

CRYSTAL-LATTICE DEFECTS

PACS numbers: 07.85.-m, 61.05.cc, 61.72.Lk, 61.72.Mm

Високороздільча X-променева дифрактометрія кристалічних сполук з розвиненою дислокаційною структурою

I. M. Фодчук, А. Р. Кузьмін, І. І. Гуцуляк, М. С. Солодкий,
О. Л. Маслянчук, Ю. Т. Роман, В. П. Кладько*, О. Й. Гудименко*,
В. Б. Молодкін**, В. В. Лізунов**

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

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

***Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,
бульв. Академіка Вернадського, 36,
03142 Київ, Україна*

Структурні дефекти кристалічних сполук впливають на працездатність приладів, виготовлених на основі таких матеріалів. Запропоновано методу розрахунку дислокаційної структури таких сполук з проміжними значеннями густин дислокацій ($\sim 10^5$ – 10^6 см⁻²). Показано вплив різного роду дефектів на формування дифузної та когерентної складових розподілів інтенсивності розсіяння X-променів. Розглянуто вірогідні дислокаційні реакції як на межах блоків, так і всередині кристалів. На основі кінематичної теорії Кривоглаза з використанням методу Монте-Карло дос-

Corresponding author: Ihor Mykhaylovych Fodchuk
E-mail: ifodchuk@ukr.net

*Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University,
2 Kotsyubynsky Str., UA-58012 Chernivtsi, Ukraine*

**V. E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, N.A.S. of Ukraine,
41 Nauky Ave., UA-03028 Kyiv, Ukraine*

***G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine*

Citation: I. M. Fodchuk, A. R. Kuzmin, I. I. Gutsuliak, M. S. Solodkyi,
O. L. Maslyanchuk, Yu. T. Roman, V. P. Kladko, O. Yo. Gudymenko, V. B. Molodkin,
and V. V. Lizunov, High-Resolution X-Ray Diffractometry of Crystalline Compounds
with Developed Dislocation Structure, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **43**, No. 10:
1289–1304 (2021) (in Ukrainian), DOI: [10.15407/mfint.43.10.1289](https://doi.org/10.15407/mfint.43.10.1289).

ліджено можливу дислокаційну систему у вигляді набору повних 60° -дислокацій та частинних дислокацій.

Ключові слова: кристалічні сполуки, високороздільча X-променева дифрактометрія, дефектна структура, метод Монте-Карло, криві гойдання, карти оберненого простору.

Structural defects of crystalline compounds affect the performance of devices based on such materials. A dislocation structure simulation method for crystalline compounds with intermediate values of dislocation densities is proposed ($\sim 10^5$ – 10^6 cm $^{-2}$). The influence of various defects on shape of diffuse and coherent components of intensity distributions of X-ray scattering is shown. Probable dislocation reactions are considered at block boundaries and inside of crystals. Possible dislocation system as the set of complete 60° -dislocations and partial dislocations is investigated based on Krivoglaz kinematic theory with use of Monte Carlo method.

Key words: crystalline compounds, high-resolution X-ray diffractometry, defect structure, Monte Carlo method, rocking curves, reciprocal space maps.

(Отримано 16 червня 2021 р.)

1. ВСТУП

Кристалічні сполуки телуриду кадмію належать до кубічної сингонії з просторовою групою $F3m$ та мають ґратницю типу сфалериту з параметром $a = 6,481$ Å і є полярними. Це означає, що ядра повних дислокацій можуть закінчуватися атомними площинами Cd або Te. Для даного типу ґратниці характерні високі концентрації різних типів дислокацій, а саме: повні дислокації, частинні дислокації (зокрема, α - та β -дислокації Шоклі та Франка), вершинні дислокації, дислокації Ломера–Котрелла, гелікоїдальні дислокації, орієнтаційні характеристики яких описують тетраедром Томсона [1, 2]. Дислокації, завдяки своїй специфічній природі, відіграють важливу роль у реакції матеріалу на зовнішні напруги та впливають на електронні та механічні властивості пристроїв виготовлених на основі матеріалів, що їх містять [3, 4].

Кристалічним сполукам телуриду кадмію притаманна складна дефектна структура, зокрема, малокутові границі, поліблочність та високі густини дислокацій. Для CdTe властиве також явище самокомпенсації, коли нейтралізується дія введених домішок донорного чи акцепторного типу утворенням власних дефектів з протилежною дією [5]. Окрім цього, власні дефекти, взаємодіючи з домішками, за певних умов, можуть утворювати різного типу електрично активні та неактивні комплекси.

Кутові розподіли інтенсивності $I_h(\omega)$ (криві гойдання) та $I_h(\omega, 2\theta - \omega)$ (карти оберненого простору), одержані з використан-

ням методик Х-променевої дифрактометрії, дають можливість оцінити тип та концентрацію мікрodefектів, інтегральні та локальні значення величин деформації, радіус згину атомних площин, густину дислокацій, а також симетрію полів утворених ними статичних спотворень [6–10]. Аналіз дифузної складової розподілів інтенсивності $I_h(\omega)$ та $I_h(\omega, 2\theta - \omega)$ дає можливість отримати інформацію про мікрodefекти, тоді як інформація про лінійні дефекти (дислокації) закладена в центральній частині розподілу $I_h(\omega)$ і визначається когерентною складовою розсіяння [11–13].

Застосування дифрактометричних методів для визначення параметрів структурних недосконалостей монокристалів в даній статті проілюстровано на прикладах напівпровідникових матеріалів. Проте, доцільність використання таких методів для вивчення металічних монокристалів з мікрodefектами можливо навіть вища, ніж для напівпровідників. Це пов'язано з тим, що наближений опис ефектів, зокрема й динамічних, розсіяння випромінення в таких кристалічних сполуках може привести не тільки до кількісно, але і до якісно невірному опису дефектної структури. Так, наприклад, кінематична теорія розсіяння для монокристалів з дислокаціями передбачає повну відсутність когерентної складової інтенсивності. Разом з тим, у разі динамічного підходу врахування ефектів багатозовності розсіяння приводить до ефективного обрізання внеску віддалених дислокацій у характеристики розсіяння і, в результаті, навіть за достатньо високої концентрації дислокацій у кристалі зберігаються когерентні піки.

Гетероструктури виготовлені на основі оксидів металів (MoO_x , TiO_x тощо), нанесених на кристалічні сполуки телуриду кадмію, мають широке використання в різних галузях. Зокрема, виготовлені на основі телуриду кадмію детектори Х- та γ -випромінення широко використовують у таких галузях, як: космічна промисловість, медицина, системи безпеки тощо, завдяки великій ширині забороненої зони та високому атомному номеру Cd та Te [14–17].

В роботі наведено результати досліджень можливої дислокаційної системи в кристалічних сполуках телуриду кадмію, легованих хлором, за допомогою методів високороздільчої Х-променевої дифрактометрії та моделювання на основі кінематичної теорії Криволаза [18].

2. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ДОСЛІДЖЕННЯ

Об'єктами досліджень є зразки з серії монокристалічних сполук (111) CdTe, фірми Acrograd Co., Ltd, вирощені методом Бріджмена з розмірами $5 \times 5 \times 0,5 \text{ мм}^3$ [19, 20]. Експериментальні дослідження проводили на дифрактометрі Panalytical Philips X'Pert PRO для $\text{CuK}_{\alpha 1}$ -випромінення. Розбіжність первинного пучка та кутове при-

йняття кристала-аналізатора, який використовують перед детектором, — $\Delta\alpha_{i, f} \approx 12''$.

Розподіли інтенсивності $I_h(\omega)$ та $I_h(\omega, 2\theta - \omega)$ на рис. 1, 2 одержані у симетричній та асиметричній схемах дифракції. Розвинена дефектна структура характеризується наявністю на картах оберненого простору (КОП) сильного дифузного фону та розмиття областей когерентного розсіювання на кривих гоїдання (КГ) (рис. 2).

Структурну досконалість досліджуваних зразків оцінювали за значеннями повної ширини на половині висоти піка W , максимальної інтенсивності I_h^{\max} , інтегральної інтенсивності S , формою самого піка області когерентного розсіювання, а також аналізом дифузної складової (рис. 1, 2). Відповідність між експериментальними та теоретичними значеннями W КГ є одними із критеріїв оцінки ступеню структурної досконалості кристалів. Із аналізу КОП найбільш досконалим із даної серії є зразок № 1, оскільки центральна область характеризується найменшим значенням W вздовж напрямків Q_x та Q_z . Наявність додаткових піків на КГ (рис. 2) вказує на полібло-

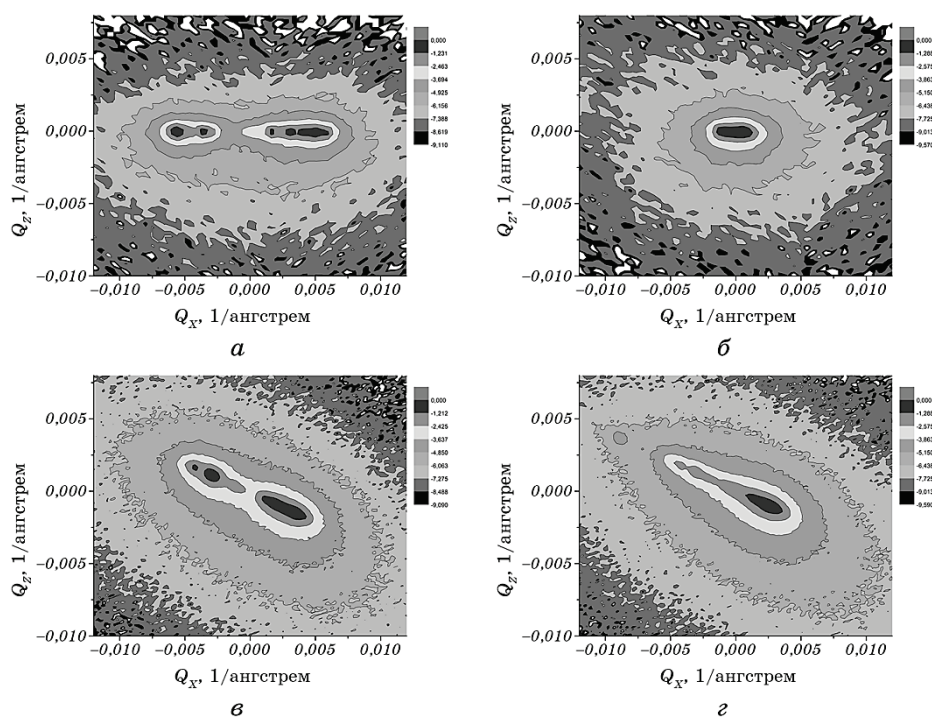


Рис. 1. Експериментальні розподіли $I_h(\omega, 2\theta - \omega)$; зразки № 3 (а, в) та № 4 (б, г), відбивання (333) (а, б) та (331) (в, г), $\text{CuK}_{\alpha 1}$ -випромінення.

Fig. 1. Experimental distribution $I_h(\omega, 2\theta - \omega)$; samples No. 3 (a, в) and No. 4 (б, г), reflexes (333) (a, б) and (331) (в, г), radiation $\text{CuK}_{\alpha 1}$.

чну структуру зразків, а їх інтенсивність та відстань між ними — на розмір та кутову розорієнтацію, відповідно.

Зазвичай, значні зміни у формі КГ, які часто спостерігаються, інтерпретують у рамках так званої феноменологічної моделі «блоків» та «спотворень» ґратниці [21]. Проте такий підхід є в значній

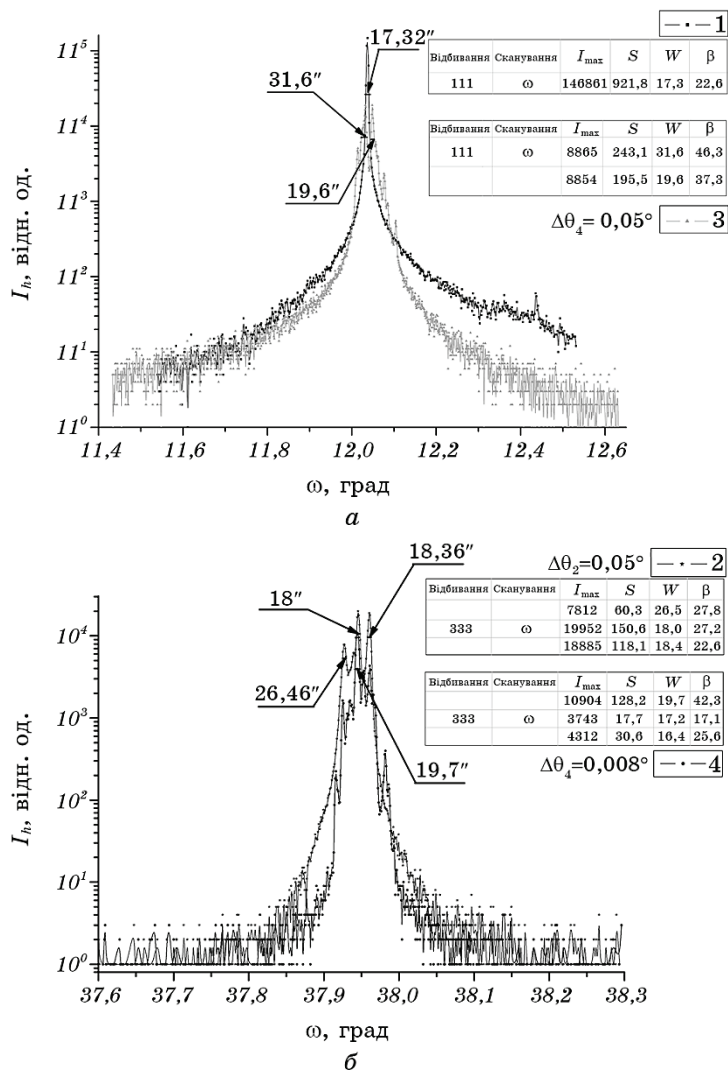


Рис. 2. Експериментальні розподіли $I_h(\omega)$; зразки № 1 та № 3 відбивання (111) (а); зразки № 2 та № 4 відбивання (333) (б), $CuK_{\alpha 1}$ -випромінєння.

Fig. 2. Experimental distribution $I_h(\omega)$ samples No. 1 and No. 3 reflex (111) (a); samples No. 2 and No. 4 reflex (333) (b), radiation $CuK_{\alpha 1}$.

мірі формальним.

Відомо, що внесок в зміну форми та W кривої гоїдання вносять: структурні недосконалості кристала, ширина кутового інтервалу відбивання монохроматора та зразка, геометричні фактори [22]. Виділення внеску кожної складової у зміну форми КГ можна проводити різними способами. Для прикладу, якщо форму КГ описують гауссовим розподілом, то частку дефектної складової, яка залежна від густини дислокацій та дефектів пакування W_G , визначають із співвідношення:

$$W_{\text{exp}} = \sqrt{W_G^2 + W_{\text{теор}}^2}, \quad (1)$$

де $W_{\text{теор}} = 2C|\chi_h|/\sin 2\theta$, χ_h — Фур'є-компонента поляризованості кристалу, C — фактор поляризованості. Зокрема, для симетричного (333) рефлексу $W_{\text{теор}} = 4''$, а асиметричного (331) — $W_{\text{теор}} = 6''$.

Із співвідношення (1) одержуємо кількісну оцінку фізичного збільшення W КГ внаслідок інтегрального впливу різного типу дефектів у кристалі. У випадку хаотичного розподілу дислокацій, який зустрічається в реальних кристалах, середню густину дислокацій можна оцінити [23]:

$$N_G = \frac{W_G^2}{9|\mathbf{b}|^2}, \quad (2)$$

де \mathbf{b} — вектор Бюргерса характерних дислокацій.

Якщо кристал, складається з блоків, розділених малокутовими границями, утворених однією системою дислокацій, то за кутом розорієнтації між двома блоками $\Delta\theta$ можна оцінити значення густини дислокацій N_L у напрямку, перпендикулярному лініям дислокацій [24]:

$$N_L = \frac{\Delta\theta}{3|\mathbf{b}|T}, \quad (3)$$

де T — середній розмір блоку, \mathbf{b} — вектор Бюргерса типових для кристалу дислокацій.

Для всіх зразків у таблиці 1 наведено оцінки N_G . Оскільки, для зразків № 2 та № 3 на розподілах $I_h(\omega)$ на рис. 2 проявляється характерна фрагментарна структура (поліблочна), то значення N_G визначалось для найбільш досконалого фрагменту. Крім того, для зразків № 2, № 3 та № 4 також враховано можливі густини дислокації N_L , які знаходяться на межах блоків (табл. 1).

Водночас, на рисунку 3 наведено також можливі густини гвинтових дислокацій N_S , які оцінені за допомогою побудови Вільямсона–Холла за значенням кута нахилу мозаїчних блоків α [25, 26]:

ТАБЛИЦЯ 1. Експериментальні густини дислокацій N_G , N_L та розраховані N_F , N_M .

TABLE 1. Experimental densities dislocation N_G , N_L and calculated N_F , N_M .

№ зразка	Рефлекс	$N_G, 10^5 \cdot \text{см}^{-2}$	$N_L, 10^6 \cdot \text{см}^{-2}$	$N_F, 10^5 \cdot \text{см}^{-2}$	$N_M, 10^5 \cdot \text{см}^{-2}$
1		3,4	–	2,4	7,2
2	333	5,8	5,12	8,2	9,3
3		6,3	4,5	7,3	8,4
4		2,9	2,1	1,8	7,8
1		1,3	–	2,8	7,3
2	331	13,1	5,58	12,3	9,6
3		10,3	4,72	11,1	8,6
4		1,3	1,3	2,2	7,9

$$N_s = \frac{\alpha^2}{4,35|b|^2}. \tag{4}$$

Одержані у табл. 1 значення N_G та N_S підтверджують, що найбільш досконалим є зразок № 1, найменш — № 2, а № 3 та № 4 займають проміжне положення. Для них характерна складна фрагментарна (поліблочна) структура та значні густини дислокацій.

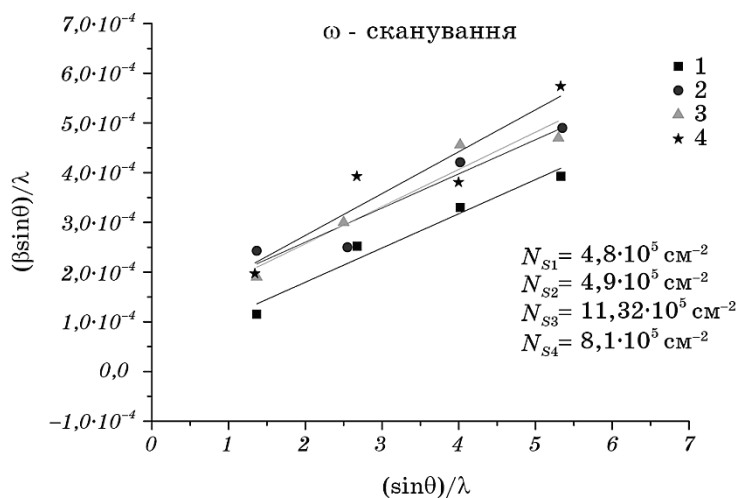


Рис. 3. Побудова Вільямсона–Холла для серії симетричних (hhh) рефлексів та оцінки N_S для зразків №№ 1–4.

Fig. 3. Williamson–Hall plot for a series of symmetric (hhh) reflexes and evaluation of N_S in samples No. 1–No. 4.

Загалом, кристали телуриду кадмію, крім дислокацій, характеризується наявністю цілого спектру мікроефектів, включень іншої фази, порушень стехіометрії тощо. Про такі дефекти, як правило, свідчить асиметрія у формі кривих гойдання, а саме їх хвостів. У цьому випадку аналіз дифузної складової розсіяння дозволяє оцінити розміри та концентрацію дефектів [27].

Водночас, мало інтерес дослідити саме вплив дислокаційної системи на збільшення значень W та прояву X-променевих ефектів розсіяння у формі КОП та КГ на основі теоретичних представлень, розвинутих у роботах [28, 29].

Зазначимо, що для CdTe орієнтаційні характеристики векторів Бюргерса дислокацій у відповідних площинах $\{111\}$ описують тетраедром Томсона [30–32]. На рисунку 4 відображена ймовірна дисоціація повних 60° -дислокацій CD та DB на частинні з векторами Бюргерса: крайові дислокації Франка — $\mathbf{b}_F = [111]a/3$, гвинтові дислокації Шоклі — $\mathbf{b}_S = [112]a/6$, вершинні крайові дислокації — $\mathbf{b}_B = [\bar{1}01]a/6$ та дислокаційні бар'єри Ломера–Котрела, які складаються з однієї вершинної та двох дислокацій Шоклі. Зокрема, на рис. 4, б:

$$\frac{a}{2} = [011] \rightarrow \frac{a}{6} [1\bar{1}2] + \frac{a}{6} [\bar{1}2\bar{1}], \quad (5)$$

$$\frac{a}{2} [011] + \frac{a}{2} [\bar{1}10] \rightarrow \frac{a}{6} [\bar{1}21] + \frac{a}{6} [\bar{1}2\bar{1}] + \frac{a}{6} [\bar{1}01], \quad (6)$$

$$\frac{a}{2} [011] + \frac{a}{2} [0\bar{1}1] \rightarrow \frac{a}{6} [\bar{1}12] + \frac{a}{6} [1\bar{1}2] + \frac{a}{3} [001]. \quad (7)$$

В ГЦК-структурі існує лише чотири типи дислокацій, які можуть відреагувати на межу блока. Їх можна описати використовуючи тетраедр Тамсона (рис. 4, а). Відмітимо також, що межі блоків є площинами ковзання типу $\{111\}$, $\{\bar{1}\bar{1}\bar{1}\}$, $\{\bar{1}\bar{1}1\}$, $\{1\bar{1}\bar{1}\}$. Перед тим як дислокація відреагує на межу блока, їй необхідно «просковзнути» по одній з цих площин. Коли дислокація досягає межі блока, лінія дислокації повинна бути паралельна лінії перетину площини ковзання та межі блока. На рисунку 4, б представлено розгортку тетраедра Томсона для більшої наочності дислокаційних реакцій (5)–(7). Припустимо, що дислокація ковзає по площині $\{\bar{1}\bar{1}\bar{1}\}$, тоді площина межі блока та лінія дислокації будуть паралельними, коли дислокація досягне межі.

Отож з рисунку 4 можна зробити висновок, що ця дислокація може бути однією з чотирьох можливих типів: 30° часткова дислокація Шоклі, тобто вектор Бюргерса знаходиться під кутом 30° до лінії дислокації; 90° часткова дислокація Шоклі; гвинтова дислокація з вектором Бюргерса, паралельним лінії дислокації; 60° -дислокація:

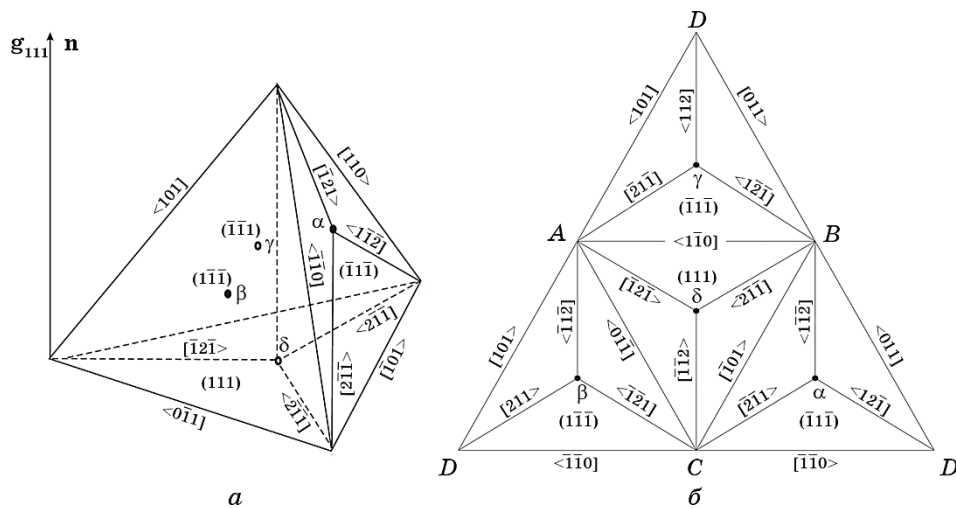


Рис. 4. Схема розміщення двох систем дислокацій: тетраедр Томсона (а), дисоціація повних дислокацій CD та DB на частинні дислокації Шоклі — $D\alpha$ і αC та вершинну BC, і CD на дислокації Франка $D\delta$ і Шоклі δC (б) [33].

Fig. 4. Schematic layout of two dislocation systems: Thomson tetrahedron (a), dissociation of complete dislocations CD and DB on partial Shockley dislocations $D\alpha$ and αC , vertex dislocation BC, and CD on Frank $D\delta$ and Shockley δC dislocations (b) [33].

$$B\alpha \rightarrow B\delta + \delta\alpha, \tag{8}$$

$$\delta\alpha \rightarrow \delta B + B\alpha, \tag{9}$$

$$D\alpha \rightarrow A\delta, \tag{10}$$

$$BD \rightarrow BC + CD. \tag{11}$$

Відомо, що вакансії можуть утворювати диск, плоскі поверхні якого є площини $\{111\}$. Якщо диск захоплюється із зміщенням плоских поверхонь у перпендикулярному до поверхні, то утворюється дислокаційна петля типу Франка, яка обмежує дефект упаковки типу випадання [23].

3. ТЕОРЕТИЧНІ СПІВВІДНОШЕННЯ

Для розрахунку КОП можуть бути використані різні підходи кінематичної (теорія Кривоглаза [34]) та динамічної теорії дифракції [35–37]. У наближенні кінематичної теорії, відбита інтенсивність від кристалу, пропорційна густині дислокацій ρ , тобто [38]:

$$I(Q_X, Q_Z) = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_0^d dz [e^{iq_x x + iq_z z} \prod_{-\infty}^{\infty} e^{iQ_{\alpha}(x,z)} - 1] \right|^2. \quad (12)$$

У рамках даної теорії [39], скориставшись методом Монте-Карло, на основі співвідношень (12) можна обчислити інтенсивність розсіяного випромінювання КОП у випадку наявності можливої дислокаційної системи у кристалах телуриду кадмію.

4. РЕЗУЛЬТАТИ МОДЕЛЮВАННЯ

Моделювання КОП (рис. 5) проводилось з використанням співвідношення (12) кінематичної теорії Кривоглаза [33], яка добре описує когерентне та дифузне розсіяння X-променів у кристалах, що містять високі концентрації дислокацій. Оскільки, густина дислокацій у кристалах доволі висока ($\sim 10^5$ – 10^6 см⁻²), то для розрахунку КОП (рис. 5) використано метод Монте-Карло з врахуванням релаксації поверхневих напружень [40–42].

Для визначення дислокаційного впливу на формування КОП вибрано модельні системи із двох наборів дислокацій: а) повних 60°-дислокацій з векторами Бюргерса $\mathbf{b}_1 = [\bar{1}\bar{1}0]a/2$ та $\mathbf{b}_2 = [011]a/2$, лінії яких знаходяться у $\{1\bar{1}\bar{1}\}$ та $\{111\}$ площинах; б) частинних дислокацій Франка $\mathbf{b}_F = [111]a/3$, лінії яких орієнтовані у напрямках $\langle 0\bar{1}1 \rangle$ та $[\bar{1}01 \rangle$ (рис. 4, б). Такі дислокації, також можуть знаходитись у малокутових межах між блоками [43].

Розрахунки проводили до збігання W експериментальних та теоретично розрахованих КОП вздовж напрямків Q_X та Q_Z для симетричних і асиметричних рефлексів (рис. 5). Визначені у процесі моделювання густини повних N_M та частинних N_F дислокацій для двох модельних систем відрізняються (табл. 1). Це може бути зумовлено вибором геометрії дислокаційних систем і, очевидно, різним впливом гвинтових та крайових компонент повних та частинних дислокацій, а також тим, що частково було враховано вплив дислокацій, які знаходяться на межах блоків.

Для першої моделі розраховані значення N_M переважають експериментальні. Напевно, у випадку симетричних дифракцій у формування КОП вносять вклад як гвинтові компоненти 60°-дислокацій (зокрема, частинні дислокації Шоклі — $\mathbf{b}_{Ш} = [112]a/6$), так і крайові компоненти (дислокації Франка), компоненти векторів Бюргерса яких паралельні вектору дифракції \mathbf{g} . Для асиметричної (331) дифракції вклад у формування КОП можуть вносити також і вершинні крайові дислокації.

Найкращу відповідність розрахованих значень N_F з експериментальними дає модельне представлення із двох наборів частинних крайових дислокацій Франка (табл. 1). Зауважимо, що такого типу дефекти

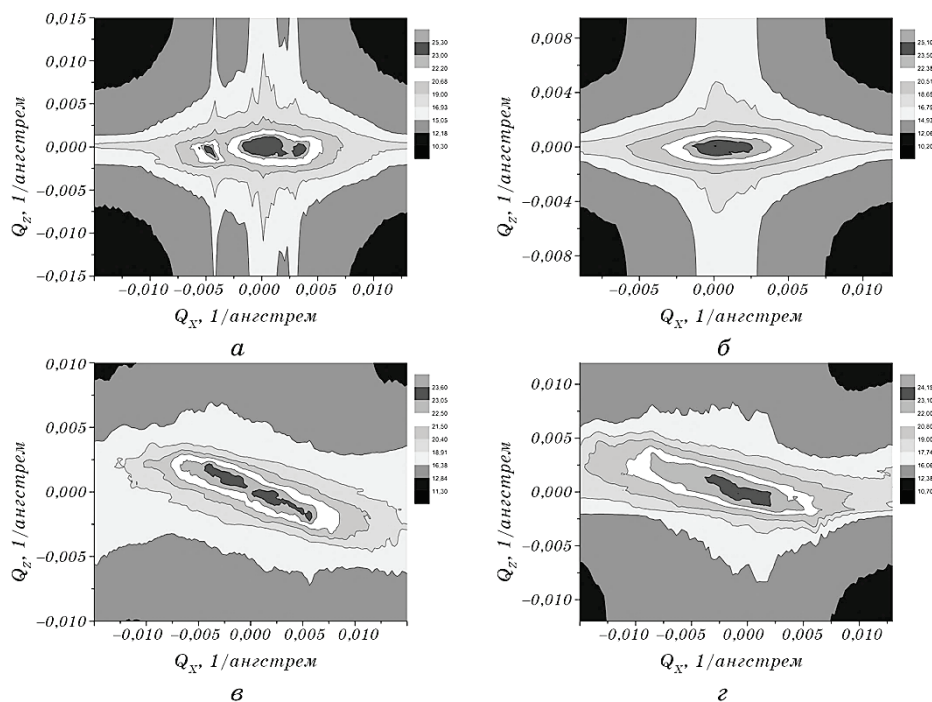


Рис. 5. Розраховані розподіли $I_h(\omega, 2\theta - \omega)$; зразки № 3 (а, в) та № 4 (б, г), відбивання (333) (а, б) та (331) (в, г), $\text{CuK}\alpha_1$ -випромінення.

Fig. 5. Simulated $I_h(\omega, 2\theta - \omega)$; samples No. 3 (a, в) and No. 4 (б, г), reflexes (333) (a, б) and (331) (в, г), radiation $\text{CuK}\alpha_1$.

є характерними для кристалічних сполук телуриду кадмію [44].

Водночас, для більш повного збігу експериментальних та теоретичних КОП, а саме областей дифузного розсіювання, потрібно врахувати не тільки можливі динамічні процеси розсіювання Х-променів, а також більш складну, характерну для телуриду кадмію дефектну структуру.

5. ВИСНОВКИ

1. Запропоновано методику розрахунку дислокаційної структури кристалічних сполук з проміжними значеннями густин дислокацій ($\sim 10^5 - 10^6 \text{ см}^{-2}$). Експериментально та теоретично досліджена можлива дислокаційна структура кристалічних сполук та проаналізовано її вплив на формування КОП.

2. Наведено оцінки густин дислокацій N_G та N_L (табл. 1), одержані із аналізу значень W експериментальних кривих гойдання, а також N_S (рис. 3) з побудов Вільямсона–Холла за кутом нахилу мозаїчних

блоків α . Для найбільш досконалого кристалу густина дислокацій знаходиться в межах 10^5 см^{-2} . Для інших характерна складна поліблочна структура та значні густини дислокацій $\sim 10^6 \text{ см}^{-2}$.

3. На основі кінематичної теорії Кривоглаза та використанні методу Монте-Карло досліджено модельні системи із двох наборів дислокацій: 60° -дислокацій з векторами Бюргерса $\mathbf{b}_1 = [\bar{1}\bar{1}0]a/2$ та $\mathbf{b}_2 = [011]a/2$, лінії яких знаходяться у $\{1\bar{1}\bar{1}\}$ та $\{\bar{1}11\}$ площинах; частинних дислокацій Франка $\mathbf{b}_\phi = [111]a/3$, лінії яких орієнтовані у напрямках $\langle 0\bar{1}1 \rangle$ та $[\bar{1}01]$. Визначено найбільш оптимальну дислокаційну модель, у якій спостерігається кореляція між експериментальними та теоретично розрахованими КОП.

4. Визначені у процесі моделювання густини дислокацій відрізняються. Це зумовлено вибором геометрії дислокаційних систем і, очевидно, різним впливом частинних гвинтових і крайових компонент дислокацій. Найкращу відповідність розрахованих густин дислокацій з експериментальними дає модельне представлення із двох наборів частинних крайових дислокацій Франка.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. T. Hondoh, *Crystals*, **9**, No. 8: 386 (2019).
2. J. Weertman, *Phys. Rev.*, **107**, No. 5: 1259 (1957).
3. X. Wu, *Solar Energy*, **77**, No. 6: 803 (2004).
4. Y. Eisen, A. Shor, and I. Mardor, *Nucl. Instrum. Methods A*, **428**, No. 1: 158 (1999).
5. О. А. Матвеев, А. И. Терентьев, *Физика и техника полупроводников*, **32**, № 2: 159 (1998).
6. A. Orlová and B. Sieber, *Acta Metal.*, **32**, No. 7: 1045 (1984).
7. M. Azoulay, A. Raizman, G. Gafni, and M. Roth, *J. Crystal Growth*, **101**, Iss. 1–4: 256 (1990).
8. M. D. Borcha, M. S. Solodkyi, S. V. Balovsyak, V. M. Tkach, I. I. Hutsuliak, A. R. Kuzmin, O. O. Tkach, V. P. Kladko, O. Yo. Gudymenko, O. I. Liubchenko, and Z. Świątek, *Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics*, **22**, No. 4: 381 (2019).
9. I. M. Fodchuk, V. V. Dovganiuk, I. I. Gutsuliak, I. P. Yaremiy, A. Y. Bonchuk, G. V. Savytsky, I. M. Syvorotka, and O. G. Skakunova, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **35**, No. 9: 1209 (2013).
10. I. M. Fodchuk, I. I. Gutsuliak, R. A. Zaplitnyy, I. P. Yaremiy, A. Y. Bonchuk, and I. I. Syvorotka, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **35**, No. 7: 933 (2013).
11. K. Lischka, E. J. Fantner, T. W. Ryan, and H. Sitter, *Appl. Phys. Lett.*, **55**: 1309 (1989).
12. M. Polat, O. Ari, O. Öztürk, and Yu. Selamet, *Mater. Res. Express.*, **4**: 035904 (2017).
13. D. K. Bowen and B. K. Tanner, *High Resolution X-Ray Diffractometry and Topography* (CRC Press: 1998).
14. V. V. Brus, O. L. Maslyanchuk, M. M. Solovan, P. D. Maryanchuk, I. Fodchuk, V. A. Gnatyuk, N. D. Vakhnyak, S. V. Melnychuk, and T. Aoki, *Scientific*

- Reports*, **9**, Article number: 1065 (2019).
15. O. Maslyanchuk, M. Solovan, V. Brus, P. Maryanchuk, E. Maistruk, I. Fodchuk, and V. Gnatyuk, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A*, **988**: 164920 (2021).
 16. O. Maslyanchuk, I. Fodchuk, T. Mykytyuk, A. Kuzmin, I. Hutsuliak, and T. Aoki, *IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference*: 159071 (2019).
 17. O. L. Maslyanchuk, M. M. Solovan, V. V. Brus, V. V. Kulchynsky, P. D. Maryanchuk, I. M. Fodchuk, V. A. Gnatyuk, T. Aoki, C. Potiriadis, and Y. Kaissas, *IEEE Transactions on Nuclear Science*, **64**: 1168 (2017).
 18. C. Schumacher, A. S. Bader, T. Schallenberg, N. Schwarz, W. Faschinger, and L. W. Molenkamp, *J. Appl. Phys.*, **95**, No. 10: 5494 (2004).
 19. H. Shiraki, M. Funaki, Y. Ando, A. Tachibana, S. Kominami, and R. Ohno, *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, **56**, No. 4: 1717 (2009).
 20. H. Shiraki, M. Funaki, Y. Ando, S. Kominami, K. Amemiya, and R. Ohno, *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, **57**, No. 1: 395 (2010).
 21. P. A. Pramod, Yashodhan Hatwalne, and N. V. Madhusudana, *Liquid Crystals*, **28**, No. 4: 765 (2001).
 22. X. Chut, and B. K. Tanner, *Semicond. Sci. Tech.*, **2**, No. 12: 765 (1987).
 23. P. B. Hirt, *Mozaicheskaya Struktura* [Mosaic structure] (Moscow: Mir: 1960) (in Russian).
 24. E. Schafler, M. Zehetbauer, and T. Ungar, *Materials Science and Engineering A*, **319–321**: 220 (2001).
 25. M. G. Hajiabadi, M. Zamanian, and D. Souri, *Ceramics Int.*, **45**, No. 11: 14084 (2019).
 26. S. Takaki, T. Masumura, and T. Tsuchiyama, *ISIJ Int.*, **59**, No. 3: 567 (2019).
 27. I. Booker, L. Rahimzadeh Khoshroo, J. F. Woitok, V. Kaganer, C. Mauder, H. Behmenburg, J. Gruis, M. Heuken, H. Kalisch, and R. H. Jansen, *phys. status solidi (c)*, **7**, Nos. 7–8: 1787 (2010).
 28. A. J. McGibbon, S. J. Pennycook, and J. E. Angelo, *Science*, **269**, No. 5223: 519 (1995).
 29. F. Székely, I. Groma, and J. Lendvai, *Materials Science and Engineering A*, **309–310**: 352 (2001).
 30. H.-J. Lee and B. D. Wirth, *Phil. Mag.*, **89**, No. 9: 821 (2009).
 31. B. М. Щербак, И. М. Фодчук, В. М. Тихонова, *Кристаллография*, **36**, № 6: 1521 (1991).
 32. T. Paulauskas, C. Buurma, E. Colegrove, B. Stafford, Z. Guo, M. K. Y. Chan, C. Sun, M. J. Kim, S. Sivananthan, and R. F. Klie, *Acta Cryst. A*, **70**, No. 6: 524 (2014).
 33. Y. T. Zhu, X. L. Wu, X. Z. Liao, J. Narayan, L. J. Kecskés, and S. N. Mathaudhu, *Acta Materialia*, **59**, Iss. 2: 812 (1963).
 34. M. A. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Springer: Berlin: 1996).
 35. V. Holy, U. Pietsch, and T. Baumbach, *High-Resolution X-Ray Scattering from Thin Films and Multilayers* (Springer: Berlin: 1996).
 36. S. I. Olikhovskii, V. B. Molodkin, E. N. Kislovskii, E. G. Len, and E. V. Pervak, *phys. status solidi (b)*, **231**, No. 1: 159 (2002).
 37. S. Takagi, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **26**, No. 5: 1239 (1969).
 38. V. M. Kaganer, R. Kohler, M. Schmidbauer, and R. Opitz, *Phys. Rev. B*, **55**,

- No. 3: 17563 (1997).
39. V. M. Kaganer and K. K. Sabelfeld, *Phys. Rev. B*, **80**: 184105 (2009).
 40. I. Fodchuk, A. Kuzmin, I. Hutsuliak, M. Solodkyi, V. Dovganyuk, O. Maslyanchuk, Yu. Roman, R. Zaplitnyy, O. Gudymenko, V. Kladko, V. Molodkin, and V. Lizunov, *Proceedings, Fourteenth Int. Conf. on Correlation Optics (Sept. 16-19, 2019, Chernivtsi, Ukraine)* (2020), **11369**: 113691H.
 41. I. Fodchuk, I. Hutsuliak, V. Dovganyuk, O. Sumariuk, O. Gudymenko, V. Kladko, I. Syvorotka, A. Kotsyubynskiy, M. Barchuk, *Proceedings, Fourteenth Int. Conf. on Correlation Optics (Sept. 16-19, 2019, Chernivtsi, Ukraine)* (2020), **11369**: 113691G.
 42. I. Fodchuk, I. Gutsuliak, V. Dovganiuk, A. Kotsyubynskiy, U. Pietsch, N. Pashniak, O. Bonchuk, I. Syvorotka, and P. Lytvyn, *Appl. Opt.*, **55**: B144-B-149 (2016).
 43. M. Inoue, I. Teramoto, and S. Takayanagi, *J. Appl. Phys.*, **34**, No. 2: 404 (1963).
 44. C. Li, J. Poplawsky, Ye. Wu, A. R. Lupini, A. Mouti, D. N. Leonard, N. Paudel, K. Jones, W. Yin, M. Al-Jassim, Ya. Yan, and S. J. Pennycook, *Ultramicroscopy*, **134**: 113 (2013).

REFERENCES

1. T. Hondoh, *Crystals*, **9**, No. 8: 386 (2019).
2. J. Weertman, *Phys. Rev.*, **107**, No. 5: 1259 (1957).
3. X. Wu, *Solar Energy*, **77**, No. 6: 803 (2004).
4. Y. Eisen, A. Shor, and I. Mardor, *Nucl. Instrum. Methods A*, **428**, No. 1: 158 (1999).
5. O. A. Matveev and A. I. Terent'ev, *Fizika Tekhnika Poluprovodnikov*, **32**, No. 2: 159 (1998) (in Russian).
6. A. Orlová and B. Sieber, *Acta Metal.*, **32**, No. 7: 1045 (1984).
7. M. Azoulay, A. Raizman, G. Gafni, and M. Roth, *J. Crystal Growth*, **101**, Iss. 1-4: 256 (1990).
8. M. D. Borchha, M. S. Solodkyi, S. V. Balovsyak, V. M. Tkach, I. I. Hutsuliak, A. R. Kuzmin, O. O. Tkach, V. P. Kladko, O. Yo. Gudymenko, O. I. Liubchenko, and Z. Świątek, *Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics*, **22**, No. 4: 381 (2019).
9. I. M. Fodchuk, V. V. Dovganiuk, I. I. Gutsuliak, I. P. Yaremiy, A. Y. Bonchuk, G. V. Savytsky, I. M. Syvorotka, and O. G. Skakunova, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **35**, No. 9: 1209 (2013).
10. I. M. Fodchuk, I. I. Gutsuliak, R. A. Zaplitnyy, I. P. Yaremiy, A. Y. Bonchuk, and I. I. Syvorotka, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **35**, No. 7: 933 (2013).
11. K. Lischka, E. J. Fantner, T. W. Ryan, and H. Sitter, *Appl. Phys. Lett.*, **55**: 1309 (1989).
12. M. Polat, O. Ari, O. Öztürk, and Yu. Selamet, *Mater. Res. Express.*, **4**: 035904 (2017).
13. D. K. Bowen and B. K. Tanner, *High Resolution X-Ray Diffractometry and Topography* (CRC Press: 1998).
14. V. V. Brus, O. L. Maslyanchuk, M. M. Solovan, P. D. Maryanchuk, I. Fodchuk, V. A. Gnatyuk, N. D. Vakhnyak, S. V. Melnychuk, and T. Aoki, *Scientific Reports*, **9**, Article number: 1065 (2019).

15. O. Maslyanchuk, M. Solovan, V. Brus, P. Maryanchuk, E. Maistruk, I. Fodchuk, and V. Gnatyuk, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A*, **988**: 164920 (2021).
16. O. Maslyanchuk, I. Fodehuk, T. Mykytyuk, A. Kuzmin, I. Hutsuliak, and T. Aoki, *IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference*: 159071 (2019).
17. O. L. Maslyanchuk, M. M. Solovan, V. V. Brus, V. V. Kulchynsky, P. D. Maryanchuk, I. M. Fodchuk, V. A. Gnatyuk, T. Aoki, C. Potiriadis, and Y. Kaissas, *IEEE Transactions on Nuclear Science*, **64**: 1168 (2017).
18. C. Schumacher, A. S. Bader, T. Schallenberg, N. Schwarz, W. Faschinger, and L. W. Molenkamp, *J. Appl. Phys.*, **95**, No. 10: 5494 (2004).
19. H. Shiraki, M. Funaki, Y. Ando, A. Tachibana, S. Kominami, and R. Ohno, *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, **56**, No. 4: 1717 (2009).
20. H. Shiraki, M. Funaki, Y. Ando, S. Kominami, K. Amemiya, and R. Ohno, *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, **57**, No. 1: 395 (2010).
21. P. A. Pramod, Yashodhan Hatwalne, and N. V. Madhusudana, *Liquid Crystals*, **28**, No. 4: 765 (2001).
22. X. Chut, and B. K. Tanner, *Semicond. Sci. Tech.*, **2**, No. 12: 765 (1987).
23. P. B. Hirt, *Mozaicheskaya Struktura* [Mosaic structure] (Moscow: Mir: 1960) (in Russian).
24. E. Schafler, M. Zehetbauer, and T. Ungar, *Materials Science and Engineering A*, **319–321**: 220 (2001).
25. M. G. Hajiabadi, M. Zamanian, and D. Souri, *Ceramics Int.*, **45**, No. 11: 14084 (2019).
26. S. Takaki, T. Masumura, and T. Tsuchiyama, *ISIJ Int.*, **59**, No. 3: 567 (2019).
27. I. Booker, L. Rahimzadeh Khoshroo, J. F. Woitok, V. Kaganer, C. Mauder, H. Behmenburg, J. Gruis, M. Heuken, H. Kalisch, and R. H. Jansen, *phys. status solidi (c)*, **7**, Nos. 7–8: 1787 (2010).
28. A. J. McGibbon, S. J. Pennycook, and J. E. Angelo, *Science*, **269**, No. 5223: 519 (1995).
29. F. Székely, I. Groma, and J. Lendvai, *Materials Science and Engineering A*, **309–310**: 352 (2001).
30. H.-J. Lee and B. D. Wirth, *Phil. Mag.*, **89**, No. 9: 821 (2009).
31. V. M. Shcherbak, I. M. Fodchuk, and V. M. Tikhonova, *Kristallografiya*, **36**, No. 6: 1521 (1991) (in Russian).
32. T. Paulauskas, C. Buurma, E. Colegrove, B. Stafford, Z. Guo, M. K. Y. Chan, C. Sun, M. J. Kim, S. Sivananthan, and R. F. Klie, *Acta Cryst. A*, **70**, No. 6: 524 (2014).
33. Y. T. Zhu, X. L. Wu, X. Z. Liao, J. Narayan, L. J. Kecskés, and S. N. Mathaudhu, *Acta Materialia*, **59**, Iss. 2: 812 (1963).
34. M. A. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Springer: Berlin: 1996).
35. V. Holy, U. Pietsch, and T. Baumbach, *High-Resolution X-Ray Scattering from Thin Films and Multilayers* (Springer: Berlin: 1996).
36. S. I. Olikhovskii, V. B. Molodkin, E. N. Kislovskii, E. G. Len, and E. V. Pervak, *phys. status solidi (b)*, **231**, No. 1: 159 (2002).
37. S. Takagi, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **26**, No. 5: 1239 (1969).
38. V. M. Kaganer, R. Kohler, M. Schmidbauer, and R. Opitz, *Phys. Rev. B*, **55**, No. 3: 17563 (1997).

39. V. M. Kaganer and K. K. Sabelfeld, *Phys. Rev. B*, **80**: 184105 (2009).
40. I. Fodchuk, A. Kuzmin, I. Hutsuliak, M. Solodkyi, V. Dovganyuk, O. Maslyanchuk, Yu. Roman, R. Zaplitnyy, O. Gudymenko, V. Kladko, V. Molodkin, and V. Lizunov, *Proceedings, Fourteenth Int. Conf. on Correlation Optics (Sept. 16-19, 2019, Chernivtsi, Ukraine)* (2020), **11369**: 113691H.
41. I. Fodchuk, I. Hutsuliak, V. Dovganyuk, O. Sumariuk, O. Gudymenko, V. Kladko, I. Syvorotka, A. Kotsyubynskiy, M. Barchuk, *Proceedings, Fourteenth Int. Conf. on Correlation Optics (Sept. 16-19, 2019, Chernivtsi, Ukraine)* (2020), **11369**: 113691G.
42. I. Fodchuk, I. Gutsuliak, V. Dovganiuk, A. Kotsyubynskiy, U. Pietsch, N. Pashniak, O. Bonchych, I. Syvorotka, and P. Lytvyn, *Appl. Opt.*, **55**: B144-B-149 (2016).
43. M. Inoue, I. Teramoto, and S. Takayanagi, *J. Appl. Phys.*, **34**, No. 2: 404 (1963).
44. C. Li, J. Poplawsky, Ye. Wu, A. R. Lupini, A. Mouti, D. N. Leonard, N. Paudel, K. Jones, W. Yin, M. Al-Jassim, Ya. Yan, and S. J. Pennycook, *Ultramicroscopy*, **134**: 113 (2013).