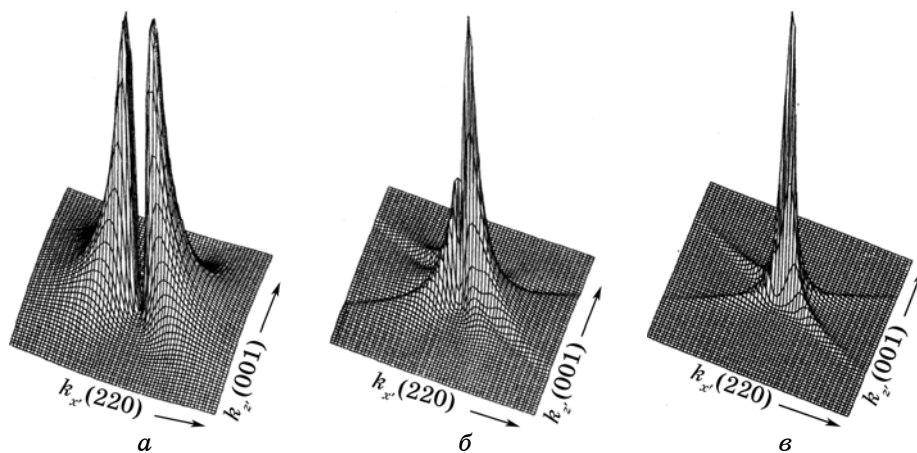


Рис. 12. Изменение картины рассеяния (трёхмерных изображений двумерных распределений интенсивности диффузного рассеяния в плоскости дифракции) с увеличением толщины t кристалла от $\mu_0 t = 0,027$ (*a*) до $\mu_0 t = 1,34$ (*б*) и $\mu_0 t = 5,36$ (*в*) иллюстрирует явление аномального прохождения диффузного рассеяния (μ_0 — коэффициент фотоэлектрического поглощения).

ментальное [48] подтверждения. Указанные эффекты *изменяют характер картины диффузного рассеяния при фиксированной дефектной структуре за счёт изменения только дифракционных параметров, причём существенно сильнее, чем за счёт изменения самих характеристик дефектов*, что иллюстрируется на рис. 12 и 13.

Из рисунка 12 видно, как радикально изменяются с возрастанием эффективной толщины кристалла трёхмерные изображения, показывающие распределение интенсивности диффузного рассеяния в пространстве обратной решётки для кристалла кремния, содержащего мелкие сферические кластеры. При этом (рис. 12, *в*) в отличие от случая эффекта Бормана в идеальных кристаллах появляются не один, а два хребта, один из которых, обусловленный эффектом аномального прохождения (стоячим характером волнового поля) брэгговской составляющей, соответствует точному брэгговскому положению падающего луча (монокроматора), а другой, обусловленный

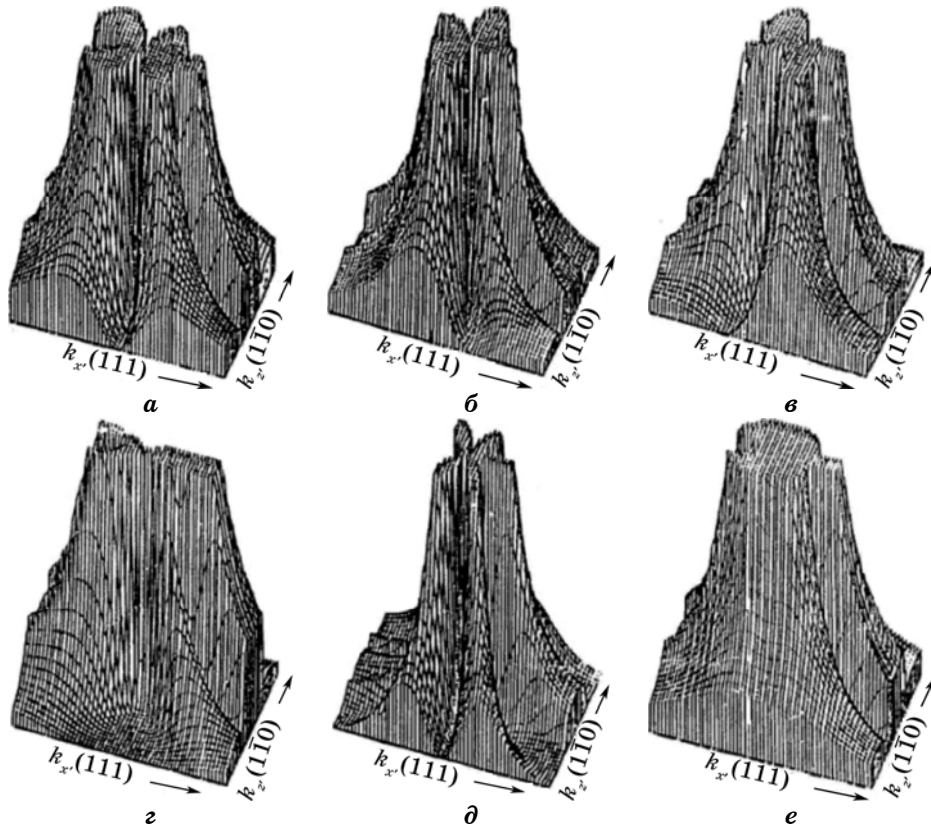


Рис. 13. Рентгеновские фурье-изображения полей смещений вокруг дефектов разного типа (дислокационных петель различной ориентации) [27].

аномальным прохождением (стоячим характером волнового поля) диффузных волн, соответствует точному брэгговскому положению дифрагированного луча (анализатора).

Кроме того, на пересечении этих хребтов появляется высокий пик, связанный с совместным действием указанных эффектов. Следует отметить, что пик на рис. 12, *б* в 40 раз выше, чем каждый из двух пиков на рис. 12, *а*.

В динамической картине эффекты многократного рассеяния вследствие их зависимости отдельно от начала и от конца вектора дифракции, т.е. от расположения точки наблюдения в пространстве обратной решётки относительно узла обратной решётки, как бы маскируют прямое (кинематическое) влияние дефектов, которое при диагностике необходимо демаскировать, используя соответствующие формулы динамической теории. Дело в том, что в кинематической теории зависимости от условий дифракции как отражающей, так и поглощающей способностей кристалла для брэгговской и диффузной составляющих одинаковы; при этом они не зависят от характеристик дефектов и от отклонений от точного условия Вульфа–Брэгга или от отклонения точки наблюдения в пространстве обратной решётки относительно исследуемого узла обратной решётки. В свою очередь распределения интенсивностей рассеяния в пространстве обратной решётки определяются функцией формы, т.е. только формой и размерами кристалла, и распределением в обратном пространстве фурье-компонент полей смещений атомов от дефектов.

Вид картины рассеяния (характер распределений интенсивности дифрагированного излучения в пространстве обратной решётки) в кинематической теории не зависит от условий дифракции, и, следовательно, характер влияния дефектов на кинематическую картину рассеяния также не зависит от этих условий.

В динамической теории появляется зависимость от отклонений относительно узла обратной решётки, т.е. от положения исследуемой точки в пространстве обратной решётки, как коэффициента преломления, так и коэффициента поглощения, и, следовательно, отражающей и поглощающей способностей кристалла, которые и определяют зависимость картины рассеяния от условий дифракции.

В результате при динамической дифракции из-за динамических интерференционных эффектов и, следовательно, блоховского характера закона дисперсии для рассеянных в кристаллах частиц эта зависимость от условий дифракции оказывается различной для разных точек пространства обратной решётки. Таким образом, условия дифракции по-разному влияют на картину рассеяния в различных областях пространства обратной решётки, т.е. влияние условий динамической дифракции приобретает ориентационную зависимость от отклонений направлений падающих на кристалл ($\Delta\theta$) и выходящих ($\Delta\theta'$) лучей относительно условий Вульфа–Брэгга. А поскольку де-

фекты разного типа дают определяющий вклад в различные области пространства обратной решётки, то зависимости распределения интенсивности рассеянного излучения в пространстве обратной решётки от характеристик дефектов и от условий дифракции оказываются взаимосвязанными за счёт указанных ориентационных зависимостей и, следовательно, появляется возможность управлять вкладами дефектов разного типа в картину рассеяния целенаправленным усилением вкладов определённых областей пространства обратной решётки путём изменения условий дифракции при динамическом рассеянии. Такая возможность принципиально отсутствует при кинематическом рассеянии и возникает только при динамической дифракции. По сути, здесь раскрывается природа эффекта изменения избирательности чувствительности динамической картины к дефектам разного типа при изменении условий дифракции, который впервые был установлен для случая интегральной дифрактометрии кристаллов с дефектами нескольких типов в работе [34].

Таким образом, в кинематической картине рассеяния распределение интенсивности в пространстве обратной решётки определяется соответствующим распределением в обратном пространстве фурье-компонент поля смещений, вызванных дефектами, и характер этого распределения не зависит от условий дифракции.

При динамической дифракции распределение интенсивности в картине рассеяния определяется конкуренцией распределений в пространстве обратной решётки фурье-компонент полей смещений атомов от дефектов и возникающего только при динамическом рассеянии распределения в обратном пространстве величин множителей, которые зависят от условий дифракции по-своему для каждого типа дефектов. В результате при динамической дифракции характер влияния дефектов на динамическую картину рассеяния зависит взаимосвязанным образом, как от характеристик дефектов, так и от условий дифракции. При этом указанные зависимости определены в рамках построенной динамической теории, что обеспечивает возможность их целенаправленного изменения для повышения информативности динамической дифрактометрии. Отметим, что работа [27] была первым шагом, касающимся только диффузного рассеяния, на пути к раскрытию природы многообразности динамической картины рассеяния в целом, связанной с изменением характера влияния дефектов на эту картину при изменении условий дифракции. Установленные зависимости картин диффузного рассеяния от толщины (рис. 12) более существенны, чем от типа дефектов, представленные на рис. 13, по причинам, которые впервые детально излагаются в настоящем обзоре.

Следует отметить, что дальнейшие обобщения динамической теории рассеяния в кристаллах с дефектами, созданной в [20–27], и её развитие, направленное на совершенствование и создание более об-

ших методических подходов, а также расширения областей их применимости успешно реализованы в последующих работах [28–85], результаты которых подтверждают те основные результаты и выводы работ [20–27], которые представлены в настоящем обзоре. Кроме того, отметим ставшую классической работу Като [80], которая по названию совпадает с тематикой работ [20–79, 81–85], 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 [20–79, 81–85], не даёт. При этом, как и большинство работ [74–79], теория Като основана на решении уравнений Такаги, которые справедливы только для плавных полей смещений и по этой причине неприменимы или недостаточно корректны количественно для микродефектов, особенно наноразмерных дефектов.

Таким образом, первый шаг к пониманию явления многообразности полной динамической картины рассеяния был реализован [27] ещё в 1988 г., когда была показана принципиальная возможность управления характером распределения диффузной составляющей картины рассеяния при динамической дифракции посредством изменения толщины образца, что в принципе не может быть осуществлено при кинематическом рассеянии.

Следует отметить, что обнаруженная многообразность характера распределения диффузного рассеяния качественно отличается не только более сложным характером проявления собственно эффектов многократности для диффузного рассеяния от известной многообразности динамической картины рассеяния в идеальных кристаллах, обусловленной возникающей из-за динамических интерференционных эффектов (и, следовательно, блоховского характера закона дисперсии для частиц, рассеянных в кристаллах) зависимостью коэффициентов преломления и поглощения (α значит, и определяемого ими характера влияния условий дифракции на интенсивность рассеяния) от положения точки наблюдения в пространстве обратной решётки.

Главное отличие состоит в том, что в идеальных кристаллах многообразность, хотя она и обусловлена эффектами многократности (однако только брэгговского рассеяния), не связана с изменением характера влияния дефектов на картину рассеяния при изменении условий дифракции. Дефекты и диффузное рассеяние в идеальном кристалле вообще отсутствуют, однако, в случае кристаллов с дефектами из-за возникновения конкуренции влияния положений и начала ($\Delta\theta$) и конца ($\Delta\theta'$) вектора рассеяния на зависимости карти-

ны рассеяния от характеристик дефектов и от условий дифракции, которое и обеспечивает взаимосвязь этих зависимостей, а также из-за появления дополнительно «перепутывающих» эти зависимости динамических факторов (таких, как фактор диффузной экстинкции, фактор интерференционного поглощения и др.) и, кроме того, из-за взаимосвязи через $\Delta\theta$ и $\Delta\theta'$ влияния и характеристик дефектов и условий дифракции даже на сам пакет стоячих диффузных волн, многообразность динамической картины диффузного рассеяния приобретает новое, существенно повышающее информативность диагностики, качество. А именно, появляется структурная чувствительность многообразности, т.е. связь многообразности с изменением характера влияния дефектов на динамическую картину рассеяния при изменении условий дифракции. Причём именно это изменение характера влияния дефектов, зависящее и от типа дефектов, непосредственно участвует в формировании конкретного характера наблюдаемой многообразности картин, а не только самого факта многообразности.

Как отмечено, это обусловлено совместным влиянием на динамическую картину рассеяния зависимости от положения точки наблюдения в пространстве обратной решётки не только факторов, описывающих влияние характеристик дефектов, но и появившейся аналогичной зависимости факторов, характеризующих влияние условий дифракции. В результате теперь многообразность картины — это, в том числе, и многообразность характера влияния дефектов на картину в разных условиях дифракции, обеспечивающая её структурную чувствительность с повышенной информативностью.

Вторым шагом, который увеличил структурную чувствительность, обусловленную многообразностью, оказалось предсказание в [38–41] эффекта аномального возрастания с увеличением толщины кристалла вклада диффузной составляющей, который был обусловлен установленным в этих работах существенным различием (на несколько порядков величины) эффектов экстинкции вследствие брэгговского и вследствие диффузного рассеяний. Этот эффект изменения вклада диффузного рассеяния с изменением толщины, как впервые указано в работах [8–15], существенно усилил отмеченную зависимость от условий дифракции характера влияния дефектов на полную картину рассеяния и стал одним из основных факторов, определяющих информативность диагностики в случае динамической дифракции. Это происходит, как показано в [8–15], за счёт открытой [38–41] зависимости от толщины кристалла (а впоследствии открытой в [8–15] зависимости и от других условий динамической дифракции) соотношения вкладов в картину рассеяния её брэгговской и диффузной составляющих.

Описанные эффекты, установленные в отдельных отмеченных выше случаях [20–27, 38–41], оказались, как показано в разд. 2, 3,

частными механизмами, конкуренция между которыми и обеспечивает возникновение установленного и описанного впоследствии в работах [8–15] общего явления зависимости от условий дифракции (не только от толщины, но и от любых других факторов) характера результирующего влияния дефектов на полную картину рассеяния, т.е. явления многообразности полной динамической картины рассеяния в кристаллах с дефектами, которое существенно повышает информативность и улучшает и другие функциональные возможности диагностики дефектов, основанной на открытой уникальной структурной чувствительности зависимостей картины динамического рассеяния от параметров, характеризующих условия дифракции.

5. ПРИНЦИПЫ, ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ, ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ И МЕТОДИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ РЕШЕНИЯ ПРОБЛЕМЫ МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ДИАГНОСТИКИ

5.1. Обоснование путём моделирования целесообразности использования эффекта многообразности и комбинированного подхода для создания многопараметрической кристаллографии

Для иллюстрации возможности многопараметрической диагностики, основанной на динамической теории, проведён численный эксперимент. Смоделирована «экспериментальная» картина рассеяния для кристалла с дефектной структурой, приведённой во второй ко-

ТАБЛИЦА 1. Количественные характеристики (R -фактор) отклонения «экспериментальной» картины рассеяния от картин рассеяния, смоделированных для трёх типов дефектных структур, в зависимости от условий дифракции (эффективной толщины кристалла).

Условия дифракции \ Параметры дефектов	Истинные два типа петель $R_1 = 200$ нм, $n_1 = 2,05 \cdot 10^{11}$ см ⁻³ ; $R_2 = 100$ нм, $n_2 = 1,54 \cdot 10^{12}$ см ⁻³	Восстановленные два типа петель $R_1 = 180$ нм, $n_1 = 2,87 \cdot 10^{11}$ см ⁻³ ; $R_2 = 110$ нм, $n_2 = 1,2 \cdot 10^{12}$ см ⁻³	Восстановленный один тип петель $R_1 = 150$ нм, $n_1 = 9,43 \cdot 10^{11}$ см ⁻³
кинематически «тонкий» кристалл ($\mu_0 t = 0,03$)	4,88%	4,89%	4,91%
динамически «тонкий» кристалл ($\mu_0 t = 1$)	4,56%	6,42%	7,33%
«толстый» кристалл ($\mu_0 t = 10$)	4,27%	5,95%	5,97%

лонке табл. 1, с учётом точности реального эксперимента, обеспечивающей наилучшую подгонку с R -фактором $\cong 4-5\%$. Как видно из табл. 1 в случае кинематически тонкого кристалла как истинная дефектная структура (вторая колонка таблицы), так и восстановленные в результате независимой подгонки (третья и четвертая колонки таблицы), дают одинаково хороший результат (R -фактор на уровне погрешности эксперимента $\cong 4-5\%$), т.е. приведённые в таблице дефектные структуры в кинематическом подходе неразличимы. При изменении условий дифракции (увеличении эффективной толщины кристалла, например, за счёт изменения длины волны излучения) картина рассеяния, предсказываемая кинематической теорией, изменяться не будет. В то же время, в динамической теории при переходе к динамически «тонкому» и «толстому» кристаллам из-за причин, изложенных выше, которые обусловили многообразность динамической картины дифракции, различия между картинами рассеяния для приведённых в табл. 1 структур дефектов нескольких типов увеличатся (увеличится R -фактор для восстановленных дефектных структур), т.е. всем экспериментальным условиям будет удовлетворять только истинная дефектная структура.

Таким образом, именно обнаруженное явление многообразности динамической картины рассеяния породило многопараметрическую кристаллографию. Зависимости от условий дифракции вкладов диффузной составляющей и удельных вкладов дефектов каждого типа в картину рассеяния и их существенные отличия друг от друга создают основу для разработки принципов решения проблемы однозначной многопараметрической диагностики. В результате, применение методов диффузодинамической многопараметрической дифрактометрии позволяет однозначно восстанавливать параметры сложных дефектных структур.

5.2. Экспериментальная апробация многопараметрической диффузодинамической комбинированной дифрактометрии кристаллов с несколькими типами дефектов

В данном разделе приведены результаты проведённой с использованием явления многообразности путём комбинирования высоко разрешающих рентгеновских дифракционных методов количественной диагностики сложных дефектных структур в кристаллах кремния, выращенных методом Чохральского (Cz-Si). Концентрации и средние радиусы дислокационных петель и преципитатов кислорода определены с использованием комбинированной обработки карт обратного пространства (рис. 14 и 15) и кривых дифракционного отражения (рис. 16), основанной на аналитических формулах статистической динамической теории дифракции рентгеновских лучей неидеальными кристаллами со случайно распределён-

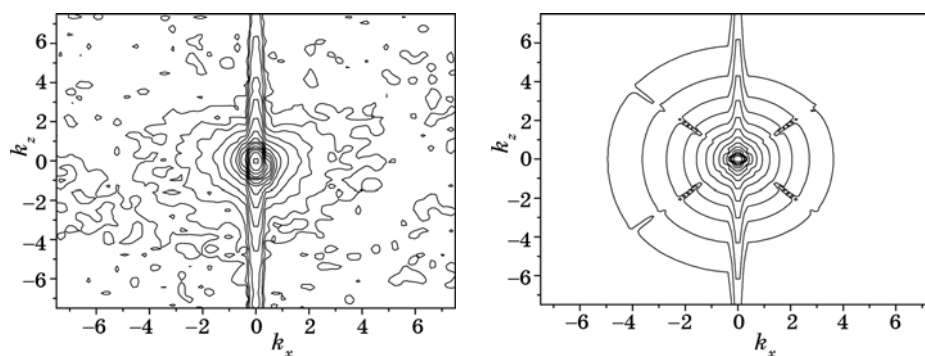


Рис. 14. Экспериментальная (слева) и рассчитанная (справа) карты обратного пространства образца Cz-Si, геометрия Брэгга, рефлекс 333, $\text{CuK}\alpha_1$ излучение (k_x и k_z измеряются в $\text{glu} \cdot 10^{-4}$).

ными дефектами нескольких типов (1)–(45). Результаты комбинированной диагностики представлены в табл. 2.

Измерения на трёхосевом дифрактометре (ТОД) в режиме ω -сканирования без кристалла анализатора дают дифференциальную отражательную способность исследуемого образца, проинтегрированную по сфере Эвальда, т.е. кривую дифракционного отражения (КДО).

Диффузная компонента КДО в случае геометрии дифракции по Брэггу может быть записана в приближении полубесконечного кристалла как [82]:

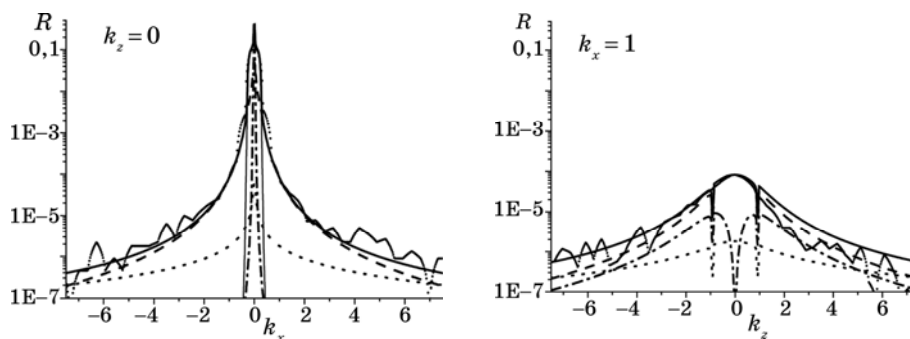


Рис. 15. Поперечное (слева) и продольное (справа) сечения карты обратного пространства, измеренной на ТОД (см. рис. 14). Измеренный профили представлены соответственно маркерами и толстой сплошной линией, последний содержит когерентную компоненту и вклады в ДР от крупных и мелких дислокационных петель и сферических преципитатов кислорода (тонкая сплошная, штрихпунктирная, пунктирная и штриховая линии соответственно).

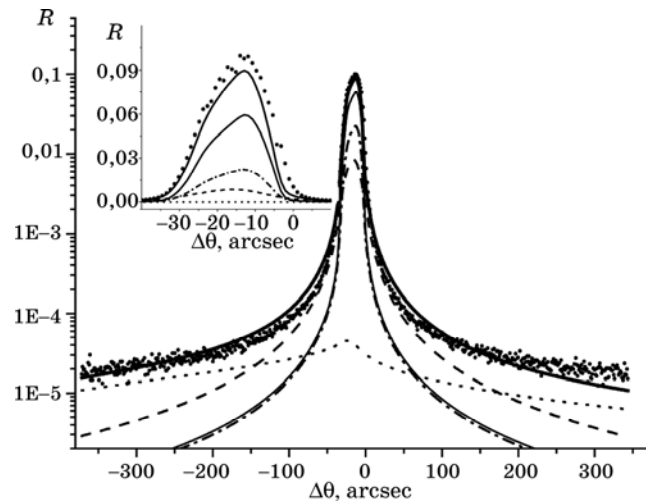


Рис. 16. Экспериментальные и теоретические кривые отражения (соответственно маркёры и толстые линии) для образца Cz-Si, рефлекс 333, излучение $\text{CuK}\alpha_1$. Остальные линии такие же, как на рис. 15. На вставках показаны центральные части КДО.

$$R_{\text{diff}}(\Delta\theta) \approx F_{\text{dyn}}(\Delta\theta)\mu_{\text{HH}}(\Delta\theta)/(2\gamma_0\mu_i), \quad (43)$$

где фактор $F_{\text{dyn}} \cong 1$ описывает угловую модуляцию интенсивности диффузного рассеяния (ДР), вызванную динамической интерференцией сильных брэгговских волн. Интерференционный коэффициент поглощения μ_i описывает эффект экстинкции для диффузных волн и в области полного отражения он может быть оценён как $\mu_i \cong \pi/\Lambda$, а вне её как $\mu_i \approx (1 + b)\mu_0/(2\gamma_0)$.

Дисперсионная поправка в следствии ДР μ_{HH} в выражении (43) является суммой коэффициентов поглощения из-за ДР для каждого дефекта типа α с i -м размером $\mu_{\text{ds}}^{\alpha i}$:

$$\mu_{\text{HH}}(\Delta\theta) = \mu_{\text{ds}}(k_0) = \sum_{\alpha} \sum_i \mu_{\text{ds}}^{\alpha i}(k_0), \quad (44)$$

ТАБЛИЦА 2. Характеристики дислокационных петель (радиус R_L , концентрация n_L) и преципитатов кислорода (R_p , n_p) в образце Cz-Si.

Дислокационные петли		Преципитаты кислорода		$R, \%$	$R_w, \%$
$R_L, \text{мкм}$	$n_L, \text{см}^{-3}$	$R_p, \text{мкм}$	$n_p, \text{см}^{-3}$		
0,002	$1 \cdot 10^{16}$	1	$5 \cdot 10^6$	17	21
0,12	$7 \cdot 10^{11}$				

где $k_0 = K\Delta\theta\sin(2\theta_B)$, θ_B — угол Брэгга. Выражения (43) и (44) описывают вклады от дефектов нескольких типов в интенсивность ДР на измеряемых дифракционных профилях и поглощение когерентной компоненты рассеяния из-за ДР соответственно (см. рис. 16).

Исследуемый образец кремния с ориентацией поверхности (111) и толщиной ($t \approx 4,26$ мм) был вырезан из слитка, выращенного методом Чохральского, с осью роста $\langle 111 \rangle$. Карты обратного пространства исследуемого образца были измерены на дифрактометре PANalytical X'Pert Pro MRD XL для симметричного Si(333) рефлекса характеристического $\text{CuK}_{\alpha 1}$ -излучения. Дополнительно, КДО были измерены для рефлекса Si(333) в режиме ω -сканирования на ТОД без использования кристалла анализатора.

При анализе измеренных дифракционных профилей и карт обратного пространства пренебрегалось вкладом теплового ДР как малой величиной в рассматриваемой области обратного пространства [82].

Влияние инструментальной функции учитывалось только при обработке КДО. Приближенный учёт инструментальных факторов при обработке карт обратного пространства и их сечений объясняет расхождение между теорией и экспериментом вдоль когерентного пика от образца, а также экстинкционные провалы на расчётных картах вдоль направлений в обратном пространстве, для которых выполняется условие Брэгга для волновых векторов падающей и дифрагированной диффузно рассеянных волн (см. рис. 14 и 15). С другой стороны, благодаря этому упрощению было достигнуто существенное уменьшение времени расчёта.

Для определения качества подгонки КДО используются обычный (R) и взвешенный (R_w) факторы надёжности:

$$R = \sum_j \left| R_j^{\text{calc}} - R_j^{\text{meas}} \right| / \sum_j R_j^{\text{meas}}, \quad j = \overline{1, N}; \quad R_w = (N + p)^{-1} \sum_j \left| R_j^{\text{calc}} - R_j^{\text{meas}} \right| / R_j^{\text{meas}}.$$

Здесь R_j^{meas} и R_j^{calc} — соответственно экспериментальные и теоретические значения КДО при угловом отклонении образца $\Delta\theta_j$, N и p — количество экспериментальных точек и число определяемых параметров. Факторы R и R_w используются для оценки качества подгонки соответственно в области полного отражения и во всем измеряемом угловом диапазоне.

Для проведения детальной количественной диагностики исследуемых кристаллов Cz-Si необходимо выбрать подходящую модель дефектной структуры. Как правило, можно предположить одновременное присутствие двух типов случайно распределённых микродефектов (без корреляции в их расположении), а именно, преципитатов кислорода и междоузельных дислокационных петель [83].

Одной из основных проблем рентгеновской дифракционной диагностики подобных сложных дефектных структур, которые ожида-

ются в исследуемых образцах, является сложность в идентификации двух типов дефектов со схожими (кулоновского типа) асимптотическими полями статических смещений и, как следствие, схожими дифракционными картинками. Ещё в большей степени эта проблема проявляется, когда распределение интенсивности ДР проинтегрировано по сфере Эвальда и, таким образом, индивидуальные особенности распределений от кластеров и дислокационных петель сглаживаются. Именно такой случай имеет место, когда КДО измеряются на ТОД без кристалла анализатора. В частности, в нашем рассмотрении имеется возможность промоделировать экспериментальные КДО практически с одинаково хорошим качеством, используя только преципитаты кислорода двух существенно различных радиусов или только дислокационных петель также двух радиусов. По этой причине важна роль измеряемых карт обратного пространства, заключающаяся в однозначном установлении доминирующего типа микродефектов, дающих основной вклад в измеряемые дифференциальные распределения интенсивности ДР, и определении приближительных характеристик дефектов. Действительно, как можно видеть из рис. 14, для образца Cz-Si форма линий равной интенсивности на картах характерна для круговых дислокационных петель с ориентацией вектора Бюргерса $\langle 111 \rangle$ (сравн. с [81]). Их радиусы R_L оценены с использованием измеренных карт обратного пространства и их сечений (рис. 14 и 15) и равны приблизительно 0,1 мкм.

Следует подчеркнуть, что фитирование экспериментальных карт обратного пространства и их сечений выполнялось при взаимном согласовании с результатами подгонки КДО, т.е. проводилась комбинированная обработка карт и КДО. КДО, благодаря интегрированию интенсивности ДР по сфере Эвальда, имеют большую чувствительность к дефектам малых размеров по сравнению с картами, на которых их вклад практически незаметен. В частности, в нашем рассмотрении малые дислокационные петли с радиусами в несколько нанометров дают существенный вклад на далёких хвостах КДО, в то время как на дифракционных профилях ТОД их вклад пренебрежимо мал (сравн. рис. 15 и 16). Поэтому следует ещё раз подчеркнуть особенно важную роль совместной обработки карт и КДО для достоверного количественного определения характеристик микродефектов с широким разбросом их размеров.

Полученные в этом разделе результаты демонстрируют возможность количественной диагностики многопараметрической дефектной структуры в монокристаллах кремния при комбинированной обработке экспериментальных данных по высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии с использованием аналитических формул статистической динамической теории дифракции рентгеновских лучей в несовершенных кристаллах. При этом различные экспериментальные методы дифрактометрии могут рассматриваться как част-

ный случай разных условий динамической дифракции, обеспечивающий многообразность картины рассеяния, и, соответственно, необходимый набор независимых экспериментальных данных.

5.3. Основы и практическая реализация многопараметрической диффузодинамической комбинированной дифрактометрии многослойных систем с дефектами

5.3.1. Теоретические модели диффузодинамической дифрактометрии в различных условиях дифракции для многослойных систем с дефектами

Ниже приведены полученные авторами в [84, 85] аналитические выражения, описывающие динамическое рассеяние в многослойных системах при различных условиях дифракции. Для когерентной составляющей рассеяния в геометрии дифракции по Лауэ в случае прямого рассеяния для многослойной системы, состоящей из M слоёв на подложке, выражения для коэффициентов отражения и прохождения имеют вид:

$$\begin{pmatrix} R_0 \\ T_0 \end{pmatrix} = \mathbf{P}_0 \mathbf{P}_1 \dots \mathbf{P}_{M-1} \begin{pmatrix} R_M \\ T_M \end{pmatrix}, \quad (45)$$

$$\begin{pmatrix} R_j \\ T_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{c_j^1 \exp(K\Delta_j^1 d_j) - c_j^2 \exp(K\Delta_j^2 d_j)}{c_j^2 - c_j^1} & r_j \\ -\frac{r_j}{c_j^1 c_j^2} & t_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_{j+1} \\ T_{j+1} \end{pmatrix} = \mathbf{P}_j \begin{pmatrix} R_{j+1} \\ T_{j+1} \end{pmatrix}, \quad (46)$$

где R_M и T_M — соответствующие коэффициенты для одного верхнего слоя в вакууме, R_0 и T_0 — для всей системы из M слоёв и подложки, R_j и T_j — для j -ого слоя системы, r_j и t_j — соответственно коэффициенты отражения и прохождения для изолированного кристаллического j -ого слоя в вакууме, определяющиеся по формулам:

$$r_j = c_j^1 c_j^2 \frac{\exp(-iK\Delta_j^1 d_j) - \exp(-iK\Delta_j^2 d_j)}{c_j^2 - c_j^1}, \quad (47)$$

$$t_j = \frac{c_j^2 \exp(-iK\Delta_j^1 d_j) - c_j^1 \exp(-iK\Delta_j^2 d_j)}{c_j^2 - c_j^1}. \quad (48)$$

Здесь d_j — толщина j -ого слоя, а величины c_j^δ и Δ_j^δ задаются соответственно следующими выражениями:

$$c_j^\delta = -\frac{2\gamma_{0j}\Delta_j^\delta + \chi_{0j} + \Delta\chi_{00j}}{C_j E_j \chi_{-H_j} + \Delta\chi_{0H_j}}, \quad (49)$$

$$\Delta_j^\delta = \frac{1}{2\gamma_{0j}}(\chi_{0j} + \Delta\chi_{00j}) + \frac{\lambda}{2\Lambda_j} \left(y_j + (-1)^\delta \sqrt{y_j^2 + 1} \right), \quad (50)$$

$$y_j = (\alpha_j - \alpha_{0j}) \sqrt{b_j} / \sigma_j,$$

$$\sigma_j^2 = (C_j E_j \chi_{-H_j} + \Delta\chi_{0H_j})(C_j E_j \chi_{H_j} + \Delta\chi_{H0j}), \quad \alpha_j = -\Delta\theta_j \sin(2\theta_{Bj}),$$

$$2\alpha_{0j} = \chi_{0j} + \Delta\chi_{Hj} + \frac{1}{b_j}(\chi_{0j} + \Delta\chi_{00j}), \quad (51)$$

Для диффузной компоненты дифференциального коэффициента отражения для j -го слоя многослойной системы:

$$\begin{aligned} R_j^D(\mathbf{k}) = & \frac{c_j(1-c_j)v_{c_j}t_j}{\gamma_0|y'^2+1|} \left(\frac{C_j E_j K^2}{4\pi} \right)^2 \frac{e^{-2\gamma_j^t}}{(c_j^1 - c_j^2)^2} \times \\ & \times \sum_{\delta\tau\lambda\sigma} (-1)^{\delta+\tau+\lambda+\sigma} \left(\frac{c_j^1 c_j^2}{c^\delta} T_{j+1} - R_{j+1} \right) \left(\frac{c_j^1 c_j^2}{c^\lambda} T_{j+1} - R_{j+1} \right)^* \times \\ & \times \frac{c_j^\delta (c_j^\lambda)^* e^{-iK(\Delta_j^\delta - \Delta_j^{\lambda*})z_j} X_j^{\delta\tau} (X_j^{\lambda\sigma})^*}{(C_j E_j \chi_{-H_j} + \Delta\chi_{0H_j}^\delta)(C_j E_j \chi_{-H_j} + \Delta\chi_{0H_j}^\lambda)^*} \Pi_j^{\delta\tau\lambda\sigma} (\mathbf{H}_j \cdot \mathbf{u}_{q\delta\tau}^j)(\mathbf{H}_j \cdot \mathbf{u}_{q\lambda\sigma}^j)^*, \quad (52) \end{aligned}$$

где $\Delta_j^{\tau} = \frac{1}{2\gamma_{0j}}(\chi_{0j} + \Delta\chi_{00j}^\delta) + \frac{\lambda}{2\Lambda_j'} \left(y_j' + (-1)^\tau \sqrt{y_j'^2 + 1} \right)$, $y_j' = \frac{\tilde{\alpha}'_j - \alpha'_{0j}}{\sigma_j'} \sqrt{b_j}$,

$$\Lambda_j' = \frac{\lambda\gamma_H \sqrt{b_j}}{\sigma_j'}, \quad 2\alpha'_{0j} = \chi_{0j} + \Delta\chi_{Hj}^\delta - b_j^{-1}(\chi_{0j} + \Delta\chi_{00j}^\delta), \quad \tilde{\alpha}'_j = -\Delta\theta_j' \sin(2\theta_{Bj}),$$

$$\sigma_j' = (C_j E_j \chi_{-H_j} + \Delta\chi_{0H_j}^\delta)(C_j E_j \chi_{H_j} + \Delta\chi_{H0j}^\delta), \quad \gamma_j^L = \sum_{i=0}^{j-1} \frac{\mu_i d_i}{\gamma_{G_j}}, \quad \mu_i = \mu_{oi} + \mu_{ds}^i,$$

$$X_j^{\delta\tau} = \frac{\chi_{H_j} c_j^{\tau(\tau)}}{c_j^\delta \zeta_j'} - \chi_{-H_j}, \quad \zeta_j' = \frac{CE\chi_{H_j} + \Delta\chi_{Hj0}^\delta}{CE\chi_{-H_j} + \Delta\chi_{0H_j}^\delta}, \quad v_{c_j} \text{ — объем элементарной}$$

ячейки в j -ом кристаллическом слое, а множитель, учитывающий аномальное поглощение, имеет вид:

$$\Pi_j^{\delta\tau\lambda\sigma} = \frac{\exp\left[iKt_j(\Delta_{\delta j} - \Delta_{\lambda j}^*)\right] - \exp\left[iKt_j(\Delta'_{\tau j} - \Delta'_{\sigma j}^*)\right]}{iKt_j(\Delta'_{\tau j} - \Delta_{\delta j} - \Delta'_{\sigma j}^* + \Delta_{\lambda j}^*)}, \quad (53)$$

Для всей системы:

$$R_D(\mathbf{k}) = \sum_{j=0}^M R_j^D(\mathbf{k}), \quad (54)$$

где $R_j^D(\mathbf{k})$ — диффузная компонента дифференциального коэффициента отражения для j -го слоя.

Для геометрии дифракции по Брэггу в случае прямого рассеяния рекуррентные соотношения между амплитудными коэффициентами отражения соседних слоёв имеют вид:

$$R_j = \frac{r_j + R_{j-1}(t_j^2 e_j - r_j^2)}{1 - r_j R_{j-1}}, \quad (55)$$

$$\text{где } R_j = (\zeta_j b_j)^{-1/2} \frac{D_{Hj}}{D_{0j}}, \quad r_j = (\zeta_j b_j)^{-1/2} \frac{D_{Hj}}{D_{0j}} = (\zeta_j b_j)^{1/2} \frac{e^{iK\Delta_j^1 d_j} - e^{iK\Delta_j^2 d_j}}{c_j^2 e^{iK\Delta_j^1 d_j} - c_j^1 e^{iK\Delta_j^2 d_j}},$$

$$t_j = \frac{D_{0j-1}}{D_{0j}} = \frac{c_j^2 - c_j^1}{c_j^2 e^{iK\Delta_j^1 d_j} - c_j^1 e^{iK\Delta_j^2 d_j}}, \quad \Delta_j^\delta = \frac{\chi_{0j} + \Delta\chi_{00j}}{2\gamma_{0j}} + \frac{\lambda(y_j + (-1)^\delta \sqrt{y_j^2 - 1})}{2\Lambda_j},$$

D_{0j} и D_{Hj} — амплитуды проходящих и дифрагированных волн в j -ом слое.

Диффузная компонента дифференциального коэффициента отражения для j -го слоя в этом случае имеет вид:

$$R_j^D(\mathbf{k}) = \frac{c_j(1 - c_j)v_c t_j}{\gamma_0} \left(\frac{C_j E_j K^2}{4\pi} \right)^2 e^{-2\gamma_j^B} \sum_{\delta\tau\lambda\sigma} (-1)^{\tau+\sigma} \tilde{L}_j^\delta (\tilde{L}_j^\lambda)^* \times \\ \times \frac{e^{iK(\Delta_j^\delta - \Delta_j^{\lambda*})z_{j-1}} e^{iK(\Delta_j^{\tau*} - \Delta_j^{\sigma'})d_j}}{(B'_{1\delta} - B'_{2\delta})(B'_{1\sigma'} - B'_{2\sigma'})^*} \Pi_j^{\delta\tau\lambda\sigma} (\mathbf{H}_j \cdot \mathbf{u}_{q_{\delta\tau}}^j) (\mathbf{H}_j \cdot \mathbf{u}_{q_{\lambda\sigma}}^j)^* X_j^{\delta\tau} (X_j^{\lambda\sigma})^*; \quad (56)$$

$$\tilde{L}_j^{\delta} = c_j^\delta \frac{c_j^1 c_j^2 T_j^{-1} - c_j^\delta R_{j-1} e^{iK \frac{\Delta_j^1 \Delta_j^2}{\Delta_j^\delta} d_j}}{c_j^1 c_j^2 e^{iK \Delta_j^\delta d_j} - (c_j^\delta)^2 e^{iK \frac{\Delta_j^1 \Delta_j^2}{\Delta_j^\delta} d_j}}, \quad X_j^{\delta\tau} = \frac{c_j^{\delta\tau}}{c_j^\delta} \chi_{H_j} - \zeta_j' \chi_{-H_j}, \quad \gamma_j^B = \sum_{i=j+1}^M \frac{\mu_i d_i}{|\gamma_{G_i}|},$$

$$\Delta_j^{\tau} = \frac{1}{2\gamma_{0j}} (\chi_{0j} + \Delta\chi_{00j}^\delta) + \frac{\lambda}{2\Lambda_j'} (y_j + (-1)^\tau \sqrt{y_j'^2 - 1}),$$

а множитель, учитывающий аномальное поглощение, имеет вид:

$$\Pi_j^{\delta\tau\lambda\sigma} = \frac{\exp\left[iKd_j\left(\Delta'_{\tau\delta j} - \Delta_{\delta j} - \Delta'_{\lambda\sigma j} + \Delta_{\lambda j}^*\right)\right] - 1}{iKd_j\left(\Delta'_{\tau\delta j} - \Delta_{\delta j} - \Delta'_{\lambda\sigma j} + \Delta_{\lambda j}^*\right)}. \quad (57)$$

В соответствии с [85] приведём аналогичные выражения для случая обратного рассеяния, когда луч падает не на верхний слой многослойной структуры, а на подложку, т.е. когда гетеросистема вместе с подложкой перевёрнута; выражение для брэгговской составляющей интенсивности рассеяния в геометрии дифракции по Лауэ имеет вид:

$$\begin{pmatrix} R_j \\ T_j \end{pmatrix} = \mathbf{P}_j \mathbf{P}_{j-1} \dots \mathbf{P}_2 \mathbf{P}_1 \begin{pmatrix} R_0 \\ T_0 \end{pmatrix} \text{ или } \begin{pmatrix} R_M \\ T_M \end{pmatrix} = \mathbf{P}_M \dots \mathbf{P}_2 \mathbf{P}_1 \begin{pmatrix} R_0 \\ T_0 \end{pmatrix}, \quad (58)$$

где R_0 и T_0 — соответствующие коэффициенты для подложки в вакууме, R_M и T_M — для всей системы из M шаров и подложки, R_j и T_j — для системы из j шаров и подложки, а матрица рассеяния \mathbf{P}_j имеет вид:

$$\mathbf{P}_j = \begin{pmatrix} -\frac{c_j^1 \exp(K\Delta_j^1 d_j) - c_j^2 \exp(K\Delta_j^2 d_j)}{c_j^2 - c_j^1} & r_j \\ -\frac{r_j}{c_j^1 c_j^2} & t_j \end{pmatrix} \quad (j = 1, 2, \dots, M). \quad (59)$$

Выражение для диффузной компоненты дифференциального коэффициента отражения для j -го слоя многослойной системы в случае обратного рассеяния приобретает вид:

$$\begin{aligned} R_j^D(\mathbf{k}) &= \frac{c_j(1-c_j)v_{c_j}d_j}{\gamma_0|y'^2+1|} \left(\frac{C_j E_j K^2}{4\pi}\right)^2 \frac{e^{-2\gamma_j^L}}{(c_j^1 - c_j^2)^2} \times \\ &\times \sum_{\delta\tau\lambda\sigma} (-1)^{\delta+\tau+\lambda+\sigma} \left(\frac{c_j^1 c_j^2}{c^\delta} T_{j-1} - R_{j-1}\right) \left(\frac{c_j^1 c_j^2}{c^\lambda} T_{j-1} - R_{j-1}\right)^* \times \\ &\times \frac{c_j^\delta (c_j^\lambda)^* e^{-iK(\Delta_j^\delta - \Delta_j^{\lambda*})z_j} X_j^{\delta\tau} (X_j^{\lambda\sigma})^*}{(C_j E_j \chi_{-H_j} + \Delta\chi_{0H_j}^\delta)(C_j E_j \chi_{-H_j} + \Delta\chi_{0H_j}^\lambda)^*} \Pi_j^{\delta\tau\lambda\sigma} (\mathbf{H}_j \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{d}_{\delta\tau}}^j) (\mathbf{H}_j \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{d}_{\lambda\sigma}}^j)^*, \quad (60) \end{aligned}$$

где выражение для γ_j^L приобретает вид:

$$\gamma_j^L = \sum_{i=j+1}^M \mu_i d_i / \gamma_{G_j}. \quad (61)$$

Для случая рассеяния в геометрии дифракции по Брэггу при обратном рассеянии рекуррентные соотношения между амплитудными коэффициентами отражения соседних слоёв представляются в виде:

$$R_j = \frac{r_j + R_{j+1} (t_j^2 e_j - r_j^2)}{1 - r_j R_{j+1}}. \quad (62)$$

Диффузная составляющая картины рассеяния определяется выражением, аналогичным (56) с заменой \tilde{L}_j^δ и γ_j^B на соответствующие выражения для случая обратного рассеяния при брэгг-дифракции:

$$\tilde{L}_j^\delta = c_j^\delta \frac{c_j^1 c_j^2 T_j^{-1} - c_j^\delta R_{j+1} \exp[iK d_j \Delta_j^1 \Delta_j^2 / \Delta_j^\delta]}{c_j^1 c_j^2 \exp[iK \Delta_j^\delta d_j] - (c_j^\delta)^2 \exp[iK d_j \Delta_j^1 \Delta_j^2 / \Delta_j^\delta]}, \quad (63)$$

$$\gamma_j^B = \sum_{i=0}^{j-1} \mu_i d_i / |\gamma_{G_j}|. \quad (64)$$

5.3.2. Обнаружение и обоснование уникально структурночувствительного эффекта влияния условий дифракции на вклад диффузной составляющей кривых отражения при динамическом рассеянии

Построенная в разделе 5.3.1 модель позволила осуществить анализ возможностей комбинированной дифрактометрии многослойной системы, схема которой представлена на рис. 17, на основе, приведённых на рис. 18 четырёх кривых дифракционного отражения, полученных в четырёх различных случаях условий динамической дифракции: геометрии дифракции по Брэггу, по Лауэ, как для прямого, так и для обратного рассеяния.

GaAs	10 нм
Al _{0,3} Ga _{0,7} As	120 нм
GaAs	150 нм
GaAsN	24 нм
КЯ In _x Ga _{1-x} AsN	7,4 нм
GaAsN	24 нм
GaAs	175 нм
Al _{0,3} Ga _{0,7} As	320 нм
GaAs	150 нм
Подложка GaAs	350 мкм

Рис. 17. Схема многослойной структуры с квантовой ямой (КЯ) InGaAsN.

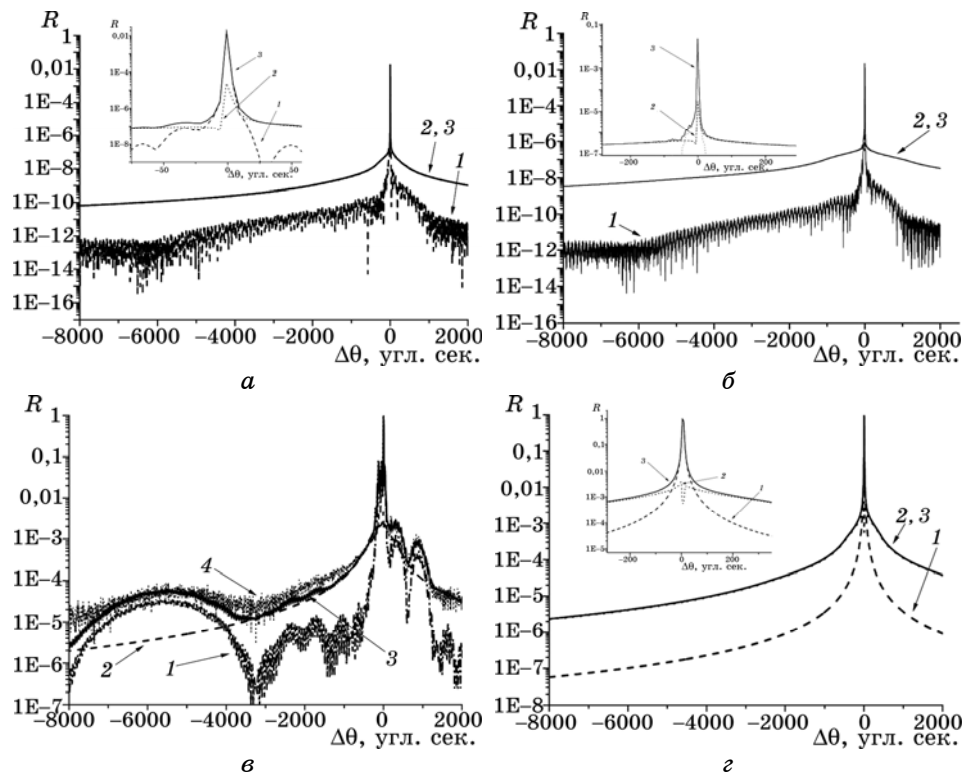


Рис. 18. Расчётные кривые дифракционного отражения для многослойной структуры с квантовой ямой InGaAsN (рефлекс 004) для геометрии дифракции по Лауэ в случае прямого рассеяния (а) и в случае обратного рассеяния (б) (излучение MoK α), а также для геометрии дифракции по Брэггу в случае прямого рассеяния (в) и в случае обратного рассеяния (г) (излучение CuK α). Нумерация 1, 2, 3 и 4 обозначает расчётные когерентную составляющую, диффузную составляющую, суммарную интенсивность рассеяния и экспериментальные данные соответственно.

Эти кривые демонстрируют существенную зависимость их вида от условий дифракции. При этом впервые установлены принципиальные отличия этих зависимостей для кривых отражения в целом и для их брэгговской и диффузной составляющих (всех трёх кривых) между собой, что также демонстрируют формулы (45)–(64), в отличие от случая кинематического рассеяния, где это принципиально невозможно. Как будет показано ниже, этот эффект влияния условий дифракции на вклад диффузной составляющей кривых отражения при динамическом рассеянии имеет уникальную чувствительность к типу и характеристикам дефектов и играет фундаментальную роль в радикальном повышении чувствительности кривых

отражения при переходе от кинематического к динамическому рассеянию, что и обосновывают построенные модели.

В частности, формулы (45)–(64) позволили установить, что этот эффект обусловлен принципиальной разницей в проявлениях многократности рассеяния для брэгговской и диффузной составляющих и позволяет путём целенаправленного изменения условий дифракции anomalously (в десятки или сотни раз) повысить вклад диффузной составляющей в кривую отражения, а, следовательно, ра-

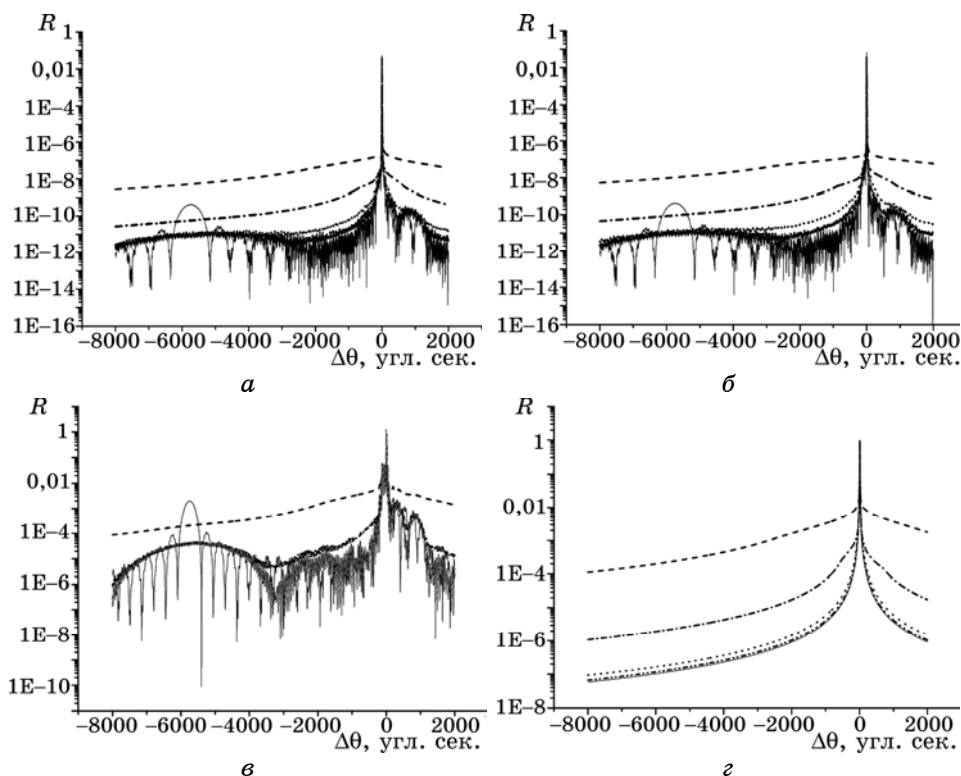


Рис. 19. Рассчитанные кривые дифракционного отражения для многослойной структуры с квантовой ямой (рефлекс 004) для геометрии дифракции по Лауэ в случае прямого рассеяния (*а*) и в случае обратного рассеяния (*б*), а также для геометрии дифракции по Брэггу в случае прямого рассеяния (*в*) и в случае обратного рассеяния (*г*) (излучение CuK_α). Сплошная линия соответствует случаю идеального кристалла, штриховая — присутствию малых кластеров ($r_1 = 2$ нм, $n_1 = 6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-1}$, $L_H = 0,02$), штрихпунктирная — присутствию малых дислокационных петель ($r_2 = 2$ нм, $n_2 = 7 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-1}$, $L_H = 0,02$), пунктирная — крупных кластеров ($r_3 = 200$ нм, $n_3 = 2 \cdot 10^9 \text{ см}^{-1}$, $L_H = 0,02$) и штрихпунктир-пунктир — присутствию крупных дислокационных петель ($r_4 = 200$ нм, $n_4 = 7 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-1}$, $L_H = 0,02$); тонкая сплошная линия соответствует случаю идеального кристалла с толщиной квантовой ямы, увеличенной в 8 раз.

дикально усилить чувствительность кривой отражения к характеристикам дефектов.

5.3.3. Теоретическое предсказание эффекта появления при многократном рассеянии уникальной чувствительности к характеристикам дефектов изменений кривых отражения в зависимости от условий динамической дифракции в многослойных системах с дефектами

Анализ кривых отражения, построенных для различных случаев дифракции (геометрии дифракции, как по Брэггу, так и по Лауэ, как для прямого, так и для обратного рассеяния в предельных случаях динамически «толстых» и «тонких» многослойных систем с дефектами в случаях больших и малых отношений длин абсорбции и экстинкции, т.е. больших и малых вкладов диффузной составляющей, и др.) на основе созданной модели и приведённых на рис. 19, 20, 21, позволил установить следующие новые эффекты в случае ди-

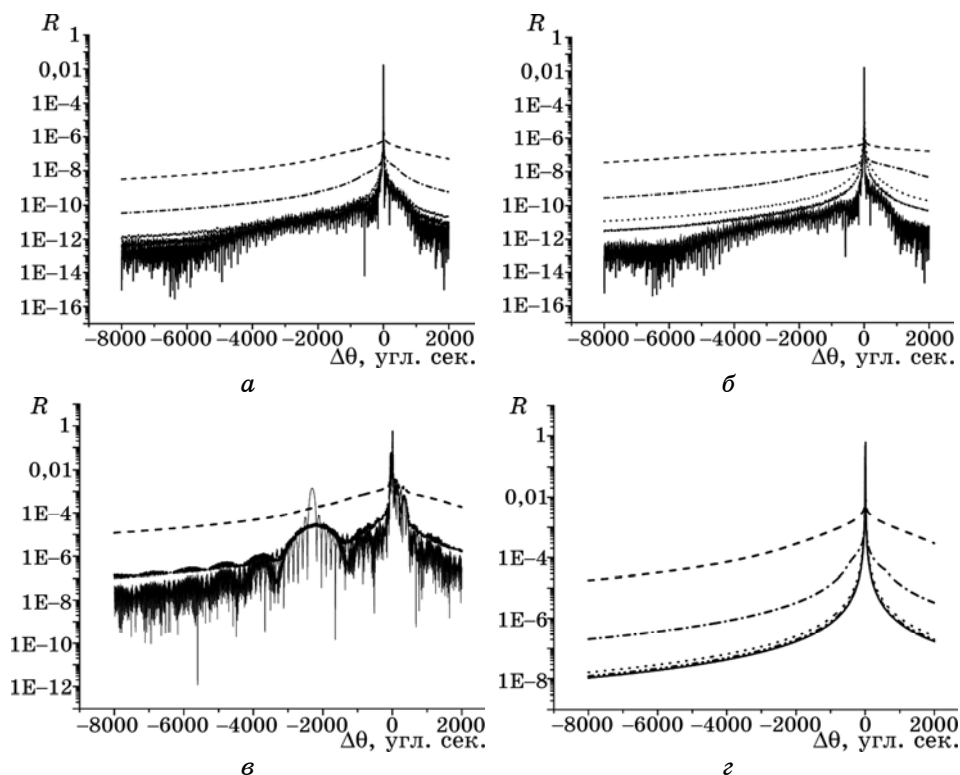


Рис. 20. То же, что на рис. 19, но для излучения MoK_{α} .

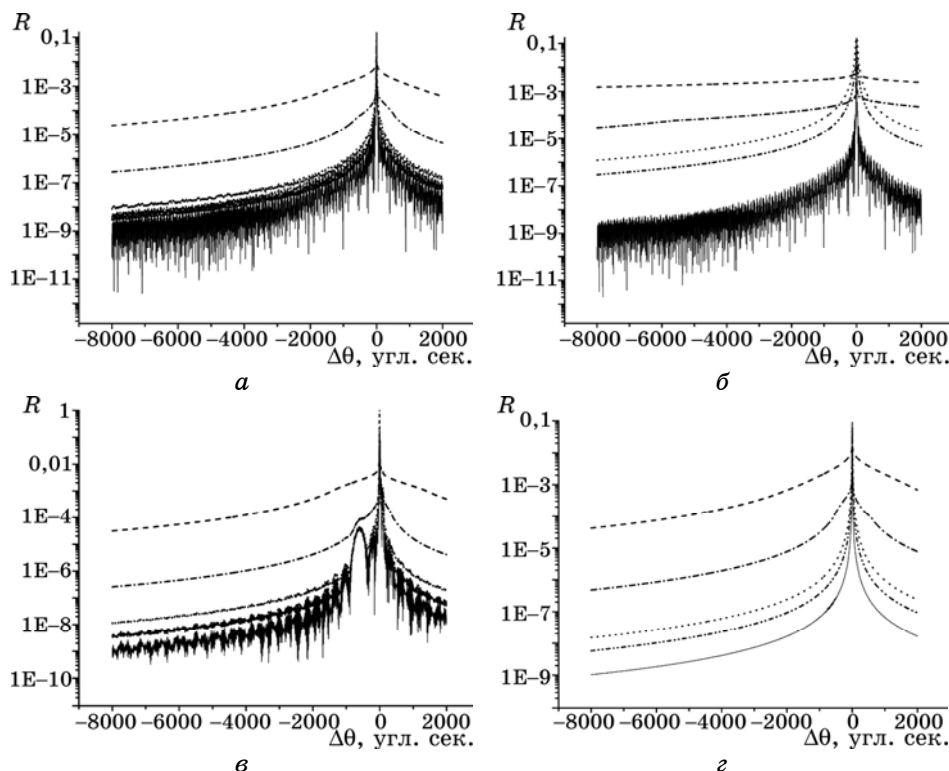


Рис. 21. То же, что на рис. 19, но для излучения WK_α .

намической дифракции в многослойных системах с дефектами.

Показано, что вследствие установленного в разд. 5.3.2 эффекта, кривые отражения, а также характер влияния дефектов на вид кривых (их отличие от кривых отражения в случае отсутствия дефектов) зависят как от типа и характеристик дефектов, так и, в отличие от кинематического рассеяния, от условий дифракции. При этом указанные зависимости оказались существенно взаимосвязанными, т.е. изменения вида кривых отражения и характера влияния на них дефектов с изменением условий дифракции зависит от типа и характеристик дефектов, а изменения кривых отражения и характера влияния на них дефектов с изменением типа и характеристик дефектов зависит от условий дифракции. Установлено, что именно обнаруженная взаимосвязь зависимостей от характеристик дефектов и от условий дифракции кривых отражения и характера влияния на них дефектов обеспечивает радикальное повышение при переходе от кинематической к динамической дифракции чувствительности и информативности диагностики. Все это также подтверждается анализом формул (45)–(64).

В результате предлагается новый подход в дифрактометрии, а именно диагностика не по характеру влияния на кривые отражения типа и характеристик дефектов, а по чувствительности к типу и характеристикам дефектов изменений этого влияния в зависимости от условий дифракции. Этим обеспечивается расширение функциональных возможностей диагностики на основе использования установленного эффекта чувствительности к типу и характеристикам дефектов зависимостей характера влияния дефектов на кривые отражения от условий дифракции.

Таким образом, рис. 19, 20 и 21 наглядно демонстрируют обусловленную указанной взаимосвязью, что следует также из формул (45)–(64), новое явление, которое наблюдается как зависимая от типа и характеристик дефектов многообразность кривых отражения при различных условиях динамической дифракции. Такая зависящая от характеристик дефектов и их типа многообразность обеспечивается изменением при переходе от одних условий дифракции к другим определяющих вид кривых отражения и их брэгговской и диффузной составляющих (рис. 18) механизмов многократности рассеяния, каждый из которых обуславливает указанную взаимосвязь влияния дефектов и условий дифракции, а конкуренция которых и обеспечила результирующую взаимосвязь зависимостей кривых отражения от условий дифракции и от характеристик дефектов. При этом следует отметить, что, как демонстрируют рисунки, изменение условий дифракции позволяет радикально (на порядки величины) усиливать влияние дефектов определённых типов на кривые отражения (на их отличия от кривых для случая отсутствия дефектов). При этом такое влияние дефектов других типов может в ряде случаев при определённых значениях их характеристик практически полностью нивелироваться. Такой результат оказывается возможным благодаря тому, что конкурирующие механизмы многократности рассеяния в кристаллах с дефектами отличаются не только величиной, но даже и знаком влияния характеристик дефектов на кривые отражения. При этом коэффициент отражения может изменяться на несколько порядков величины. Так, эффект экстинкции за счёт диффузного рассеяния всегда приводит к резкому снижению кривых отражения с ростом искажений, а установленный в предыдущем разделе эффект аномального увеличения вклада диффузной составляющей с изменениями условий дифракции к значительному повышению кривых с ростом искажений, интерференционный коэффициент поглощения брэгговской и диффузной составляющих увеличивается с ростом искажений, резко понижая кривую отражения. А как показано в настоящей работе, все эти эффекты и результат их конкурирующего влияния на кривые отражения существенно зависят как от типа дефектов и их характеристик, так и от условий дифракции. Это и обуславливает воз-

возможность и целесообразность комбинированного подхода, в котором обеспечивается уникально чувствительная и информативная диагностика с управляемыми функциональными возможностями, в частности, радикально повышать чувствительность то к одним, то к другим типам дефектов. В результате появляется возможность однозначно решать обратную задачу рассеяния при диагностике многопараметрических систем путём комбинированной обработки результатов целенаправленно выбранного набора необходимых измерений кривых отражения в различных условиях дифракции, который в целом обеспечивает достаточную чувствительность ко всем измеряемым (искомым) характеристикам структуры.

5.3.4. Установление эффекта влияния условий дифракции на избирательность чувствительности кривых отражения к какому-либо из присутствующих типов дефектов и возможности радикального дополнительного повышения информативности и однозначности диагностики многослойных систем на этой основе

С целью количественного обоснования предсказанной выше возможности управлять путём целенаправленного изменения условий дифракции избирательностью чувствительности кривых отражения к дефектам на основе разработанных моделей для случая одновременного присутствия в системе двух типов дефектов проведён численный сравнительный анализ чувствительности кривых отражения к различным структурным характеристикам многослойной системы, приведённой на рис. 17, и избирательности чувствительности к дефектам разного типа в различных условиях дифракции. Результаты представлены в табл. 3–8. Здесь A — структурные характеристики, ΔA — точность их определения, R и R_w — фактор и взвешенный фактор добротности соответственно.

Анализ результатов, приведённых в табл. 3–8, показывает улучшение чувствительности во всех геометриях в целом ко всем характеристикам структурных параметров с ростом степени искажений в системе (при увеличении L_H на порядок величины от 3–4 тысячных до 1–2 сотых). Геометрия дифракции по Лауэ демонстрирует равный или в целом ряде случаев существенно более высокий уровень чувствительности и информативности диагностики в сравнении со случаем геометрии дифракции по Брэггу. При этом в случаях, когда размеры дефектов двух разных типов (крупные и мелкие кластеры) различаются на два порядка величины, геометрия дифракции по Брэггу теряет чувствительность к крупным дефектам и сохраняет достаточную чувствительность только к мелким дефектам при предельно малых значениях L_H (несколько тысячных) как при прямом, так и при обратном рассеянии. При увеличении L_H на порядок величины (1–2 сотых) отмеченная ситуация потери чувстви-

ТАБЛИЦА 3. Случай подложки из почти идеального кристалла (на пределе чувствительности методик), крупные и мелкие кластеры, преобладающий вклад в L_H крупных дефектов, прямое рассеяние. $L_H = 0,0027$, $R_1 = 0,2$ мкм, $n_1 = 3 \cdot 10^8 \text{ см}^{-3}$ ($L_H^1 = 0,002$), $R_2 = 2$ нм, $n_2 = 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ($L_H^2 = 0,0007$).

Геометрия дифракции по Брэггу, прямое рассеяние				Геометрия дифракции по Лауэ, прямое рассеяние			
A	ΔA , %	R, %	R_w , %	A	ΔA , %	R, %	R_w , %
$R_1 = 200$ нм	100	14	22	$R_1 = 200$ нм	4	14	0
$n_1 = 3 \cdot 10^8 \text{ см}^{-3}$	800	14	21	$n_1 = 3 \cdot 10^8 \text{ см}^{-3}$	16	14	0
$R_2 = 2$ нм	7	14	8	$R_2 = 2$ нм	6	1	22
$n_2 = 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$	23	14	6	$n_2 = 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$	23	0,4	22

ТАБЛИЦА 4. Случай подложки из почти идеального кристалла (на пределе чувствительности методик), крупные и мелкие дефекты, преобладающий вклад в L_H крупных дефектов, обратное рассеяние. $L_H = 0,0027$, $R_1 = 0,2$ мкм, $n_1 = 3 \cdot 10^8 \text{ см}^{-3}$ ($L_H^1 = 0,002$), $R_2 = 2$ нм, $n_2 = 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ($L_H^2 = 0,0007$).

Геометрия дифракции по Брэггу, обратное рассеяние				Геометрия дифракции по Лауэ, обратное рассеяние			
A	ΔA , %	R, %	R_w , %	A	ΔA , %	R, %	R_w , %
$R_1 = 200$ нм	140	14	7	$R_1 = 200$ нм	4	14	0.2
$n_1 = 3 \cdot 10^8 \text{ см}^{-3}$	1200	13	3	$n_1 = 3 \cdot 10^8 \text{ см}^{-3}$	17	14	0.3
$R_2 = 2$ нм	6	3	22	$R_2 = 2$ нм	5	0.7	22
$n_2 = 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$	23	2	22	$n_2 = 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$	23	0.5	22

тельности к крупным дефектам сохраняется для обратного рассеяния в геометрии Брэгга, а для прямого рассеяния в этом случае в геометрии Брэгга появляется удовлетворительная чувствительность и к крупным дефектам, однако диагностика остаётся избирательно (т.е. наиболее) чувствительной к более мелким дефектам. При переходе к геометрии дифракции по Лауэ появляется одинаково высокая чувствительность, как к мелким, так и на два порядка более крупным дефектам при их соизмеримых вкладах в L_H (0,003–0,004) в случае предельно малых значений L_H как для прямого, так и для обратного рассеяния.

В случае увеличения L_H на порядок (0,015–0,02) для прямого и обратного рассеяния по Лауэ начинает существенно преобладать избирательность чувствительности к более крупным дефектам.

Анализ в случае, когда размеры дефектов двух типов одного порядка величины, показывает, что для почти совершенного кристалла ($L_H \cong 0,002-0,003$), т.е. на пределе чувствительности, все че-

ТАБЛИЦА 5. Случай подложки из почти на порядок величины по L_H более, чем в таблицах 3 и 4, искажённого кристалла: крупный и мелкий дефекты; равные вклады в L_H крупных и мелких дефектов; прямое рассеяние. $L_H = 0,02$ ($m_{ds}/m_0 = 0,04$), $R_1 = 0,2$ мкм, $n_1 = 1 \cdot 10^9$ см $^{-3}$ ($L_H^1 = 0,01$), $R_2 = 3$ нм, $n_2 = 4 \cdot 10^{17}$ см $^{-3}$ ($L_H^2 = 0,01$).

Геометрия дифракции по Брэггу, прямое рассеяние				Геометрия дифракции по Лауэ, прямое рассеяние			
A	ΔA , %	R, %	R_w , %	A	ΔA , %	R, %	R_w , %
$R_1 = 200$ нм	14	14	0,2	$R_1 = 200$ нм	1,5	14	0
$n_1 = 1 \cdot 10^9$ см $^{-3}$	80	13	0	$n_1 = 1 \cdot 10^9$ см $^{-3}$	9	19	0
$R_2 = 3$ нм	8	11	22	$R_2 = 3$ нм	6	9	21
$n_2 = 4 \cdot 10^{17}$ см $^{-3}$	25	7	20	$n_2 = 4 \cdot 10^{17}$ см $^{-3}$	23	6	22

ТАБЛИЦА 6. Случай подложки из почти на порядок величины по L_H более, чем в таблицах 3 и 4, искажённого кристалла: крупные и мелкие дефекты; равные вклады в L_H крупных и мелких дефектов; обратное рассеяние. $L_H = 0,02$ ($m_{ds}/m_0 = 0,04$), $R_1 = 0,2$ мкм, $n_1 = 1 \cdot 10^9$ см $^{-3}$ ($L_H^1 = 0,01$), $R_2 = 3$ нм, $n_2 = 4 \cdot 10^{17}$ см $^{-3}$ ($L_H^2 = 0,01$).

Геометрия дифракции по Брэггу, обратное рассеяние				Геометрия дифракции по Лауэ, обратное рассеяние			
A	ΔA , %	R, %	R_w , %	A	ΔA , %	R, %	R_w , %
$R_1 = 200$ нм	80	14	4	$R_1 = 200$ нм	1,5	12	0
$n_1 = 1 \cdot 10^9$ см $^{-3}$	600	14	2	$n_1 = 1 \cdot 10^9$ см $^{-3}$	8	14	0
$R_2 = 3$ нм	6	14	21	$R_2 = 3$ нм	5	8	20
$n_2 = 4 \cdot 10^{17}$ см $^{-3}$	23	10	22	$n_2 = 4 \cdot 10^{17}$ см $^{-3}$	23	7	22

тыре методики избирательно чувствительны к дефектам с меньшим радиусом с примерно одинаково высокой точностью. При этом точность определения характеристик дефектов с большим радиусом в 3–4 раза хуже. Случай геометрии дифракции по Лауэ демонстрирует при этом более высокую чувствительность к обоим типам дефектов в сравнении с геометрией дифракции по Брэггу.

Проведённый анализ чувствительности кривых отражения касался только дефектов в подложке, однако, разработанная модель позволяет изучать характеристики дефектов селективно в каждом слое системы. Для доказательства такой возможности даже в наименее чувствительном к характеристикам дефектов случае геометрии дифракции по Брэггу, например, для наиболее тонкого слоя, а именно, квантовой ямы рассматриваемой многослойной системы, проанализирован предел чувствительности (т.е. возможности опре-

ТАБЛИЦА 7. Случай подложки из почти идеального кристалла (на пределе чувствительности методик), два типа мелких дефектов, равные вклады в L_H дефектов обоих типов, прямое рассеяние. $L_H = 0,002$, $R_1 = 5$ нм, $n_1 = 3 \cdot 10^{15}$ см⁻³ ($L_H^1 = 0,001$), $R_2 = 2$ нм, $n_2 = 3 \cdot 10^{17}$ см⁻³ ($L_H^2 = 0,001$).

Геометрия дифракции по Брэггу, прямое рассеяние				Геометрия дифракции по Лауэ, прямое рассеяние			
A	ΔA , %	R, %	R_w , %	A	ΔA , %	R, %	R_w , %
$R_1 = 5$ нм	36	11	22	$R_1 = 5$ нм	27	7	21
$n_1 = 3 \cdot 10^{15}$ см ⁻³	170	6	21	$n_1 = 3 \cdot 10^{15}$ см ⁻³	110	4	22
$R_2 = 2$ нм	10	3	22	$R_2 = 2$ нм	8	0	22
$n_2 = 3 \cdot 10^{17}$ см ⁻³	43	2	22	$n_2 = 3 \cdot 10^{17}$ см ⁻³	27	1	22

ТАБЛИЦА 8. Случай подложки из почти идеального кристалла (на пределе чувствительности методик), два типа мелких дефектов, равные вклады в L_H обоих типов дефектов, обратное рассеяние. $L_H = 0,002$, $R_1 = 5$ нм, $n_1 = 3 \cdot 10^{15}$ см⁻³ ($L_H^1 = 0,001$), $R_2 = 2$ нм, $n_2 = 3 \cdot 10^{17}$ см⁻³ ($L_H^2 = 0,001$).

Геометрия дифракции по Брэггу, обратное рассеяние				Геометрия дифракции по Лауэ, обратное рассеяние			
A	ΔA , %	R, %	R_w , %	A	ΔA , %	R, %	R_w , %
$R_1 = 5$ нм	26	11	22	$R_1 = 5$ нм	15	3	21
$n_1 = 3 \cdot 10^{15}$ см ⁻³	105	6	21	$n_1 = 3 \cdot 10^{15}$ см ⁻³	76	2	22
$R_2 = 2$ нм	7	3	21	$R_2 = 2$ нм	7	1	22
$n_2 = 3 \cdot 10^{17}$ см ⁻³	28	2	21	$n_2 = 3 \cdot 10^{17}$ см ⁻³	25	1	22

деления характеристик дефектов с заданной точностью) для двух таких, как в подложке, типов дефектов с радиусами кластеров 2 нм и 6 нм. Установлено, что кривые дифракционного отражения неразличимы для случаев отсутствия дефектов в квантовой яме и их наличия до предельных значений концентраций $n = 5 \cdot 10^{24}$ м⁻³ для кластеров с радиусом 2 нм, и $n = 3 \cdot 10^{22}$ м⁻³ для кластеров с радиусом 6 нм. С другой стороны, при этом показано, что наличие в квантовой яме таких дефектов с концентрациями, превышающими найденные предельные, может быть надёжно установлено разработанными методами, а их характеристики могут быть количественно определены с указанной выше необходимой точностью.

Таким образом, установлен эффект изменения избирательности чувствительности картины многократного рассеяния (кривой отражения) к дефектам разного типа в многослойных системах при вариациях условий динамической дифракции. Этот эффект существенно повышает информативность диагностики и может быть ис-

пользован для создания на основе построенной теоретической модели многопараметрической диффузодинамической комбинированной дифрактометрии многослойных систем.

5.3.5. Физические принципы создания на основе разработанных моделей и обнаруженных эффектов многопараметрической кристаллографии многослойных систем с дефектами

В настоящем разделе работы предлагаются и обосновываются физические принципы однозначного решения обратной задачи рассеяния при диагностике многослойных наносистем, которые содержат одновременно дефекты нескольких типов. При этом характеристики дефектов в различных слоях могут существенно отличаться, то есть речь идёт о создании основ многопараметрической кристаллографии многослойных наносистем.

Для примера рассмотрен случай исследованной в предыдущих разделах наносистемы, в подложке которой одновременно присутствуют сферические кластеры двух размеров с радиусом 2 нм и концентрацией $7 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, а также с радиусом 6 нм и концентрацией $2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$.

На рисунке 22 представлены результаты диагностики характеристик дефектов указанных двух типов (при фиксированных пара-

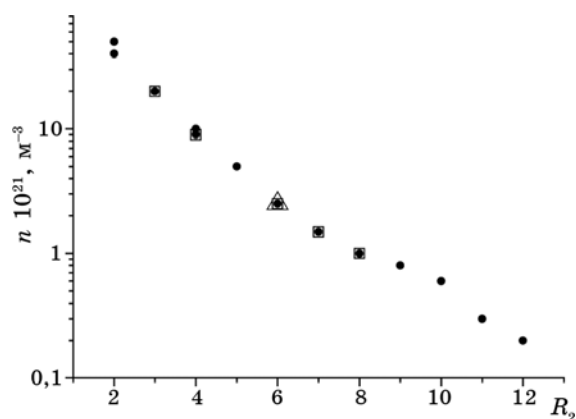


Рис. 22. Результаты диагностики характеристик дефектов подложки многослойной наносистемы. Круглые сплошные маркёры соответствуют наборам дефектов, удовлетворяющим кривую отражения для случая прямого рассеяния в геометрии дифракции по Брэггу, квадратные маркёры — наборам дефектов, удовлетворяющим одновременно кривые отражения как для случая прямого рассеяния в геометрии дифракции по Брэггу, так и по Лауэ, а треугольный маркёр соответствует характеристикам того единственного набора дефектов, который удовлетворяет всем четырём кривым отражения.

метрах кластеров меньшего размера) для этой системы на основе использования построенных теоретических моделей в четырёх (см. рис. 18), рассмотренных выше, случаях условий динамической дифракции.

На первом этапе диагностика осуществлялась путём фитирования кривой отражения для случая прямого рассеяния в геометрии дифракции по Брэггу. При этом характеристики более мелких дефектов фиксировались ($R_1 = 2$ нм, $n_1 = 7 \cdot 10^{16}$ см⁻¹), а варьировались характеристики только дефектов второго типа. Результаты такого фитирования демонстрируются черными круглыми маркерами на рис. 22.

Из этих результатов следует, что одной рассмотренной кривой отражения одновременно удовлетворяют несколько (все представленные сплошные круглые маркеры) различных наборов характеристик дефектов двух типов, что и демонстрирует неоднозначность такой диагностики. Однако если потребовать, чтобы эти характеристики удовлетворяли одновременно и кривой отражения для прямого рассеяния в случае геометрии дифракции по Лауэ, то из всех круглых маркеров такими (для которых характеристики дефектов удовлетворяют обеим кривым) останутся только пять, показанных на рис. 22 квадратными маркерами. И, наконец, всем четырём кривым отражения останутся удовлетворяющими характеристики только единственной пары дефектов, представленных треугольным маркером на рис. 22.

В результате показано, что только комбинированная обработка с использованием построенных теоретических моделей одновременно всех четырёх кривых отражения, которые могут быть получены экспериментально в соответствующих четырёх рассмотренных случаях динамической дифракции, может позволить решить проблему однозначной многопараметрической диагностики гетеросистем.

Результаты многопараметрической диагностики всех характеристик системы, представленной на рис. 17, приведены в табл. 9.

Таким образом, можно сделать следующие выводы по результатам, полученным в разделе 5.3.

Проведён анализ информативных возможностей диагностики на основе построенных моделей диффузодинамической дифрактометрии, комбинирующей кривые отражения, экспериментально реализуемые в различных условиях дифракции: геометрии дифракции, как по Брэггу, так и по Лауэ, как для прямого, так и для обратного рассеяния в предельных случаях динамически «толстых» и «тонких» многослойных систем с дефектами в случаях больших и малых отношений длин абсорбции и экстинкции, т.е. больших и малых вкладов диффузной составляющей, и др.

Обнаружен эффект чувствительности, причём уникально высокой, к характеристикам дефектов зависимостей от условий дифракции динамической картины рассеяния или кривых отражения в многослойных системах с дефектами.

ТАБЛИЦА 9. Характеристики многослойной структуры с дефектами.

	Подложка GaAs	Слой GaAs	Слой Al _x Ga _{1-x} As	Слой GaAs _{1-y} N _y	Слой GaAs _{1-x} As _{1-y} N _y	Слой In _x Ga _{1-x} As _{1-y} N _y
Толщины слоев <i>t</i> , мкм	350	150·10 ⁻³ 175·10 ⁻³ 150·10 ⁻³ 10·10 ⁻³	320·10 ⁻³ 120·10 ⁻³	24·10 ⁻³ 24·10 ⁻³		7,4·10 ⁻³
Химический состав слоев, <i>x</i> <i>y</i>	-	-	0,3			0,37 0,02
	2·10 ¹⁵ 7·10 ¹⁶	-	-	0,012		
Сферические кластеры	6	-	-			
	2	-	-			

Этот эффект проявляется в том, что в многослойных системах с неравномерно распределёнными по слоям дефектами, как и в монокристаллах с однородно распределёнными дефектами нескольких типов возникает при переходе от кинематического к динамическому рассеянию явление чувствительной к типу и характеристикам дефектов многообразности кривых отражения при изменении условий дифракции. При этом показано, что эффект радикального повышения при переходе от кинематической к динамической дифракции чувствительности к характеристикам дефектов и информативности диагностики обусловлен не столько улучшением структурной чувствительности самих динамических картин рассеяния или кривых отражения, сколько появлением принципиально только при многократном рассеянии такой структурной чувствительности, как оказалось, именно у зависимостей от условий дифракции этих картин рассеяния и, в частности, кривых отражения. В результате предложен новый подход и принципы диффузодинамической комбинированной многопараметрической дифрактометрии многослойных систем с дефектами по характеру влияния дефектов не на сами динамические кривые отражения, а на их зависимости от условий дифракции. При этом дополнительно информативность диагностики существенно повышается благодаря установленному в случае многослойных систем с дефектами эффекту изменения при вариациях условий динамической дифракции избирательности чувствительности кривых отражения к дефектам от одного к другому типу. Таким образом, в результате созданы основы многопараметрической кристаллографии для многослойных наносистем.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе изложены физические основы многопараметрической диффузодинамической комбинированной дифрактометрии дефектов нескольких типов и параметров сверхструктуры в монокристаллических материалах и многослойных наносистемах.

Обсуждено открытое авторами явление зависимости от условий дифракции характера влияния дефектов на картину динамического рассеяния. Установлена его природа и разработаны принципы экспериментальной реализации на его основе впервые неразрушающей многопараметрической диагностики, т.е. однозначного решения обратной задачи восстановления по картине многократного рассеяния в различных условиях дифракции характеристик сразу нескольких типов дефектов и большого числа параметров сверхструктуры монокристаллических изделий нанотехнологий.

Показано, что физические механизмы установленной интерференционно-ориентационной природы, т.е. первопричина, этого от-

крытого явления, которое обеспечивает возникновение большого числа уникально структурночувствительных зависимостей картины рассеяния от различных параметров, характеризующих условия дифракции, состоят в следующем. При переходе от кинематического рассеяния к динамическому законы дисперсии как для брэгговских, так и для диффузных волн приобретают блоховские интерференционные свойства, в результате которых принципиально изменяется характер взаимодействия излучения с кристаллом. А именно, усреднённое по координатам взаимодействие с бегущими волнами при кинематическом рассеянии заменяется при динамической дифракции на взаимодействие упорядоченных периодически атомных плоскостей кристалла, искажённых дефектами, со сформированными этой периодичностью стоячими (блоховскими) как брэгговскими, так и диффузными волновыми полями с периодом, равным расстоянию между рассеивающими «в среднем» периодически расположенными плоскостями. При этом рассеяние на отклонениях от периодичности обеспечивает перенормировку (ослабление) брэгговской составляющей волнового поля, а главное возникновение первоначально бегущих диффузных волн, которые преобразуются в стоячие при последующем рассеянии на периодической части потенциала кристалла. Это обуславливает соответствующую атомно-размерную разрешающую способность и уникальную информативность динамической дифрактометрии характеристик дефектов в кристаллах, которая обеспечивается таким уникальным самоорганизованным, но управляемым, как показано в работе, условиями дифракции зондом, который в отличие от классического метода стоячих волн из-за появления возможности взаимодействия зонда с отклонениями от периодичности и дополнительно возникновения при этом в самом зонде пакета стоячих диффузных волн оказывается зависящим от характеристик дефектов взаимосвязано с зависимостями от условий дифракции. Характер взаимодействия при этом существенно определяется структурой и локализацией этого зонда, а именно, блоховских брэгговского и диффузных волновых полей относительно атомных плоскостей и смещённых от дефектов атомов. В результате характер взаимодействия приобретает уникальную ориентационную зависимость, описывающую (при отклонениях лучей то в одну, то в другую сторону от точного положения Вульфа–Брэгга) переход в структуре и локализации зонда от волновых полей, локализованных пучностями на атомных плоскостях (для одной ветви дисперсионной поверхности), к полям, локализованным между плоскостями (для другой ветви дисперсионной поверхности) в случае геометрии дифракции по Брэггу с соответствующим изменением характера взаимодействия зонда с кристаллом, а также последующий переход характера взаимодействия от ориентационно-зависящего динамического к не зависящему от ориентации кинема-

тическому с дальнейшим ростом отклонений от условий Вульфа–Брэгга (для обеих геометрий дифракции по Брэггу и по Лауэ). Эти зависимости от условий дифракции, как и сами ориентационные эффекты, оказались принципиально разными для разных составляющих — брэгговской (ориентационные эффекты в зависимости от угла падения) и диффузной (набор двойных ориентационных эффектов в зависимости от отклонений относительно условий Вульфа–Брэгга, как направлений падения ($\Delta\theta$), так и выхода ($\Delta\theta'$) лучей). Также все эти зависимости существенно отличаются между собой для дефектов разного типа, так как для каждого типа дефектов существует своё распределение диффузного рассеяния по углам выхода. В результате каждая из определяемых по своему характеристиками дефектов определённого типа флуктуационных волн с волновым вектором \mathbf{k} и соответствующая ей стоячая диффузная волна имеют своё отклонение направления выхода ($\Delta\theta'$) от условий Вульфа–Брэгга и, следовательно, свой характер взаимодействия с кристаллом, зависящий по своему (соответственно направлению выхода и, следовательно, структуре и локализации диффузной стоячей волны) от условий дифракции. При этом для фиксированного \mathbf{k} величина $\Delta\theta'$ определяется величиной $\Delta\theta$, управляемой условиями дифракции, а при фиксированном $\Delta\theta$ — величиной \mathbf{k} , зависящей от характеристик дефектов. Таким образом, зависимости картины многократного рассеяния от характеристик дефектов и от условий дифракции оказываются взаимосвязанными. Указанные ориентационные эффекты и взаимосвязанные зависимости от условий дифракции и от характеристик дефектов, структуры и локализации зонда (из взаимодействующих брэгговских и пакета диффузных волновых полей) обуславливают соответствующие зависимости интерференционных отражающей (преломление) и поглощающей способностей кристалла как для брэгговской, так и для диффузной составляющих, появляющиеся при динамической дифракции и описывающиеся впервые найденными авторами (мировой приоритет принадлежит ИМФ НАНУ) динамическими множителями [20–29]. Указанные множители описаны в разделе 2 настоящей статьи и характеризуют эти взаимосвязанные зависимости и от характеристик дефектов и от различных условий дифракции распределения в пространстве обратной решётки картины рассеяния (прежде всего её диффузной составляющей), и, следовательно, зависимости характера влияния дефектов на распределения диффузодинамической картины, от условий дифракции за счёт указанных ориентационных эффектов, принципиально отсутствующих при кинематическом рассеянии. Следует отметить, что при динамической дифракции указанная взаимосвязь зависимостей от характеристик дефектов и от условий дифракции картины динамического рассеяния, определяющая возникновение её многообразности и, следовательно,

уникальной информативности, может быть обеспечена уже только наличием и перемножением в диффузной составляющей двух факторов, один из которых приобретает ориентационную зависимость от $\Delta\theta$ за счёт блоховского (стоячего) характера брэгговского волнового поля, которая определяется условиями дифракции, а другой обладает ориентационной зависимостью от вектора \mathbf{k} за счёт зависимости от этого вектора фурье-компонент поля смещений атомов от дефектов кристалла, которая задаётся характеристиками дефектов.

Кроме того, дополнительное (особенно существенное для брэгговской составляющей волнового поля в кристалле) различие зависимостей от условий дифракции для дефектов разного типа обеспечивается открытыми и описанными в ИМФ динамическими эффектами экстинкции за счёт рассеяния на дефектах и зависимости от дефектов интерференционного коэффициента поглощения, имеющими свою специфическую зависимость от условий дифракции, определяемую типом дефектов, т.е. указанные выше зависимости здесь также взаимосвязаны. Последние две причины, обеспечивающие взаимосвязь зависимостей картины рассеяния от условий дифракции и от характеристик дефектов, как и отмеченная выше аналогичная особенность стоячего волнового зонда (диффузодинамического волнового поля), обуславливают в целом появление указанных выше уникальных информативных возможностей многообразной диффузодинамической картины рассеяния, в частности, возможности многопараметрической диагностики. При этом сама уникальная структурная чувствительность зависимости от какого-либо одного параметра, характеризующего условия дифракции, обеспечивает принципиальную возможность при динамической дифракции повышения информативности диагностики характеристик дефектов и её появления при динамическом рассеянии для интегральной дифрактометрии, а наличие нескольких таких зависимостей от различных параметров, характеризующих условия дифракции, обеспечивает возможность именно многопараметрической диагностики.

При этом проведённый радикальный пересмотр теоретических основ обуславливает новизну экспериментальных и методических основ предлагаемого в результате нового подхода, которая состоит в следующем. При старом подходе традиционно измеряют единственные структурночувствительные при однократном (кинематическом) рассеянии распределения в пространстве обратной решётки дифрагированной интенсивности излучений. В случае двумерных распределений (мапы в обратном пространстве) они оказываются наиболее информативными, однако при этом наименее чувствительными, особенно на хвостах распределений. В случае измерения интегральных интенсивностей они оказываются наиболее чувствительными и достаточно информативными, однако только при ди-

намической дифракции, так как принципиально полностью теряют в кинематическом случае информативность относительно характеристик дефектов, а, кроме того ни в каких указанных предельных, ни в промежуточных (кривые отражения) случаях при любых фиксированных условиях дифракции не позволяют решить обратную задачу рассеяния при необходимости восстановления по картинам дифракции характеристик сразу нескольких типов дефектов, т.е. многопараметрическую задачу.

Указанные недостатки устраняются в новом подходе, в котором вместо традиционных предлагаются измерения при динамической дифракции принципиально новых (оказавшихся уникально чувствительными к характеристикам дефектов, однако только за счёт эффектов многократности рассеяния и, следовательно, в случае кинематической дифракции принципиально неинформативными) структурно чувствительных распределений этой интенсивности, а именно распределений не в пространстве обратной решётки, а в существенно более многомерном пространстве параметров, характеризующих условия динамической дифракции. Во-первых, это позволило осуществить экспериментальное и соответствующее теоретическое интегрирование по пространству обратной решётки интенсивностей рассеяния и в результате существенно повысить чувствительность, экспрессность и простоту диагностики, однако компенсируя с лихвой за счёт использования этих новых распределений неизбежные уменьшение в динамическом случае и полную потерю в кинематическом, обусловленные интегрированием по обратному пространству, информативности диагностики характеристик дефектов. Во-вторых, измерения этих оказавшихся уникально чувствительными к характеристикам дефектов зависимостей уже интегральных интенсивностей от различных условий дифракции позволили при динамической дифракции не только компенсировать и существенно повысить информативность диагностики. Более того, за счёт возможности экспериментального измерения значительно большего (чем традиционно измерения зависимостей максимум от двух углов рассеяния в пространстве обратной решётки) количества этих новых зависимостей, обусловленного большим числом различных дифракционных параметров, эти новые измерения обеспечили возможность решения многопараметрической задачи. В результате заложены основы для создания экспрессной, высокочувствительной и информативной многопараметрической кристаллографии, реализация которой принципиально невозможна в рамках традиционных кинематических представлений и методик.

Работа выполнена при финансовой поддержке Государственного агентства по вопросам науки, инноваций и информатизации Украины (договора № М/217–2011, № М/218–2011) и НАН Украины (договор № 3.6.3.13-7/11–Д).

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. M. Von Laue, *Rontgenstrahlinterferenzen* (Leipzig: Akademische Verlagsges: 1948).
2. C. Hammond, *The Basics of Crystallography and Diffraction*. 2nd 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. А. И. Ахизер, И. Я. Померанчук, *Некоторые вопросы теории ядра* (Москва: ОГИЗ: 1948).
6. М. В. Ковальчук, В. Г. Кон, *УФН*, **149**, № 1: 69 (1986).
7. M. A. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin: Springer: 1996).
8. 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.
9. А. П. Шпак, М. В. Ковальчук, В. Б. Молодкін, Г. І. Низкова, І. В. Гінько, С. Й. Оліховський, Є. М. Кисловський, Є. Г. Лень, А. О. Білоцька, К. В. Первак, В. В. Молодкін, *Спосіб багатопараметричної структурної діагностики монокристалів з декількома типами дефектів* (Патент України № 36075. Зареєстровано в Державному реєстрі патентів України на винаходи 10.10.2008 р.).
10. А. П. Шпак, М. В. Ковальчук, И. М. Карнаухов и др., *Успехи физ. мет.*, **9**, № 3: 305 (2008).
11. А. П. Шпак, М. В. Ковальчук, В. Л. Носик и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **31**, № 5: 615 (2009).
12. А. П. Шпак, М. В. Ковальчук, В. Б. Молодкин и др., *Успехи физ. мет.*, **10**, № 3: 229 (2009).
13. А. П. Шпак, М. В. Ковальчук, В. Б. Молодкін, В. Л. Носик, В. Ю. Сторіжко, Л. А. Булавін, І. М. Карнаухов, Р. І. Барабаш, Дж. Е. Айс, Г. І. Низкова, І. В. Гінько, С. Й. Оліховський, Є. М. Кисловський, В. А. Татаренко, Є. Г. Лень, А. О. Білоцька, К. В. Первак, В. В. Молодкін, *Спосіб багатопараметричної структурної діагностики монокристалів з декількома типами дефектів* (Патент України № 89594. Зареєстровано в Державному реєстрі патентів України на винаходи 10.02.2010 р.).
14. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, М. В. Ковальчук и др., *Металлофиз. новейшие технол.* **31**, № 7: 927 (2009).
15. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, М. В. Ковальчук и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **31**, № 8: 1041 (2009).
16. А. П. Шпак, В. В. Молодкин, *Металлофиз. новейшие технол.*, **32**, № 11: 1435 (2010).
17. А. П. Шпак, М. В. Ковальчук, В. Б. Молодкин и др., *Актуальные вопросы современного естествознания*, вып. 9: 45 (2011).
18. В. Б. Молодкин, А. П. Шпак, М. В. Ковальчук и др. *Металлофиз. новейшие технол.*, **33**, № 8: 1083 (2011).
19. В. Б. Молодкин, А. П. Шпак, М. В. Ковальчук и др., *УФН*, **181**, № 7: 681 (2011).

20. В. Б. Молодкин, Е. А. Тихонова, *Физ. мет. металловед.*, **24**, № 3: 385 (1967).
21. В. Б. Молодкин, *Физ. мет. металловед.*, **25**, № 3: 410 (1968).
22. В. Б. Молодкин, *Физ. мет. металловед.*, **27**, № 4: 582 (1969).
23. В. Б. Молодкин, *Металлофизика*, **2**, № 1: 3 (1980).
24. V. B. Molodkin, *Phys. Metals*, **3**: 615 (1981).
25. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, and M. E. Osinovskii, *Phys. Metals*, **5**: 1 (1984).
26. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, and M. E. Osinovskii, *Phys. Metals*, **5**: 847 (1985).
27. V. V. Kochelab, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, and M. E. Osinovskii, *Phys. Status Solidi A*, **108**, No. 1: 67 (1988).
28. Л. И. Даценко, В. Б. Молодкин, М. Е. Осиновский, *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами* (Киев: Наукова думка: 1988).
29. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii et al., *Phys. Status Solidi B*, **227**, No. 2 : 429 (2001).
30. S. I. Olikhovskii, V. B. Molodkin, E. N. Kislovskii et al. *Phys. Status Solidi B*, **231**, No. 1: 199 (2002).
31. С. И. Олиховский, В. Б. Молодкин, О. С. Кононенко и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**: № 7: 887 (2007).
32. С. И. Олиховский, В. Б. Молодкин, О. С. Кононенко и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 9: 1225 (2007).
33. С. И. Олиховский, В. Б. Молодкин, А. И. Низкова и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 10: 1333 (2007).
34. В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, А. П. Шпак и др., *Дифрактометрия наноразмерных дефектов и гетерослоев кристаллов* (Киев: Академперіодика: 2005).
35. А. Н. Багов, Ю. А. Динаев, А. А. Дышеков, Т. И. Оранова, Ю. П. Хапачев, Р. Н. Кютт, Е. Г. Лень, В. В. Молодкин, А. И. Низкова, А. П. Шпак, В. А. Елюхин, *Рентгенодифракционная диагностика упруго-напряженного состояния наногетероструктур* (Нальчик: Каб.-Балк. ун-т: 2008).
36. A. P. Shpak, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii et al., *Phys. Status Solidi A*, **204**, No. 8: 2651 (2007).
37. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii et al., *Phys. Status Solidi A*, **204**, No. 8: 2606 (2007).
38. В. Б. Молодкин, Г. И. Гудзенко, С. И. Олиховский, М. Е. Осиновский, *Металлофизика*, **5**, № 3: 10 (1983).
39. В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, М. Е. Осиновский и др. *Металлофизика*, **6**, № 2: 18 (1984).
40. В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, М. Е. Осиновский и др., *Металлофизика*, **6**, № 3: 105 (1984).
41. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, M. E. Osinovskii et al., *Phys. Status Solidi A*, **87**, No. 2 : 597 (1985).
42. В. В. Немошкаленко, В. Б. Молодкин, Е. Н. Кисловский и др., *Металлофизика*, **16**, № 2: 48 (1994).
43. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, *Успехи физ. мет.*, **5**, № 1: 51 (2004).
44. А. И. Низкова, В. Б. Молодкин, И. А. Московка, *Металлофиз. новейшие технол.*, **26**, № 6: 783 (2004).

45. В. Б. Молодкин, В. В. Немошкаленко, А. И. Низкова и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **22**, № 3: 3 (2000).
46. В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, С. В. Дмитриев и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **27**, № 12: 1659 (2005).
47. J. E. Thomas, T. O. Baldwin, and P. H. Dederichs, *Phys. Rev. B*, **3**: 1167 (1971).
48. Р. Н. Кютт, В. В. Ратников, *Металлофизика*, **7**, № 1: 36 (1985).
49. W. L. Bond, *Acta Cryst.*, **13**: 814 (1960).
50. В. Б. Молодкин, С. Й. Оліховський, Б. В. Шелудченко та ін., *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*, **6**, № 3: 785 (2008).
51. В. Б. Молодкин, С. Й. Оліховський, Б. В. Шелудченко та ін., *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*, **6**, № 3: 807 (2008).
52. Є. М. Кисловський, О. В. Решетник, Т. П. Владімірова та ін., *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 5: 701 (2007).
53. В. Б. Молодкин, С. Й. Оліховський, Б. В. Шелудченко та ін., *Металлофиз. новейшие технол.*, **30**, № 9: 1173 (2008).
54. В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, Е. Н. Кисловский и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **19**, № 12: 25 (1997).
55. V. V. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. G. Len et al., *Phys. Status Solidi A*, **206**, No. 8: 1761 (2009).
56. З. Г. Пинскер, *Рентгеновская кристаллооптика* (Москва: Наука: 1982).
57. Е. А. Тихонова, *Физ. тверд. тела*, **9**, № 2: 516 (1967).
58. Р. Н. Dederichs, *Phys. Rev. B*, **1**, No. 4: 1306 (1970).
59. В. В. Немошкаленко, В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **22**, № 2: 51 (2000).
60. С. Й. Оліховський, Є. М. Кисловський, В. Б. Молодкин та ін., *Металлофиз. новейшие технол.*, **22**, № 6: 3 (2000).
61. В. Г. Барьяхтар, Е. Н. Гаврилова, В. Б. Молодкин и др., *Металлофизика*, **14**, № 11: 68 (1992).
62. V. V. Nemoshkalenko, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii et al., *Nucl. Instrum. and Meth. in Physics Research A*, **308**, No. 1: 294 (1991).
63. В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, С. В. Дмитриев и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **28**, № 7: 953 (2006).
64. В. Б. Молодкин, С. В. Дмитриев, Е. В. Первак и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **28**, № 8: 1047 (2006).
65. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, С. В. Дмитриев и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **30**, № 9: 1189 (2008).
66. Л. И. Даценко, Е. Н. Кисловский, *Укр. физ. ж.*, **20**, № 5: 810 (1975).
67. L. I. Datsenko, E. N. Kislovsky, and I. V. Prokopenko, *Ukr. Fiz. Zh.*, **22**: 513 (1977).
68. V. V. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii et al., *Phys. Rev. B*, **78**: 224109 (2008).
69. С. И. Олиховский, В. Б. Молодкин, Е. М. Кисловский и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **27**, № 7: 947 (2005).
70. С. И. Олиховский, В. Б. Молодкин, Е. М. Кисловский и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **27**, № 9: 1251 (2005).
71. В. М. Каганер, В. Л. Инденбом, *Металлофизика*, **8**, № 1: 25 (1986).
72. В. Е. Дмитриенко, В. М. Каганер, *Металлофизика*, **9**, № 1: 71 (1987).
73. А. Ю. Белов, В. М. Каганер, *Металлофизика*, **9**, № 4: 79 (1987).
74. В. А. Бушуев, *Кристаллография*, **39**, № 5: 803 (1994).

75. В. А. Бушуев, *Кристаллография*, **39**, № 6: 983 (1994).
76. В. И. Пунегов, А. В. Харченко, *Кристаллография*, **43**, № 6: 1078 (1998).
77. К. М. Pavlov and V. I. Punegov, *Acta Cryst. A*, **A56**, No. 2: 227 (2000).
78. V. Holy and K. T. Gabrielyan, *Phys. Status Solidi B*, **140**: 39 (1987).
79. А. М. Поляков, Ф. Н. Чуховский, Д. И. Пискунов, *ЖЭТФ*, **99**, № 2: 589 (1991).
80. N. Kato, *Acta Cryst.*, **A36**, No. 5: 763 (1980).
81. V. V. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. G. Len et al., *Phys. Status Solidi A*, **206**, No. 8: 1761 (2009).
82. V. V. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii et al., *Phys. Rev. B*, **78**: 224109 (2008).
83. A. Borghesi, B. Pivac, A. Sassella, and A. Stella, *J. Appl. Phys.*, **77**: 4169 (1995).
84. С. В. Лизунова, В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **33**, № 6: 791 (2011).
85. С. В. Лизунова, В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **33**, № 7: 855 (2011).