показывает, что $\frac{b_2}{b_3} \simeq 1$, поэтому полная площадь поперечного сечения пор не меняется и при переходе от одного режима коалесценции к другому, а следовательно, не меняется и величина площади поверхности сцепления зерен. Это также согласуется с приведенной в [1] экспериментальной зависимостью полной площади сечения пор от времени, из которой видно, что эта величина изменяется лишь на начальной стадии отжига, когда происходит процесс порообразования.

Обобщение. Рассматривая поры, расположенные на межзеренной границе, следует принимать во внимание, что их форма может быть отлична от сферической. Так, баланс поверхностных натяжений на линии выхода межзеренной границы на поверхность поры дает величину краевого угла $\theta = 2 \arccos \frac{\gamma}{2\sigma}$, где γ — энергия единицы площади межзеренной границы. Возникает вопрос об определении стационарного потока вакансий на пору такой формы. Однако, если предположить, что за счет механизма поверхностной диффузии кривизна во всех точках, кроме выхода, одинакова, то форма поры будет изменяться подобным образом. В этом случае можно ввести характерный размер $R = \left[\frac{3}{4\pi} V\right]^{1/3}$, где V — объем поры, и, как показано в работе [5], учет несферичности приведет в случае малых пересыщений к появлению в (1) перед коэффициентом диффузии множителя, зависящего от характерного размера.

1. *Farrel K., Houston J. T., Schaffhauser A. C.* The growth of grain boundary gas bubbles in chemically vapos deposited tungsten. — In: Proc. Conf. Chemical vapour deposition of refractory metals, alloys and compounds (USA, Tennessee, Gatlinburg, Sept. 1967). New York; London, 1967, p. 363—389.
2. *Слезов В. В.* Теория газовой пористости, образующейся при диффузионном распаде многокомпонентных систем. — Металлофизика, 1981, 3, № 1, с. 21—28.
3. *Саралидзе З. К., Слезов В. В.* К теории коалесценции пор с газом. — ФТТ, 1965, 7, вып. 6, с. 1606—1611.
4. *Слезов В. В.* Коалесценция пересыщенного раствора в случае диффузии по границам блоков или дислокационным линиям. — ФТТ, 1967, 9, вып. 4, с. 1187—1191.
5. *Лифшиц И. М., Слезов В. В.* О кинетике диффузионного распада пересыщенных твердых растворов. — ЖЭТФ, 35, вып. 2/8, с. 479—492.

Харьков. физ.-техн. ин-т АН УССР
Вологод. политехн. ин-т

Получено 20.01.82
(окончательный вариант — 22.05.82)

В. Б. Молодкин, Л. И. Даценко, В. И. Хрупа, М. Е. Осиновский, Е. Н. Кисловский, В. П. Кладько, Н. В. Осадчая

УДК 539.26:548.4

К ВОПРОСУ О РЕНТГЕНОДИФРАКТОМЕТРИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ ХАОТИЧЕСКИ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ДИСЛОКАЦИЙ В МОНОКРИСТАЛЛАХ

Проанализирована проблема дифракции рентгеновских лучей (РЛ) в монокристаллах, содержащих малые плотности дислокаций (меньше 10^7 см$^{-2}$). Показано, что в таких монокристаллах возможно динамическое распространение РЛ. Показано также, что в случае небольших плотностей дислокаций перенормированный статический фактор, характеризующий влияние искажений на дифракцию РЛ, не приводит к интерференционному погашению когерентно рассеянной волны. Получено выражение для интегральной интенсивности дифрагированных лучей в геометрии Лауэ. Предложен способ определения плотности дислокаций по экспериментальным значениям интегральных интенсивностей.

Большинство прямых методов определения плотности хаотически распределенных дислокаций $\rho_д$ в монокристаллических материалах (рентгеновская топография, избирательное травление и др.) обладает рядом существенных недостатков (длительность экспозиций, необходимость подбора травителей для каждого кристалла и т. д.). Поэтому представляет интерес разработка экспрессных, достаточно универсальных методов определения $\rho_д$, в частности основанных на дифракции рентгеновских лучей (РЛ). В случае кинематически рассеивающих кристаллов, когда $\rho_д$ велико или размер областей когерентного рассеяния (зерен или блоков мозаики) меньше экстинкционной длины Λ, существуют способы определения $\rho_д$ по профилям дифференциальной интенсивности дифрагированных РЛ (см., например, [1]). Определение же $\rho_д$ по интегральной интенсивности I_R в условиях кинематического рассеяния невозможно, поскольку в этом случае величина I_R, равная с учетом поглощения

$$I_{кин} = I_0 q t e^{-\mu t}, \tag{1}$$

вообще не зависит от характеристик дефектов (здесь I_0 — интенсивность падающего на кристалл излучения, q — кинематическая рассеивающая способность на единицу длины, t — длина пути дифрагированных РЛ в кристалле, μ — нормальный коэффициент поглощения). Однако в случае монокристаллов, содержащих малые плотности дислокаций, имеет место динамическое рассеяние [2—4], поэтому кинематический подход неприменим, и интегральная интенсивность в этом случае, как будет показано ниже, уже оказывается зависящей от искажений, а ее измерение может быть положено в основу определения $\rho_д$. В ряде работ были сделаны попытки распространить динамическую теорию рассеяния РЛ на кристаллы с дислокациями. Предполагалось [5], что вокруг каждой дислокации имеется сильно искаженная область кристаллической решетки, рассеяние от которой имеет кинематический характер, а остальная часть кристалла рассеивает динамически. Аналогичные представления были существенно развиты в работе [6] и в др.

Этот подход позволил успешно рассчитать профиль изображения (контраст) отдельных дислокаций и других дефектов. Однако интегральные характеристики рассеяния, несущие информацию о хаотически или макроскопически однородно распределенных дислокациях в среднем, в указанных работах не рассматривались. В [7] на основе представлений об образовании блочности в кристаллах, связанной с дислокациями, вычислен интерференционный коэффициент поглощения интегральной интенсивности аномально проходящих рентгеновских лучей в зависимости от $\rho_д$. Но эти результаты также не могут быть использованы в случае хаотически распределенных дислокаций. Исходя из предположения о существовании кинематического и динамического каналов рассеяния в кристаллах с хаотически распределенными дефектами, авторы работы [8] построили приближенную феноменологическую теорию и рассчитали I_R в условиях лауэ-дифракции. Однако практически в этой работе авторы ограничились рассмотрением случая хаотически распределенных дислокационных петель.

В недавних работах [9, 10] предложена модель, позволяющая рассчитать I_R в случае дифракции Брэгга для кристаллов с небольшими плотностями хаотически распределенных дислокаций. Авторы этих работ воспользовались указанной выше идеей о кинематически рассеивающей трубке радиусом $r_д \sim \Lambda$, окружающей каждую дислокацию. Величина I_R была принята равной сумме динамического и кинематического вкладов, которые считались пропорциональными объемам соответствующих областей:

$$I_R = \varepsilon I(\chi) + (1-\varepsilon) I_{кин}, \qquad \varepsilon = \exp(-\mathrm{const}\cdot\pi r_д^2 \rho_д), \tag{2}$$

где $I(\chi)$ — интегральная интенсивность динамического рассеяния, рассчитанная по формулам для идеального кристалла, имеющего фурьекомпоненту восприимчивости χ, ε — объемная доля динамически рассеивающей области образца. Формула (2) позволила авторам получить правильные по порядку величины значения $\rho_д$ в интервале 10^3—$\rho_{д0}$ см$^{-2}$, где $\rho_{д0}$ — некоторое критическое значение плотности дислокаций, выше которого динамические эффекты рассеяния РЛ пропадают ($\rho_{д0} \sim 10^5$—10^7 см$^{-2}$). Однако этот метод основан на дифракции РЛ в геометрии Брэгга и поэтому применим только для контроля значений $\rho_д$ в поверхностных слоях кристаллов толщиной $\sim\Lambda$.

Кроме того, описанная модель имеет ряд недостатков, которые, в частности, не позволяют использовать ее непосредственно в случае Лауэ. Она опирается исключительно на модельные предположения и не обоснована сколько-нибудь строгой теорией рассеяния РЛ в искаженных кристаллах. В частности, допущение о том, что интегральная интенсивность динамического рассеяния пропорциональна объему динамически рассеивающей области, не может быть использовано при дифракции Лауэ в кристаллах с $t > \Lambda$. В общем случае известно [11—15], что динамическое волновое поле формируется всем кристаллом, и наличие дефектов приводит к замене χ на χ^* ($\chi^* = \chi e^{-L}$, где e^{-L} — статический фактор), а не к введению множителя ε. Важное значение также приобретает в этом случае не учитываемая в [8—10] возможность динамического перерассеяния диффузного фона. Из последних замечаний вытекает, что в общем случае I_R следует разбивать на два слагаемые иначе — не на динамическую и кинематическую составляющие, как в (2), а на когерентную (брэгговскую, $I_Б$) и некогерентную (диффузную, $I_Д$) составляющие, причем на основании приведенных выше общих соображений можно сразу написать с учетом результатов работ [11—15] правильную формулу для I_R в случае кристалла с хаотически распределенными дефектами в следующем виде:

$$I_R = I_Б + I_Д = I(\chi e^{-L}) + (1 - e^{-2L}) I_{кин} A, \tag{3}$$

где множитель A учитывает динамические эффекты образования и распространения диффузного фона, а коэффициент поглощения должен быть соответствующим образом модифицирован с учетом наличия дефектов. Подчеркнем, что в отличие от чисто кинематического случая, когда аналогичное разбиение имеет вид формального тождества

$$I_R = I_Б + I_Д = e^{-2L} I_{кин} + (1 - e^{-2L}) I_{кин} \equiv I_{кин} \tag{4}$$

и фактор e^{-2L}, характеризующий дефекты, из суммарной интенсивности выпадает, в случае динамически рассеивающих кристаллов убыль $I_Б$ за счет дефектов не компенсируется соответствующим увеличением $I_Д$, и в результате I_R начинает зависеть от характеристик дефектов через посредство L и эффективного коэффициента поглощения μ_d, связанного с рассеянием на искажениях. Именно это обстоятельство, как указывалось, и позволяет использовать измерения I_R для контроля дефектов в динамически рассеивающих кристаллах.

В настоящей работе излагается теория динамического рассеяния РЛ в кристаллах с хаотически распределенными дислокациями (корреляция в расположении дислокаций не учитывается). В результате качественного анализа показано, что при небольших $\rho_д$ выражение для статического фактора e^{-L}, фигурирующее в кинематической теории, необходимо модифицировать, так как для дислокаций $L \to \infty$, и, следовательно, $\chi^* \to 0$, а тогда все динамические эффекты формально должны были бы исчезнуть также и в случае малых плотностей дислокаций, что противоречит экспериментальным данным. Поэтому здесь получено выражение для перенормированной величины L^* с точностью до коэффициента, являющегося свободным параметром (более строгое рассмотрение этого вопроса предполагается в отдельной работе). Эта величина L^* при $\rho_д < \rho_{д0}$ оказывается $\lesssim 1$, что позволяет для расчета I_R использовать разработанные ранее методы [11—15]. Затем на основе полученного выражения для I_R предлагается экспрессный метод определения усредненных по объему значений плотности хаотически распределенных дислокаций в реальных монокристаллах путем измерения I_R в геометрии Лауэ. Использование лауэ-дифракции позволяет получить информацию о степени структурного совершенства всего объема образца [16, 17]. При этом необходимо иметь в виду, что величины I_R в условиях аномального прохождения РЛ ($\mu t>5$) резко убывают для значений $\rho_д>10^4$ см$^{-2}$ [3]. Поэтому определение плотности дислокаций из величин I_R в более широком интервале изменения $\rho_д$ целесообразно проводить в условиях слабого поглощения ($\mu t\leqslant 1$), когда структурные дефекты приводят к увеличению интенсивностей рассеяния РЛ [17, 18].

Приступая к теоретическому рассмотрению проблемы, обсудим причину отсутствия когерентной дифрагированной рентгеновской волны в дислокационном кристалле в условиях кинематического рассеяния. Как известно из кинематической теории ([1], § 14),

$$L \cong \sum_{\delta t} c_\delta (1-\cos \varphi_{\delta ts}), \quad \varphi_{\delta ts}=\mathbf{g}\mathbf{u}_{\delta ts}, \tag{5}$$

где индекс δ нумерует различные системы дислокационных линий, индекс t пробегает возможные положения дислокаций данной системы δ, c_δ — атомная концентрация дислокаций системы δ в плоскости, перпендикулярной к линиям этих дислокаций, $\mathbf{g}$ — вектор дифракции, $\mathbf{u}_{\delta ts}$ — смещение s-го узла решетки за счет дислокации системы δ, находящейся в положении t, $\varphi_{\delta ts}$ — соответствующий сдвиг фазы рентгеновской волны в направлении вектора дифракции. Например, в случае краевых дислокаций смещения $\mathbf{u}_{\delta ts}$ неограниченно растут при удалении от дислокации, поэтому осциллирующий косинус в (5) в среднем дает 0, и мы получаем следующую оценку для L:

$$L\sim \sum_{\delta t} c_\delta = \sum_t c = N_д, \qquad \left(c=\sum_\delta c_\delta\right), \tag{6}$$

где $N_д$ — полное число дислокаций в кристалле. Отсюда вытекает, что в реальном кристалле ($N_д\gg 1$) действительно $L\gg 1$ и $\chi^*\to 0$. То же самое можно объяснить иначе. Запишем полный сдвиг фазы волны, рассеянной s-м узлом решетки:

$$\varphi_s = \sum_{\delta t} c_{\delta t}\varphi_{\delta ts}, \quad (\overline{c_{\delta t}}=c_\delta), \tag{7}$$

где $c_{\delta t}=1$ или 0 в зависимости от того, находится или нет дислокация системы δ в положении t (черта означает усреднение по хаотическому распределению дефектов). Усредняя квадрат этой величины, получим:

$$K_\varphi \equiv \overline{\varphi_s^2} = \sum_{\delta t} c_\delta \varphi^2_{\delta ts} \sim \varkappa N_д \gg 1, \tag{8}$$

где $\varkappa\sim 1$ для винтовых и $\varkappa\sim\ln(l/a)$ для краевых дислокаций (l — характерный размер кристалла, a — параметр решетки). Таким образом, фазы волн, рассеянных смещенными атомами в дислокационном кристалле, очень сильно флуктуируют, в силу чего и происходит полное интерференционное погашение кинематически рассеянной когерентной волны. Еще один наглядный способ объяснения состоит в рассмотрении среднеквадратичной дисторсии, определяющей средний квадрат угла ψ изгиба атомных плоскостей в искаженном кристалле:

$$\psi^2\sim\overline{[\nabla(\varphi_s/g)]^2} = \sum_{\delta t} c_\delta [\nabla(\varphi_{\delta ts}/g)]^2 \sim \sum_{\delta t} c_\delta (b_\delta/\rho_{\delta ts})^2 \sim c\ln(l/a), \tag{9}$$

где b_δ — вектор Бюргерса дислокаций системы δ, $\rho_{\delta ts}$ — расстояние от s-го узла решетки до линии дислокации системы δ, находящейся в положении t. Поскольку кинематически рассеянная когерентная волна формируется всем кристаллом, то ее угловая ширина равна $\psi_{кин}\sim\lambda/l$

(λ — длина волны РЛ) и для ее образования должно выполняться условие $\psi<\psi_{кин}$. Однако из (9) вытекает неравенство:

$$(\psi/\psi_{кин})^2 \sim N_д (a/\lambda)^2 \ln (l/a) \gg 1, \qquad (10)$$

которое показывает, что в достаточно толстых или искаженных дислокационных кристаллах дисторсии (изгибы атомных плоскостей) настолько велики, что это приводит к полному замыванию брэгговского отражения. Итак, все три способа рассмотрения приводят к одинаковому выводу, что наличие дислокаций в кристалле полностью снимает кинематическое когерентное рассеяние. При этом следует подчеркнуть, что это обусловлено вкладом дислокаций, далеких от рассматриваемой точки кристалла [1].

В условиях динамического рассеяния, как известно (см., например, [6, 8, 11, 12]), когерентная волна формируется на расстояниях $\sim\Lambda$ и вследствие этого имеет конечную естественную угловую ширину $\psi_{дин}\sim\lambda/\Lambda$. Поэтому любые дисторсии атомных плоскостей, не выводящие отраженный от них луч за пределы интервала углов $\psi_{дин}$, не будут нарушать динамического характера рассеяния и не приведут к исчезновению когерентной дифрагированной волны. Таким образом, если размеры кристалла $l\gg\Lambda$, то для образования динамически рассеянной когерентной волны необходимо выполнение более слабого по сравнению с кинематическим случаем условия $\psi<\psi_{дин}$. При этом необходимо отсутствие достаточно сильных относительных изменений на расстояниях $\sim\Lambda$ дисторсий атомных плоскостей:

$$K \equiv \overline{|\psi_s-\psi_{s'}|^2}/\psi_{дин}^2 \sim \Lambda^2 \overline{|\nabla\varphi_s-\nabla\varphi_{s'}|^2} < 1, \quad (\psi_s\sim\nabla\varphi_s/g,\ |\mathbf{r}_s-\mathbf{r}_{s'}|\sim\Lambda). \qquad (11)$$

Выполним в левой части этого неравенства усреднение и разделим вклады K' и K'' соответственно близких (r_{ts}, $r_{ts'}<\Lambda$) и далеких (r_{ts}, $r_{ts'}>\Lambda$) дислокаций:

$$K\sim\Lambda^2 {\sum_{\delta t}}' c_\delta |\nabla\varphi_{\delta ts}-\nabla\varphi_{\delta ts'}|^2+\Lambda^2 {\sum_{\delta t}}'' c_\delta |\nabla\varphi_{\delta ts}-\nabla\varphi_{\delta ts'}|^2 \equiv K'+K''.$$

Эти вклады оцениваются следующим образом:

$$K'\sim\Lambda^2 {\sum_{\delta t}}' c_\delta |\nabla\varphi_{\delta ts}|^2 \sim \rho_д \Lambda^2 \ln \Lambda/a \sim 10\rho_д\Lambda^2; \qquad (\rho_д\sim c/a^2), \qquad (12)$$

$$K''\sim c\Lambda^2(1/a^2)\int\limits_{\rho_{ts}>\Lambda}(\Lambda/\rho_{ts})^2 d\boldsymbol{\rho}_t \sim \rho_д\Lambda^4\int\limits_{\Lambda}^{\infty} d\boldsymbol{\rho}/\rho^4 \sim \rho_д\Lambda^2. \qquad (13)$$

Отсюда вытекает, что критерий (11), а также и неравенство $\psi<\psi_{дин}$, выполняются при условии $\rho_д<\rho_{д0}$ ($\rho_{д0}\sim\Lambda^{-2}$), т. е. если среднее расстояние между дислокациями больше Λ. Таким образом, наличие в монокристалле дислокаций с плотностью $\rho_д<\rho_{д0}$ не препятствует динамическому рассеянию РЛ. Очевидно, в этом случае величина Λ имеет смысл радиуса «действующей» области (см. [11, 12]), определяющей размеры участка кристалла вокруг выделенной точки, дислокации в котором дают существенный вклад в когерентные динамические эффекты; вкладом же более далеких дислокаций можно пренебречь, так как они создают гораздо более плавные деформации (точнее, вклад удаленных дислокаций в K убывает гораздо быстрее ($\sim\rho^{-4}$), чем растет их число ($\sim\rho$)). Если $\rho_д>\rho_{д0}$, то для нахождения радиуса действующей области r^* интеграл (13) следует дополнительно разбить на два интеграла — от Λ до r^* и от r^* до ∞, причем r^* определяется тем условием, что дислокации, расположенные за пределами сферы радиуса r^*, дают малый вклад в K: $\rho_д\Lambda^4\int\limits_{r^*}^{\infty} d\boldsymbol{\rho}/\rho^4<1$, откуда находим:

$$r^*\sim\Lambda^2\sqrt{\rho_д}\sim\Lambda\sqrt{\rho_д/\rho_{д0}}, \quad (\rho_д>\rho_{д0}). \qquad (14)$$

Отсюда видно, что при $\rho_д > \rho_{д0}$ радиус r^* начинает расти с увеличением $\rho_д$ и в пределе больших плотностей дислокаций может достичь размеров кристалла, что позволяет осуществить предельный переход к кинематическому режиму рассеяния.

Помимо r^* следует рассмотреть другую важную характерную величину — размер l^* областей когерентного динамического рассеяния. Очевидно, l^* можно определить как максимальное расстояние между двумя узлами s и s', для которого выполняется критерий динамического рассеяния (11):

$$\overline{|\psi_s - \psi_{s'}|^2}/\psi^2_{дин} < 1, \quad (|\mathbf{r}_s - \mathbf{r}_{s'}| \sim l^*). \tag{15}$$

Отсюда находим:

$$l^* \sim \Lambda \exp(\rho_{д0}/\rho_д). \tag{16}$$

Как показывает эта оценка, l^* резко возрастает с уменьшением $\rho_д$ и уже при некоторой плотности дислокаций $\rho_д{}^*$, мало отличающейся от $\rho_{д0}$, может достичь характерного размера кристалла l. Соответствующую плотность $\rho_д{}^*$ находим из условия $l^* \sim l$:

$$\rho_д \sim \rho_{д0}/\ln(l/\Lambda) \sim (0{,}2 \div 0{,}3)\,\rho_{д0}. \tag{17}$$

Таким образом, в интервале плотностей $0—\rho_д{}^*$ весь кристалл рассеивает как единая когерентная область. В узком интервале $\rho_д{}^*—\rho_{д0}$ рассеяние на отдельных участках кристалла приводит к образованию когерентных динамически рассеянных пучков РЛ, однако при выходе из кристалла эти пучки имеют довольно большой угловой разброс ($>\psi_{дин}$) и поэтому образуют лишь частично когерентное суммарное волновое поле, создающее уширенный и ослабленный брэгговский рефлекс. И наконец, при $\rho_д > \rho_{д0}$ динамические эффекты пропадают, когерентная волна отсутствует и рассеяние происходит по кинематическому режиму.

Из вышесказанного вытекает, что при учете динамического характера рассеяния в кристаллах с небольшими $\rho_д$ происходит эффективное обрезание вклада далеких ($r_{ts} > r^* \sim \Lambda$) дислокаций в характеристики рассеяния. В результате роль статического фактора e^{-L} играет величина e^{-L^*}, определение которой может быть сведено к перенормировке L путем введения процедуры обрезания. Перенормируя указанным образом L, получим

$$L^* \sim \rho_д \Lambda^2 \sim \rho_д/\rho_{д0}. \tag{18}$$

Отсюда видно, что при $\rho_д < \rho_{д0}$ L^* не превышает 1. Поэтому для определения I_R можно непосредственно воспользоваться методом расчета интегральных интенсивностей, развитым в [15]. В результате получим для I_R выражение вида (3), в котором $I_Б$ описывается известным выражением [19], а

$$A = \sum_{\sigma\tau} \iint \frac{dx\,dx'}{16(1+x^2)(1+x'^2)} X^2_{\sigma\tau}\Pi_{\sigma\tau} I(\mathbf{k}_{\sigma\tau}), \quad \left(\iint I(\mathbf{k})\,dx\,dx' = 1\right), \tag{19}$$

где суммирование по σ, τ означает суммирование по ветвям дисперсионных поверхностей соответственно брэгговских и диффузных волн, x, x' — безразмерные угловые переменные в плоскости рассеяния, выражения для $X_{\sigma\tau}$ и $\Pi_{\sigma\tau}$ см. в [15], $\mathbf{k}_{\sigma\tau}$ — вектор дифракции с учетом динамических поправок, $I(\mathbf{k})$ — дифференциальная интенсивность кинематического рассеяния, проинтегрированная по составляющей вектора $\mathbf{k}$, перпендикулярной плоскости рассеяния, и нормированная указанным в (19) способом. Малыми (при $t \gg \Lambda$) слагаемыми в $I_Д$, описывающими интерференцию различных типов внутри- и межветвевого рассеяния, мы пренебрегли.

Коэффициент A характеризует влияние динамических эффектов на диффузное рассеяние. Если ширина кинематического распределения интенсивности $I(\mathbf{k})$ значительно больше $1/\Lambda$, то удельный вес динамически рассеянной компоненты диффузного фона при $\mu t < 1$ пренебрежимо мал, и $A \approx 1$. В общем случае для оценки A необходимо знать функцию $I(\mathbf{k})$, которая при $\rho_д < \rho_{д0}$ имеет ширину $\sim 1/\Lambda$. Численные расчеты, выполненные для $I(\mathbf{k})$ в виде гауссова распределения шириной m/Λ, показали, что в широком интервале изменения m ($m=0,1 - 10$) при $\mu t < 1$ коэффициент A с точностью до 1 % не зависит от μt, а в зависимости от m меняется в пределах от 0 до 1.

Поскольку, как показывают экспериментальные данные [20], при $\rho_д < \rho_{д0}$ величина $2L^*$ невелика, в (3) можно положить $1 - e^{-2L^*} \approx 2L^*$. Для произведения $2L^*A$, исходя из оценки (18), можно принять выражение $2L^*A = \pi \langle r_\delta^{*2} \rangle \rho_д$, где r_δ^* имеет смысл радиуса «действующей области» вокруг дислокаций системы δ, $\langle \ldots \rangle$ означает усреднение по различным системам дислокационных линий. Учитывая, что r_δ^* должно быть пропорционально $\mathbf{g}\mathbf{b}_\delta$ и что при малых плотностях дислокаций $r_\delta^* \sim \Lambda$, примем $r_\delta^* = (|\mathbf{g}\mathbf{b}_\delta|/4\pi)\Lambda$ и после усреднения получим:

$$2L^*A = \frac{\pi}{3}\left(\frac{gb}{4\pi}\Lambda\right)^2 \rho_д, \qquad (b = |\mathbf{b}_\delta|), \qquad I_Д \approx I_0 \frac{\pi}{3}\left(\frac{gb}{4\pi}\Lambda\right)^2 \rho_д q t e^{-\mu t}. \qquad (20)$$

Поправка к μ, обусловленная диффузным рассеянием, в (20) опущена, поскольку при экспериментальных исследованиях толщинной зависимости $\ln I_R$ в кристаллах Si и CdTe ($\rho_д \sim 5 \cdot 10^4$ см$^{-2}$) было установлено, что тангенс угла наклона этой зависимости к оси абсцисс, представляющий собой эффективный коэффициент поглощения, оказался в пределах ошибок измерения равным величине μ, измеренной при неинтерференционном пропускании MoK_α-излучения через пластинки указанных кристаллов. Это означает, что вклад поглощения за счет диффузного рассеяния на дислокациях (по крайней мере при $\rho_д \sim 5 \cdot 10^4$ см$^{-2}$) пренебрежимо мал по сравнению с μ и связанные с этим процессы потери интенсивности в приближении тонкого кристалла можно не учитывать.

Сопоставление значений ρ_g, определенных независимыми методами

Материал	Тип отражения	λ, нм	μt	I_R, имп	ΔI_R, имп	Значения ρ_g: предложенный метод	избирательное травление	метод Ланга
Si	220	0,071	1	11350	500	10^3	$0,9 \cdot 10^3$	$\sim 10^3$
Ge	220	0,113	0,9	310	50	$2,5 \cdot 10^4$	$2,7 \cdot 10^4$	$\sim 10^4$
GaAs	220	0,121	2,2	990	960	$3,6 \cdot 10^5$	$3,6 \cdot 10^5$	—
CdTe	220	0,048	0,7	2350	900	$1,1 \cdot 10^5$	$0,9 \cdot 10^5$	—
	331	0,048	0,7	1300	740	$0,8 \cdot 10^5$	$0,9 \cdot 10^5$	—
	311	0,048	0,7	990	250	$0,9 \cdot 10^5$	$0,9 \cdot 10^5$	—
CdTe	220	0,048	0,7	1560	65	$2,3 \cdot 10^3$	—	$5 \cdot 10^3$

В тонких реальных образцах вклад диффузной компоненты интенсивности в суммарную величину I_R резко возрастает, особенно при измерениях на спектрометре с шириной пучка, намного превышающей экстинкционную длину [15, 17, 18]. Изменением же динамической компоненты интенсивности по сравнению с идеальными кристаллами в первом приближении, по-видимому, можно пренебречь, поскольку величины статического фактора $\exp(-L)$ близки к 1 в широком интервале варьирования значений $\rho_д$ с точностью, существенно превышающей величины относительных изменений I_R. Поэтому наблюдаемый на опыте прирост интенсивности лауэ-дифрагированных пучков ΔI_R в тонких образцах, содержащих хаотически распределенные дислокации, можно отождествить с диффузной компонентой интенсивности $I_Д$, определяемой формулой (20). Согласно (20) из экспериментальных величин ΔI_R можно легко рассчитать соответствующие значения $\rho_д$ в интервале $10^3 - 10^7$ см$^{-2}$. Значения $\rho_д \sim 10^7$ см$^{-2}$ отвечают случаю перекрытия рентгеновских деформационных изображений отдельных дислокаций. Нижний предел ($\sim 10^3$ см$^{-2}$) отвечает порогу чувствительности при измерениях I_R с точностью ~ 3 %.

Проверка предложенной методики проводилась в монополярных кристаллах (Si, Ge), а также в бинарных соединениях (GaAs, CdTe, InSb) с различной плотностью дислокаций, величина которой контролировалась методами избирательного травления и рентгеновской топографии. Приближение тонкого кристалла реализовалось выбором соответствующей длины волны λ в спектре излучения рентгеновской трубки с Mo-анодом. Измерения I_R проводились на двукристальном и однокристальном спектрометрах. В последнем случае при использовании известной методики измерений интенсивностей вблизи K-краев поглощения элементов [20], значения $\rho_д$, рассчитанные для различных отражений hkl, совпадали между собой с точностью ~ 10 %. Это обстоятельство является, с нашей точки зрения, дополнительным доказательством корректности представления о диффузном рассеянии рентгеновских лучей на сильно искаженных участках вблизи дислокаций. Расчет I_R для совершенной решетки проводился по формуле интенсивности рассеяния тонким идеальным кристаллом [19].

Из таблицы видно, что наблюдается удовлетворительная корреляция значений $\rho_д$, определенных в фиксированных участках образцов с площадью порядка сечения падающего пучка ($\sim 0{,}2 \times 0{,}2$ мм) независимыми методами. Данное обстоятельство свидетельствует о работоспособности предложенной методики определения средних значений плотности хаотически распределенных дислокаций, которую можно использовать для экспрессной оценки структурной однородности монокристаллических пластин. Его можно также рассматривать как доказательство справедливости теоретических соображений о необходимости перенормировки статического фактора и о динамическом характере рассеяния РЛ в кристаллах с небольшими плотностями дислокаций. Полученные в данной работе формулы могут быть использованы для анализа других рентгенодифракционных эффектов в кристаллах с хаотически распределенными дислокациями.

1. *Кривоглаз М. А.* Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами. — М. : Наука, 1967.—336 с.
2. *Ефимов О. Н.* Интегральные характеристики аномального прохождения рентгеновских лучей для кристаллов германия с дислокациями. — ФТТ, 1963, **5**, № 5, с. 1466—1476.
3. *Maruyama S.* Anomalous transmission of X-rays through germanium single crystals containing dislocations and impurities. — J. Phys. Soc. Jap., 1965, **20**, N 8, p. 1399—1405.
4. *Datsenko L. I., Skorokhod M. Ya., Vasilkovskii A. S.* The effect of dislocations on the intensity jumps at the interferential transmission of X-rays near the K-edge of absorption in Ge. — Phys. status solidi. A, 1968, **30**, N 1, p. 231—237.
5. *Елистратов А. М.* Прямые методы исследования дефектов в кристаллах. — М. : Мир, 1965.—286 с.
6. *Afanas'ev A. M., Kohn V. G.* Dynamical theory of X-ray diffraction in crystals with defects.— Acta crystallogr. A, 1971, **27**, N 5, p. 421—430.
7. *Иверонова В. И., Кузнецов А. В.* Вычисления зависимости интерференционного коэффициента поглощения рентгеновских лучей от плотности дислокаций. — ФТТ, 1973, **15**, № 9, с. 2689—2693.
8. *Лидер В. В., Чуховский Ф. Н., Рожанский В. Н.* Эффект экстинкции при динамическом рассеянии рентгеновских лучей в кристалле Ge, содержащем дислокационные петли. — ФТТ, 1977, **19**, № 8, с. 1231—1237.
9. *Иванов А. Н., Скаков Ю. А., Фомичева Е. И.* Определение плотности дислокаций по эффекту экстинкции при съемке «на отражение» (по Брэггу). — Завод. лаб., 1982, **48**, № 9, с. 53—55.
10. *Иванов А. Н., Климанек П. И., Скаков Ю. А.* Применение эффекта экстинкции для анализа дислокационной структуры кристаллов. — Кристаллография, 1983, **28**, № 1, с. 109—114.
11. *Молодкин В. Б.* Классификация дефектов кристалла по их влиянию на дифракцию излучений в рамках динамической теории рассеяния. — Киев, 1976.—43 с. — (Препринт / АН УССР, Ин-т металлофизики; 76.4)
12. *Молодкин В. Б.* Классификация дефектов кристалла по их влиянию на дифракцию излучений в рамках динамической теории рассеяния. 1. Когерентное рассеяние.— Металлофизика, 1980, **2**, № 1, с. 3—24.

13. *Молодкин В. Б.* Динамическая теория диффузного рассеяния в кристаллах с хаотически распределенными дефектами. — Металлофизика, 1981, **3**, № 4, с. 27—38.
14. *Молодкин В. Б., Олиховский С. И., Осиновский М. Е.* Динамическая теория диффузного рассеяния рентгеновских лучей и электронов в кристаллах, содержащих дефекты кулоновского типа. — Металлофизика, 1983, **5**, № 1, с. 3—15.
15. *Интегральные* характеристики лауэ-дифракции в кристаллах с дефектами кулоновского типа / Г. И. Гудзенко, В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, М. Е. Осиновский. — Металлофизика, 1983, **5**, № 3, с. 10—15.
16. *Даценко Л. И.* Динамическое рассеяние рентгеновских лучей и структурное совершенство реальных кристаллов (обзор). — УФЖ, 1979, **24**, № 5, с. 577—590.
17. *Хрупа В. И., Даценко Л. И.* Рассеяние рентгеновских лучей тонкими реальными кристаллами кремния. — ФТТ, 1982, **24**, № 3, с 950—952.
18. *Effect* of dislocation density on integrated intensity of X-ray scattering by silicon crystals in Laue geometry / M. N. Olekhnovich, A. L. Karpei, A. J. Olekhnovich, L. D. Puzenkova. — Acta crystallogr. A, 1983, **39**, N 1, p. 116—122.
19. *Пинскер З. Г.* Рентгеновская кристаллооптика. — М.: Наука, 1982.—392 с.
20. *Исследование* совершенства кристаллов однокристальным спектрометром в случае лауэ-дифракции / М. Я. Скороход, Л. И. Даценко, А. Н. Гуреев, А. С. Васильковский.— УФЖ, 1970, **15**, № 5, с. 787—795.
21. *Даценко Л. И.* Динамическое рассеяние рентгеновских лучей и структурное совершенство реальных кристаллов полупроводников: Дис. ... д-ра физ.-мат. наук. — Киев, 1977.—307 с.

Ин-т металлофизики АН УССР, Киев
Ин-т полупроводников АН УССР, Киев

Получено 14.07.83