

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Многопараметрическая кристаллография на основе многообразности картины многократного рассеяния брэгговских и диффузных волн (метод стоячих диффузных волн)

В.Б. Молодкин, А.П. Шпак, М.В. Ковальчук, В.Ф. Мачулин, В.Л. Носик

Излагаются основы созданного авторами нового поколения кристаллографии, названного диффузно-динамической многопараметрической дифрактометрией (ДДМД). Обсуждаются результаты обобщения теоретического и экспериментального обоснований метода стоячих (брэгговских) волн в идеальных кристаллах, которые выполнены в классической работе М.В. Ковальчука и В.Г. Кона "Рентгеновские стоячие волны — новый метод исследования структуры кристаллов" [УФН 149 69 (1986)], для случая кристаллов с дефектами, в которых кроме стоячих брэгговских волн возникают стоячие диффузные волны. Эти волны обуславливают зависимости от условий дифракции характера влияния дефектов на динамическую картину рассеяния, т.е. новое явление, которое выражается в многообразности диффузно-динамической картины, принципиально отсутствующей при кинематическом рассеянии. В результате открывается возможность, целенаправленно изменяя условия дифракции, управлять перестройкой брэгговских и диффузных волновых (от бегущих до стоячих) полей и, следовательно, изменять характер их взаимодействия с кристаллами и за счёт этого экспериментально получать необходимое число различных картин рассеяния, комбинированная компьютерная обработка которых позволяет решить проблему однозначной многопараметрической диагностики. Рассматриваются теоретические и экспериментальные основы, а также результаты практического применения ДДМД.

PACS numbers: 42.25.Fx, 61.05. – a, 61.72. – y

DOI: 10.3367/UFNr.0181.201107a.0681

Содержание

1. Введение (682).
2. Сравнительный анализ влияния дефектов и условий дифракции на кинематическую и динамическую картины рассеяния (682).
 - 2.1. Кинематический случай.
 - 2.2. Случай динамического рассеяния.
3. Динамическая теория рассеяния в кристаллах с дефектами нескольких типов (685).
 - 3.1. Дифференциальные отражательные способности.
 - 3.2. Динамическая модель трёхосевой дифрактометрии кристаллических систем с дефектами.
 - 3.3. Влияние интегрирования по вертикальной расходимости на картину распределения диффузной составляющей дифрагированной интенсивности.

В.Б. Молодкин, А.П. Шпак. Институт металлофизики им. Г.В. Курдюмова НАН Украины, бульв. Академика Вернадского 36, 03680 ГСП Киев-142, Украина
Тел. (+ 3044) 424-05-30. E-mail: molodkn@imp.kiev.ua
М.В. Ковальчук, В.Л. Носик. Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Ленинский просп. 59, 119333 Москва, Российская Федерация
В.Ф. Мачулин. Институт физики полупроводников им. В.Е. Лашкарева НАН Украины, просп. Науки 41, 03028 Киев, Украина

Статья поступила 22 сентября 2010 г.,
после доработки 27 октября 2010 г.

4. Многообразие динамической картины рассеяния в кристаллах с дефектами и её физическая природа (695).
 5. Динамическая теория интегральных интенсивностей рассеяния в кристаллах с дефектами нескольких типов (697).
 - 5.1. Интегральные интенсивности в случае малых эффектов экстинкции.
 - 5.2. Интегральные интенсивности в случае больших эффектов экстинкции.
 6. Метод интегральной диффузно-динамической многопараметрической дифрактометрии (ИДДМД) (702).
 - 6.1. Физические основы метода диффузно-динамической многопараметрической дифрактометрии.
 - 6.2. Толщинные и спектральные зависимости полной интегральной интенсивности.
 - 6.3. Эффект асимметрии азимутальной зависимости нормированной полной интегральной интенсивности.
 - 6.4. Деформационные зависимости интегральной интенсивности рассеяния кристаллами с дефектами для лауэ-дифракции в области К-края поглощения.
 - 6.5. Деформационные зависимости интегральной интенсивности рассеяния кристаллами с дефектами для лауэ-дифракции при нарушении закона Фриделя.
 - 6.6. Экспериментальная апробация метода ИДДМД.
 7. Диффузно-динамическая многопараметрическая дифрактометрия многослойных структур (709).
 8. Заключение (710).
- Список используемых сокращений (711).
Список литературы (711).

1. Введение

Созданная в работах [1–8] диффузно-динамическая многопараметрическая дифрактометрия (ДДМД) коренным образом расширяет возможности кристаллографии. Классическая кристаллография, созданная в самом начале прошлого века, основывается либо на кинематической (приближение однократного рассеяния), либо на более общей и строгой динамической (учитывающей эффекты многократности рассеяния) теориях дифракции в кристаллах с идеально периодической (без дефектов) структурой и по этой причине характеризует только эту идеальную структуру, не позволяя диагностировать дефекты [9–15]. Однако, как стало очевидным в последнее время, комплекс необходимых свойств разрабатываемых новых материалов определяется не столько исходной структурой их периодических решёток, сколько характеристиками наведённых в них современными технологиями отклонений от периодичности, т.е. дефектов различного типа и искусственной наноразмерной сверхструктуры. Последние могут быть изучены только на основе кристаллографии, которая учитывает диффузное рассеяние, обусловленное указанными отклонениями от периодичности структуры решёток кристаллов.

Теоретические основы такой кристаллографии, использующей диффузное рассеяние, были созданы сначала в рамках кинематического (Кривоглазом [15]), а впоследствии динамического (авторами настоящего обзора с коллегами [16–64]) рассмотрения. При этом только диффузно-динамическая кристаллография оказалась способной решить проблему однозначной многопараметрической диагностики, например, в случае большого числа характеристик дефектов нескольких типов, одновременно присутствующих в кристаллах, или структурных параметров многослойных систем с дефектами селективно для каждого слоя без разрушения. Это оказалось возможным благодаря открытому явлению многообразности дифракционной картины [1] в случае динамического (многократного) как брэгговского, так и диффузного рассеяния. При этом важно, что указанная многообразность, необходимость рассмотрения которой для повышения информативности диагностики возникает при изучении исключительно многопараметрических систем, оказалась индивидуальной для каждого типа дефектов в кристаллах. Последнее дополнительно повысило информативные возможности диагностики, комбинирующей рентгенодифракционные измерения для одного образца, полученные в разных условиях динамической дифракции как независимые взаимодополняющие экспериментальные данные, и позволило однозначно решать многопараметрические обратные задачи — восстанавливать одновременно параметры дефектов нескольких типов, присутствующих в кристаллах, или многочисленные характеристики искусственно созданных сверхструктур и сверхрешёток наносистем по нескольким картинам рассеяния.

Идея решения указанной многопараметрической задачи для систем со сложной дефектной структурой путём совместной обработки необходимого набора дифрактометрических экспериментальных данных, полученных в различных условиях динамической дифракции, была порождена и обоснована открытием явления многообразности (зависимости не только от типа дефектов, но и от условий дифракции) характера влияния

дефектов на динамическую картину рассеяния, и именно эта идея была положена в основу разработки новых принципов и обеспечения новых функциональных возможностей диагностики в рамках диффузно-динамической многопараметрической дифрактометрии.

2. Сравнительный анализ влияния дефектов и условий дифракции на кинематическую и динамическую картины рассеяния

2.1. Кинематический случай

Потенциал рассеяния излучения кристаллом с дефектами, в отличие от такового для идеального кристалла, становится непериодическим и зависящим от случайных переменных, характеризующих распределение дефектов в кристалле. В теории Кривоглаза [15] такой непериодический потенциал представлен в виде суммы двух слагаемых. Первое из них — это усреднённый по случайным переменным 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 отклонение 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 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 интегральной полной 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 рассеяния 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 атомов 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, как и функция формы кристалла, от условий дифракции.

2.2. Случай динамического рассеяния

При динамической дифракции, как следует из анализа результатов работ [16–20], 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 конфигурации дефектов.

Главное отличие — *появление уникально структурно-чувствительного фактора экстинкции вследствие диффузного рассеяния* [16]. Это новое фундаментальное понятие динамической теории впервые было введено в работе В.Б. Молодкина и Е.А. Тихоновой [16], в которой установлены физическая природа и зависимости этого фактора от характеристик дефектов и условий дифракции. Данный фактор описывает предсказанный авторами работы [16] 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 других, но связанных непосредственно с многократностью рассеяния на самом эффективном периодическом потенциале динамических эффектов, 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 векторов рассеяния (разных отклонений от точного условия Вульфа – Брэгга), причём эта зависимость "перепуталась" с зависимостью от характеристик дефек-

тов. То есть эти зависимости от условий дифракции и характеристик дефектов интенсивности брэгговских отражений перестали быть факторизованными, в первую очередь, вследствие появления указанного выше фактора экстинкции из-за диффузного рассеяния.

Главной динамической особенностью диффузного рассеяния оказалась обнаруженная существенная зависимость характера его распределения в пространстве обратной решётки от условий дифракции. 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, которые, в свою очередь, стали зависеть от векторов рассеяния.

Как показано в [16–20], многократное перерассеяние диффузных волн на периодической части потенциала преобразует их в блоховские волновые поля, для которых в [21–23] были предсказаны *эффекты аномального прохождения и экстинкции диффузного рассеяния*, получившие многократное теоретическое [67–69] и экспериментальное [44] подтверждение. 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. 1 и 2.

Из рисунка 1 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. 1в), в отличие от случая эффекта Бормана в идеальных кристаллах, появляется не один, а два хребта, один из которых, обусловленный эффектом аномального прохождения брэгговской составляющей, соответствует точному брэгговскому положению падающего луча (монокроматора), а другой, обусловленный аномальным прохождением 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

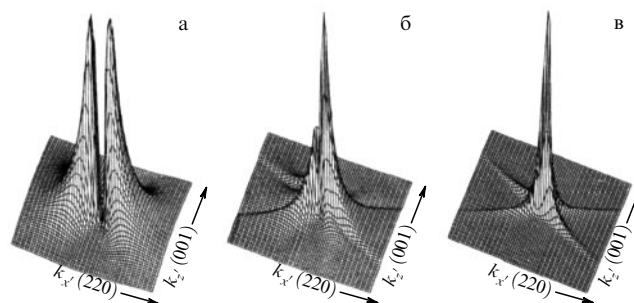


Рис. 1. Изменение картины рассеяния (трёхмерных изображений двумерных распределений интенсивности диффузного рассеяния в плоскости дифракции) при увеличении толщины t кристалла от $\mu_0 t = 0,027$ (а) до $\mu_0 t = 1,34$ (б) и $\mu_0 t = 5,36$ (в) иллюстрирует явление аномального прохождения диффузного рассеяния (μ_0 — коэффициент фотоэлектрического поглощения). Как видно, характер проявления этого эффекта качественно отличается от такового в случае брэгговского рассеяния [23].

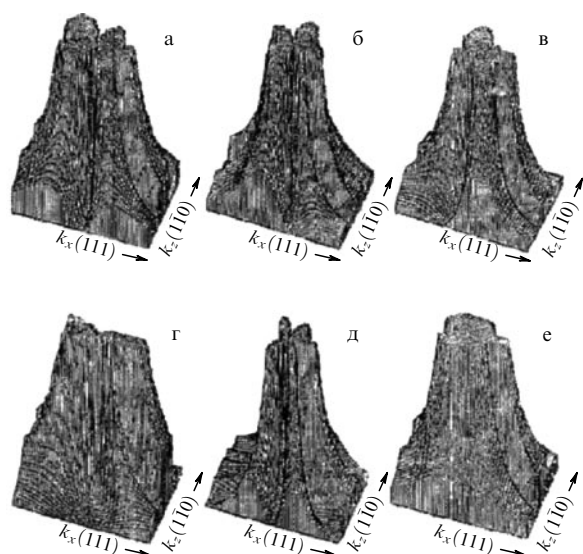


Рис. 2. Рентгеновские фурье-изображения полей смещений вокруг дефектов разного типа (дислокационных петель с различной ориентацией) [23].

пик на рис. 1в в 40 раз выше, чем каждый из пиков на рис. 1а.

В динамической картине эффекты многократного рассеяния вследствие их зависимости от вектора дифракции, т.е. от расположения точки наблюдения в пространстве обратной решётки относительно узла обратной решётки, как бы маскируют 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 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. формой и размерами кристалла, и распределением в обратном пространстве фурье-компонент полей смещений атомов от дефектов.

Все указанные распределения в кинематической теории не зависят 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, т.е. условия дифракции по-разному влияют на картину рассеяния в различных областях пространства обратной решётки.

А поскольку дефекты разного типа дают определяющий вклад в различные области пространства обратной решётки, то появляется возможность управлять вкладами дефектов разного типа в картину рассеяния целенаправленным изменением условий дифракции при динамическом рассеянии. Такая возможность, которая принципиально отсутствует при кинематическом рассеянии, обуславливает эффект изменения избирательности чувствительности динамической картины к дефектам разного типа [30] при изменении условий дифракции.

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. В результате при динамической дифракции характер влияния дефектов на динамическую картину рассеяния зависит как от характеристик дефектов, так и от условий дифракции. При этом указанные зависимости определены в рамках построенной динамической теории, что и обеспечивает возможность их целенаправленного изменения для повышения информативности динамической дифрактометрии. Отметим, что работа [23] 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 (см. рис. 1) более существенны, чем зависимости от типа дефектов, представленные на рис. 2, по причинам, которые впервые подробно излагаются в настоящем обзоре.

Следует отметить, что дальнейшие обобщения динамической теории рассеяния в кристаллах с дефектами, созданной в [16–23], и её развитие, направленное на совершенствование и создание более общих методических подходов, а также расширение области их применимости, успешно реализованы в последующих работах [24–75], результаты которых подтверждают те основные результаты и выводы работ [16–23], которые будут представлены в настоящем обзоре. Кроме того, отметим ставшую классической работу Като [76], которая по названию совпадает с тематикой работ [16–75], 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 [16–75], не даёт. При этом, как и большинство работ [70–76], теория Като основана на решении уравнений Такаги, которые справедливы только для плавных полей смещений и по этой причине неприменимы или недостаточно корректны количе-

ственно при наличии микродефектов, особенно наноразмерных дефектов.

Таким образом, первый шаг к объяснению явления многообразности полной динамической картины рассеяния был реализован [23] 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 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 (а значит, и от определяемого ими характера влияния условий дифракции на интенсивность рассеяния) от положения точки наблюдения в пространстве обратной решётки, не только более сложным характером проявления собственно эффектов многократности для диффузного рассеяния.

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 вектора рассеяния на зависимости картины рассеяния от характеристик дефектов и условий дифракции, а также появления "перепутывающих" эти зависимости динамических факторов (таких, как фактор диффузной экстинкции, фактор интерференционного поглощения и др.) многообразность динамической картины диффузного рассеяния приобретает новое, существенно повышающее информативность диагностики, качество. А именно, появляется связь многообразности с изменением характера влияния дефектов на динамическую картину диффузного 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 картины, а не только самого факта многообразности.

Как отмечено, это обусловлено совместным влиянием зависимости от положения точки наблюдения в пространстве обратной решётки не только фактора, описывающего влияние характеристик дефектов, но и появившейся аналогичной зависимости фактора, характеризующего влияние условий дифракции на динамическую картину рассеяния. 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 [34–37] эффекта аномального возрастания с увеличением толщины кристалла вклада

диффузной составляющей, который обусловлен установленным в этих работах существенным различием (на несколько порядков величины) эффектов экстинкции вследствие как брэгговского, так и диффузного рассеяния. Этот эффект изменения вклада диффузного рассеяния с изменением толщины, как впервые было указано в работах [1–8], существенно усилил отмеченную зависимость от условий дифракции характера влияния дефектов на полную картину рассеяния и стал основным фактором, определяющим информативность диагностики в случае многообразности. Это происходит, как показано в [1–8], за счёт открытой в [34–37] зависимости от толщины кристалла (а впоследствии открытой в [1–8] 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 [16–23, 34–37], оказались, как будет показано в разделах 2, 3, частными механизмами, конкуренция между которыми и вызывает возникновение установленного и описанного впоследствии в работах [1–8] общего явления зависимости от условий дифракции (не только от толщины, но и от 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 также другие функциональные возможности диагностики дефектов.

В разделах 2–6 будут приведены детальное обоснование и анализ упомянутых в этом разделе результатов и выводов, а также примеры их практического применения.

3. Динамическая теория рассеяния в кристаллах с дефектами нескольких типов

3.1. Дифференциальные отражательные способности

3.1.1. 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 на кристалл из вакуума плоской гармонической волны

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 \exp \left(-i\mathbf{K}\mathbf{r} + \frac{it\omega}{c} \right),$$

где $\mathbf{r}$ — радиус-вектор, 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, восприимчивость в кристалле с дефектами $\chi(\mathbf{r})$ не будет периодической, но её можно представить в виде интеграла Фурье:

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

где $\mathbf{G}$ — вектор обратной решётки, умноженный на 2π , $\mathbf{q}$ — переданный импульс за счёт рассеяния на искажениях, вызванных дефектами, v_c — объём элементарной ячейки кристалла.

Представляя индукцию волны $\mathbf{D}(\mathbf{r})$, как и восприимчивость, в виде интеграла Фурье:

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \frac{v_c}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \mathbf{D}_{\mathbf{q}} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) \approx \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{D}_{\mathbf{G}+\mathbf{q}} \exp[-i(\mathbf{G} + \mathbf{q})\mathbf{r}], \quad (3)$$

и подставляя (2) и (3) в уравнение (1), для амплитуд волн получим следующую бесконечную систему уравнений [53]:

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

Переходя к важному с точки зрения практического применения двухволновому случаю динамической дифракции, в рамках развитой в [19, 20, 24] теории возмущений получим 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):

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

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

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

$$\begin{aligned} (-2\varepsilon_{0q} + \chi_0) D_q + CE\chi_{-H} D_{H+q} &= -(\delta\chi_{\mathbf{q}} D_0 + C\delta\chi_{-\mathbf{H}+\mathbf{q}} D_{\mathbf{H}}), \\ CE\chi_H D_q + (-2\varepsilon_{Hq} + \chi_0) D_{H+q} &= -(C\delta\chi_{\mathbf{H}+\mathbf{q}} D_0 + \delta\chi_{\mathbf{q}} D_{\mathbf{H}}), \end{aligned} \quad (6)$$

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 флуктуационная часть фурье-компоненты восприимчивости кристалла задаётся выражением

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

где

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

$E = \exp(-L_H)$ — фактор Кривоглаза – Дебая – Валлера, $\chi_0, \chi_{\pm H}$ — фурье-компоненты восприимчивости кристалла, C — поляризационный множитель ($C = 1$ для σ -поляризации, $C = \cos 2\theta_B$ для π -поляризации, 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 [19, 20]. При значении фактора Кривоглаза – Дебая – Валлера $E = 1$, т.е. в отсутствие дефектов, 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:

$$\begin{aligned} (-2\varepsilon_0 + \chi_0 + \Delta\chi_{00}) D_0 + (CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}) D_H &= 0, \\ (CE\chi_H + \Delta\chi_{H0}) D_0 + (-2\varepsilon_H + \chi_0 + \Delta\chi_{HH}) D_H &= 0, \end{aligned} \quad (8)$$

где дисперсионные поправки к восприимчивости, которые обусловлены дефектами, определяются выражениями [25]

$$\begin{aligned} \Delta\chi_{00} &= - \sum_{\mathbf{q}} \frac{(-2\varepsilon_{0q} + \chi_0) V_{00}(\mathbf{q})}{d(\mathbf{q})}, \\ \Delta\chi_{HH} &= - \sum_{\mathbf{q}} \frac{(-2\varepsilon_{Hq} + \chi_0) V_{HH}(\mathbf{q})}{d(\mathbf{q})}, \end{aligned} \quad (9)$$

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

$$\Delta\chi_{H0} = C \sum_{\mathbf{q}} \frac{\chi_H V_{H0}(\mathbf{q})}{d(\mathbf{q})},$$

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

В обобщённом виде для (9) будем иметь

$$\Delta\chi_{GG'} = \sum_{\mathbf{q}} \frac{\tilde{f}_{GG'}(\mathbf{q}) V_{GG'}(\mathbf{q})}{d(\mathbf{q})}, \quad (11)$$

где

$$\tilde{f}_{GG'}(\mathbf{q}) = \begin{cases} (-2\varepsilon_{Gq} + \chi_0) & \text{при } G = G', \\ E\chi_{H-2G'} & \text{при } G \neq G', \end{cases}$$

$$V_{GG'}(\mathbf{q}) = C^2 \delta\chi_{-\mathbf{q}-\mathbf{H}+2\mathbf{G}} \delta\chi_{\mathbf{q}+\mathbf{H}-2\mathbf{G}},$$

здесь $\delta\chi_{-\mathbf{q}-\mathbf{H}+2\mathbf{G}}, \delta\chi_{\mathbf{q}+\mathbf{H}-2\mathbf{G}}$ — фурье-компоненты флуктуационной части поляризуемости. Для дисперсионных поправок (11) справедливы [25] выражения $\Delta\chi_{00} \approx \Delta\chi_{HH} \sim \mu_{ds}/K$, где μ_{ds} — коэффициент экстинкции, обусловленный диффузным рассеянием (см. раздел 6), и $\Delta\chi_{H0} \approx \Delta\chi_{0H} \approx 0$.

3.1.2. Геометрия Брэгга. Решая систему уравнений (8) с использованием граничных условий для плоскопараллельной кристаллической пластинки в случае

брэгг-дифракции

$$D_T(\mathbf{r}) = \sum_{\delta} D_0^{\delta} \exp(-i\mathbf{K}_0^{\delta} \mathbf{r}) \Big|_{z=0} = E_0 \exp(-i\mathbf{K} \mathbf{r}),$$

$$D_S(\mathbf{r}) = \sum_{\delta} D_H^{\delta} \exp(-i\mathbf{K}_H^{\delta} \mathbf{r}) \Big|_{z=t} = 0, \quad D_S(\mathbf{r}) \Big|_{z=0} = E_S(\mathbf{r}),$$

$$\mathbf{K}_0^{\delta} = \mathbf{K} + K\Delta_{\delta} \mathbf{n}, \quad \mathbf{K}_H^{\delta} = \mathbf{K}_0^{\delta} + \mathbf{H}$$

(здесь $E_S(\mathbf{r}) = E_H^a \exp(-i\mathbf{K}'_H \mathbf{r})$ — амплитуда дифрагированной волны в вакууме, $\mathbf{K}'_H = \mathbf{K}_H^{\delta} - K\Delta_{\delta} \mathbf{n}$, t — толщина кристалла), получим 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

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

$$A_{\delta} = \frac{1}{2\gamma_0} (\chi_0 + \Delta\chi_{00}^{\delta}) - \frac{\lambda}{2A} \left[y - (-1)^{\delta} \sqrt{y^2 - 1} \right],$$

$$y = -(\alpha - \alpha_0) \frac{\sqrt{b}}{\sigma}, \quad 2\alpha_0 = \chi_0 + \Delta\chi_{HH}^{\delta} + \frac{\chi_0 + \Delta\chi_{00}^{\delta}}{b},$$

$$b = \frac{\gamma_0}{|\gamma_H|}, \quad \sigma^2 = (CE\chi_H + \Delta\chi_{H0}^{\delta})(CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}^{\delta}),$$

$A = \lambda|\gamma_H|\sqrt{b}/\sigma$ — 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 с амплитудами D_0^1 и D_0^2 , которые представляют собой слабо и сильно поглощающиеся волны. Такая ситуация возникает из-за того, что максимумы сильно поглощающихся стоячих волн попадают на атомные плоскости и их поглощение, которое пропорционально восприимчивости в среде, становится значительным, тогда как максимумы амплитуды второго волнового поля попадают в межплоскостное пространство и поглощение таких волн значительно слабее.

Таким образом, для когерентной компоненты отражательной способности в геометрии дифракции по Брэггу получим [25]

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

где

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

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

$$x_i = \frac{t}{A_B} (1 - \kappa^2)^{1/2} \left(\frac{\sqrt{a^2 + b^2} + a}{2} \right)^{1/2},$$

$$a = \frac{z^2}{1 - \kappa^2} - g^2 - 1, \quad b = \frac{2gz}{(1 - \kappa^2)^{1/2}} - \frac{2p}{1 - \kappa^2},$$

$$A_B = \frac{\lambda\sqrt{\gamma_0|\gamma_H|}}{2\pi C|\chi_{Hr}|},$$

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

$$\kappa = \left| \frac{\chi_{Hi}}{\chi_{Hr}} \right|, \quad z = -\frac{2\Delta\theta \sin 2\theta_B + |\chi_{0r}|(1 + |\gamma_H|/\gamma_0)}{2C|\chi_{Hr}|\sqrt{|\gamma_H|/\gamma_0}},$$

χ_{Hr} и χ_{Hi} — действительная и мнимая части фурье-компоненты восприимчивости χ_H , χ_{0r} и χ_{0i} — действительная и мнимая части фурье-компоненты восприимчивости χ_0 .

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

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

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_{H+q} плоских волн, которые образуют диффузные блоховские волны, удовлетворяют системе неоднородных уравнений (5). Эти уравнения описывают процессы многократного перерассеяния диффузных волн D_q и D_{H+q} на периодической части кристаллического потенциала, а также процессы однократного перерассеяния интенсивности волнового поля из сильных брэгговских волн с амплитудами D_0 и D_H в диффузные волны с амплитудами D_q и D_{H+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_H , D_q , D_{H+q} с использованием уравнений (4) и подставить в уравнения (6). После этого первого итерационного шага коэффициенты при D_q и D_{H+q} в уравнениях (6) получают поправки $\Delta\chi'_{GG'}$, которые полностью совпадают по форме с дисперсионными поправками к волновым векторам сильных брэгговских волн $\Delta\chi_{GG'}$ (11), но зависят от углов выхода $\Delta\theta'$:

$$(-2\varepsilon_{0q} + \chi_0 + \Delta\chi'_{00})D_q + (CE\chi_{-H} + \Delta\chi'_{0H})D_{H+q} =$$

$$= -(\delta\chi_q D_0 + C\delta\chi_{-H+q} D_H), \quad (15)$$

$$(CE\chi_H + \Delta\chi'_{H0})D_q + (-2\varepsilon_{Hq} + \chi_0 + \Delta\chi'_{HH})D_{Hq} =$$

$$= -(C\delta\chi_{H+q} D_0 + \delta\chi_q D_H),$$

где ε_{0q} и ε_{Hq} — ошибки возбуждения диффузно рассеянных волн, $\Delta\chi'_{GG'}$ — дисперсионные поправки, учитывающие процессы двукратного диффузного рассеяния. Поправками к коэффициентам при амплитудах D_0 и D_H в правых частях системы уравнений (15), которые также

возникают при выполнении указанного итерационного шага и описывают перерасеяние диффузных волн обратно в сильные брэгговские, пренебрегается как малыми величинами более высокого порядка [19, 20, 24, 25].

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 K' , получим следующее выражение для диффузной компоненты дифференциальной отражательной способности кристаллической пластинки [25]:

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

$$F_{\text{dyn}} = 1 + |\zeta'|bR_{\text{coh}} + 2\text{Re}(\zeta'c^{(\delta)}),$$

$$p(\mu_i t) = \frac{1 - \exp(-2\mu_i t)}{2\mu_i t}, \quad \zeta' = \frac{|CE\chi_H + \Delta\chi_{0H}^{\delta}|}{|CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{H0}^{\delta}|},$$

где μ_i — интерференционный коэффициент поглощения.

3.1.3. Геометрия Лауэ. Для определения дифференциальной отражательной способности в геометрии дифракции по Лауэ используем соответствующие этому случаю граничные условия для амплитуд проходящей $D_T(\mathbf{r})$ и дифрагированной $D_S(\mathbf{r})$ волн:

$$D_T(\mathbf{r}) = \sum_{\delta} D_0^{\delta} \exp(-i\mathbf{K}_0^{\delta}\mathbf{r}) \Big|_{z=0} = E_0 \exp(-i\mathbf{K}\mathbf{r}), \quad (16)$$

$$D_S(\mathbf{r}) = \sum_{\delta} D_H^{\delta} \exp(-i\mathbf{K}_H^{\delta}\mathbf{r}) \Big|_{z=0} = 0, \quad D_S(\mathbf{r}) \Big|_{z=t} = E_S(\mathbf{r}).$$

Таким образом, решая (8) вместе с (16), получим следующие выражения для амплитуд сильных брэгговских волн в кристалле в геометрии дифракции по Лауэ [23] (здесь следует учесть, что в случае лауэ-дифракции $\gamma_H = |\gamma_H|$, тогда как в случае дифракции по Брэггу $\gamma_H = -|\gamma_H|$):

$$D_0^{\delta} = (-1)^{\delta} \frac{A_{\delta'}}{A_1 - A_2} E_0, \quad D_H^{\delta} = D_0^{\delta} A_{\delta},$$

$$A_{\delta} = \frac{-2\varepsilon_0^{\delta} + \chi_0 + \chi_{00}^{\delta}}{CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}^{\delta}},$$

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

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

Для когерентной компоненты дифференциальной отражательной способности в геометрии Лауэ находим следующее выражение:

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

$$= \frac{\exp[-(\mu_0 + \mu_{\text{ds}}(y))l]}{2(1+y^2)} \times$$

$$\times \left(\cosh \frac{\xi C(\mu_0 + \mu_{\text{ds}})l}{\sqrt{1+y^2}} - \cos 2A\sqrt{1+y^2} \right), \quad (17)$$

где

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

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 $\cosh x$ на экспоненты слагаемое с отрицательной степенью пренебрежимо мало, для $R(y)$ в приближении полубесконечного кристалла получим более простое выражение:

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

где $R_p(y)$ — когерентная компонента дифференциальной отражательной способности идеального динамически рассеивающего кристалла при дифракции по Лауэ в приближении толстого кристалла,

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

Решая систему уравнений для амплитуд диффузно рассеянных волн с граничными условиями, соответствующими геометрии дифракции по Лауэ, для диффузной компоненты дифференциальной отражательной способности в приближении толстого кристалла получим [24]

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

$$R_D(\mathbf{k}) = P_0 \frac{C^2 E^2 K^2 \chi_{Hr}^2}{|A_1 - A_2|^2 |A'_1 - A'_2|^2} \times$$

$$\times \sum_{\delta, \tau} |A'_\tau - A_{\delta}|^2 |2\gamma_0 A_{\delta'} - \chi_0|^2 |\mathbf{H}^0 \mathbf{u}(\mathbf{q})|^2 \Pi_{\delta\tau}, \quad (20)$$

где $u_{\mathbf{q}}$ — компонента Фурье поля смещений от одиночного дефекта,

$$\Pi_{\delta\tau} = \frac{\exp(2Kt \text{Im } A_{\delta}) - \exp(2Kt \text{Im } A'_{\tau})}{2Kt \text{Im } (A_{\delta} - A'_{\tau})},$$

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

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

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

В приближении тонкого кристалла в геометрии Лауэ диффузная компонента дифференциальной отражательной способности принимает вид

$$R_{\text{diff}}(\Delta\theta) =$$

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

где

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

3.1.4. Коэффициент экстинкции. Когда в динамически рассеивающем кристалле имеются дефекты, искажающие решётку, то кроме фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера появляется ещё один структурно чувствитель-

Однако в приведённых выше выражениях не учитывается тот факт, что диффузное рассеяние имеет различный характер в двух областях: Хуаня и Стокса–Вильсона, а функция $|v_q|^2$ ведёт себя в этих областях соответственно как $\sim 1/q^2$ и $\sim 1/q^4$ [54]. Позднее в работах [55, 56] было учтено различное поведение выражений для интенсивности диффузного рассеяния в областях Хуаня и Стокса–Вильсона, т.е.

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

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

где $\mathbf{q}^0 = \mathbf{q}/q$. С учётом соотношений (26) для $J(k_0)$ (см. (22)) получаем (при условии $R_{\text{eff}} \ll \Lambda$) [57]

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

где $k_0 = K\Delta\theta \sin 2\theta_B$, $k_c \equiv q_c$, $k_m = q_m$, $b_1 = B_1 + B_2/3$, $b_2 = B_1 + (1/2)B_2 \cos^2 \theta_B$, $b_3 = (1/2) \cos^2 \theta_B (1 - \tan^2 \theta_B)$.

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 $k \sim k_c$, и выражения для полной интегральной интенсивности (ПИИ), которая представляется суммой когерентной и диффузной компонент интегральной интенсивности рассеяния, с $\mu_{\text{ds}}(\Delta\theta)$ в форме (27) не являются корректными в случае крупных дефектов. В работах [55, 56] был учтён комплексный характер передаваемого импульса $\mathbf{q} = \mathbf{k} + i\mu\mathbf{n}$, обусловленный многократностью диффузного рассеяния на периодической части восприимчивости, что позволило авторам устранить расходимость интеграла (22) вблизи узла обратной решётки при $k \rightarrow 0$ и получить аналитические выражения для $\mu_{\text{ds}}(\Delta\theta)$, корректные и в случае крупных дефектов,

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

где

$$J_{\text{H}}(k_0) = b_2 \ln \left(e \frac{k_m^2 + \mu_i^2}{k_0^2 + \mu_i^2} \right) +$$

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

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

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

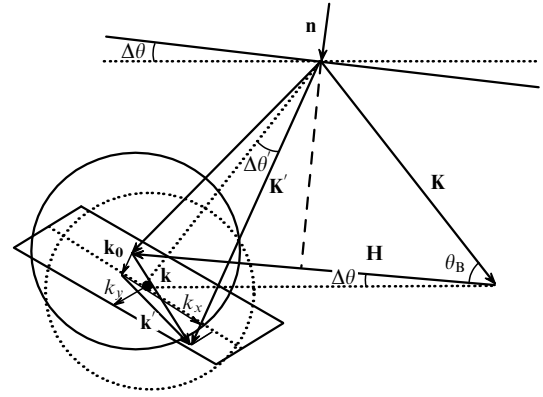


Рис. 4. Схема волновых векторов в обратном пространстве при дифракции по Лауэ.

$$b_4 = B_2 \left(\frac{1}{2} \cos^2 \theta_B - 1 \right),$$

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

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. 4) 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 выполнялось условие $\mathbf{k}_0 \perp S_{K'}$, 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

$$F(\mathbf{q}) =$$

$$= \left(B_1 + B_2 \frac{k'^2 \cos^2 \varphi \sin^2 \theta_B + k_0^2 \cos^2 \theta_B - k_0 k' \cos \varphi \sin 2\theta_B}{k'^2 + k_0^2 + \mu_i^2} \right) \times$$

$$\times \frac{1}{k'^2 + k_0^2 + \mu_i^2}. \quad (29)$$

Элемент площади интегрирования в выбранной системе координат $dS_{K'} = k' dk' d\varphi$. Подставляя (29) в (22) и проводя интегрирование, с учётом различия характеров 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

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

$$b_4 = \frac{1}{2} B_2 \sin^2 \theta_B$$

и с интерференционным коэффициентом поглощения

$$\mu_i = \frac{KCE\chi_{Hr}\chi_{Hi}}{\gamma_0\sqrt{\chi_{Hr}^2 - \chi_{Hi}^2}}$$

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

В случае нескольких типов дефектов, в том числе крупных, следует учесть, что при пренебрежении корреляциями расположений дефектов имеет место линейная суперпозиция вкладов в величины L_H и $\mu_{ds}(\Delta\theta)$ от разных типов дефектов [42, 56]:

$$L_H = \sum_{\alpha=1}^n L_H^{\alpha}, \quad \mu_{ds} = \sum_{\alpha=1}^n \mu_{ds}^{\alpha},$$

где n — число типов дефектов, α — индекс, обозначающий тип дефекта.

3.2. Динамическая модель трёхосевой дифрактометрии кристаллических систем с дефектами

Интенсивность дифрагированного излучения, регистрируемого трёхосевым дифрактометром (ТОД), зависит от двух углов, $\Delta\theta$ и $\Delta\theta'$, которые задают отклонение кристаллов образца и анализатора от их точных отражающих (брэгговских) положений. 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 [43]:

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

При использовании бездисперсионной схемы ТОД ($n, -n', n$) с геометрией дифракции по Брэггу на всех кристаллах (кроме образца, в котором реализуется геометрия дифракции по Лауэ с индексами отражения n') когерентную и диффузную компоненты измеряемой интенсивности можно записать в виде [43–45]

$$I_{coh}(\Delta\theta, \Delta\theta') = I_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx R_M^{nm} \left\{ b_M^{-1} [-b_S^{-1}(x - \Delta\theta) - \Delta\theta] \right\} \times \\ \times R_{coh} [-b_S^{-1}(x - \Delta\theta)] R_A(x - \Delta\theta'), \quad (31)$$

$$I_{diff}(\Delta\theta, \Delta\theta') = \\ = I_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx R_M^{nm}(x) \int_{-\infty}^{\infty} dx' r_{diff}(\mathbf{k}) R_A(x' - \Delta\theta'), \quad (32)$$

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:

$$I_{coh}(\Delta\theta, \Delta\theta') = I_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx R_M^{nm} \left\{ b_M^{-1} [b_S^{-1}(x - \Delta\theta) - \Delta\theta] \right\} \times \\ \times R_{coh} [b_S^{-1}(x - \Delta\theta)] R_A(x - \Delta\theta'), \quad (33)$$

где I_0 — интенсивность излучения, поступающего в 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, $\mathbf{k} = k_x \mathbf{e}_x + k_z \mathbf{e}_z$, $\mathbf{e}_x$ 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 значения или $R_{coh} = T$, или $R_{coh} = R$, которые в соответствии с результатами, представленными в разделе 2.1, и их дальнейшими обобщениями в работах [46, 47] имеют вид

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

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

где $w_r = \operatorname{Re} w$, $w_i = \operatorname{Im} w$, $w = \lambda A^{-1} \sqrt{y^2 + 1}$,

$$\zeta = [(CE\chi_H + \Delta\chi_{H0})(CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H})^{-1}]^{1/2},$$

$K = 2\pi/\lambda$ — модуль волнового вектора падающей волны, λ — длина волны в вакууме, A — длина экстинкции, t — толщина плоскопараллельной кристаллической пластинки, y — угловая функция, C — поляризационный множитель, $\Delta\chi_{GG'}$ — дисперсионные поправки к волновым векторам "сильных" брэгговских волн, обусловленные ДР ($\mathbf{G}, \mathbf{G}' = 0, \mathbf{H}$), $\mu_0 = -K\chi_{i0}(1/\gamma_0 + 1/\gamma_H)/2$ — нормальный коэффициент фотоэлектрического поглощения, γ_0 и γ_H — направляющие косинусы соответственно падающей и дифрагированной волн, χ_G и χ_{iG} — 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 ($\mathbf{G} = 0, \mathbf{H}$), $E = \exp(-L_H)$ — фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера, $\mu_{ds} = -K \operatorname{Im} (\Delta\chi_{00}/\gamma_0 + \Delta\chi_{HH}/\gamma_0)/2$ — 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 преобразуется при изменении этих условий, например толщины кристалла t . Так, для лауэ-дифракции диффузную составляющую можно представить в следующем виде [46, 47], что полностью подтверждает ранее сделанные выводы:

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

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

здесь c — концентрация дефектов, а множитель

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

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

Аналогично, для случая брэгг-дифракции коэффициенты прохождения (T) и отражения (R) для когерентных волн можно представить в виде [46, 47]

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

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

где

$$\mu_0 = -\frac{K\chi_{i0}(1/\gamma_0 - 1/|\gamma_H|)}{2}, \\ \mu_{ds} = -\frac{K \operatorname{Im}(\Delta\chi_{00}/\gamma_0 - \Delta\chi_{HH}/|\gamma_H|)}{2}.$$

Соответственно диффузную составляющую коэффициента отражения в геометрии дифракции по Брэггу можно представить в виде [48, 49]

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

$$X_{\delta\tau} = \frac{c'(\tau)}{c^{(\delta)}} \chi_H - \zeta' \chi_{-H}, \quad (42)$$

$$P_{\delta\tau\lambda\sigma} = \frac{\exp[iKt(\Delta_\delta - \Delta_\lambda^* - \Delta'_\tau + \Delta'^*_\sigma)] - 1}{iKt(\Delta_\delta - \Delta_\lambda^* - \Delta'_\tau + \Delta'^*_\sigma)},$$

$$|U|^2 = |y + \sqrt{y^2 - 1}| \exp(Ktw_i) + \\ + |y - \sqrt{y^2 - 1}| \exp(-Ktw_i) - \\ - 2 \operatorname{Re}[(y + \sqrt{y^2 - 1})^* (y - \sqrt{y^2 - 1}) \exp(iKtw_r)], \\ |U'|^2 = |y' + \sqrt{y'^2 - 1}| \exp(Ktw'_i) + \\ + |y' - \sqrt{y'^2 - 1}| \exp(-Ktw'_i) - \\ - 2 \operatorname{Re}[(y' + \sqrt{y'^2 - 1})^* (y' - \sqrt{y'^2 - 1}) \exp(iKtw'_r)],$$

где $w' = w'_r + iw'_i = \lambda A'^{-1} \sqrt{y'^2 + 1}$, $\zeta' = (CE\chi_H + \Delta\chi'_{H0}) \times (CE\chi_{-H} + \Delta\chi'_{0H})^{-1}$ — длина экстинкции для диффузно рассеянных волн, $\Delta\chi'_{GG'}$ — 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 приведённых выше результатов, в динамической теории влияние дефектов на когерентную и диффузную составляющие картины рассеяния определяется не только фактором Кривоглаза–Дебая–Валлера, но и дисперсионными поправками к волновым векторам "сильных" брэгговских и диффузных волн (фактически параметрами экстинкции вследствие ДР), которые обусловлены ДР на дефектах и, как правило, имеют более весомое влияние, чем фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера. Зависимости от условий дифракции для брэгговской и диффузной составляющих, в отличие от таковых в кинематической теории, принципиально различаются между собой и изменяются с изменением геометрии дифракции и типа дефектов; последнее, в частности, происходит за счёт дисперсионных поправок. Выражения для дисперсионных поправок и самой интенсивности ДР [1–7, 15, 50] приведены ниже, причём в наиболее общем виде, т.е. с учётом многократности рассеяния и областей рассеяния как Хуаня, так и Стокса–Вильсона, а также анизотропии полей смещений атомов кристалла, обусловленной выделенными дискретными ориентациями не сферически симметричных дефектов разных типов.

Дисперсионные поправки, например, к волновым векторам "сильных" брэгговских волн можно представить в виде суммы действительной и мнимой частей, последняя из которых и отвечает за экстинкцию когерентных волн вследствие их рассеяния на дефектах и перехода в диффузный фон:

$$\Delta\chi_{GG'} = P_{GG'} - \frac{i\mu_{GG'}}{K}, \\ \mu_{00}(\Delta\theta) \approx b \frac{C^2 V}{4\lambda^2} \int d\mathbf{k}' S(\mathbf{q}), \quad S(\mathbf{q}) = \operatorname{Re} \langle \delta\chi_{\mathbf{q}+\mathbf{H}} \delta\chi_{-\mathbf{q}-\mathbf{H}} \rangle, \quad (43)$$

$$\delta\chi_{\mathbf{H}+\mathbf{q}} \approx iE\chi_{\mathbf{H}} \sum_{\alpha} (\mathbf{H}\mathbf{u}_{q\alpha}) c_{q\alpha},$$

$$\mu_{\mathbf{H}\mathbf{H}}(\Delta\theta) \approx b^{-1} \mu_{00}(\Delta\theta), \quad \mu_{0\mathbf{H}}(\Delta\theta) \approx \mu_{\mathbf{H}0}(\Delta\theta) \approx 0,$$

где V — объём кристалла.

Действительные части дисперсионных поправок связаны с мнимыми частями известными дисперсионными соотношениями Крамерса–Кронига.

При выполнении принципа суперпозиции полей смещений атомов матрицы вокруг дефектов разных типов задача о связи дисперсионных поправок с параметрами дефектов сводится к отысканию для каждого типа дефектов (α) с концентрацией c_α так называемой корреляционной функции:

$$S(\mathbf{q}) = \sum_{\alpha} S_{\alpha}(\mathbf{q}), \quad S_{\alpha}(\mathbf{q}) = \frac{c_{\alpha}}{N} E^2 \chi_{\mathbf{H}} \chi_{-\mathbf{H}} F_{\alpha}(\mathbf{q}),$$

которая имеет разный вид в областях рассеяния Хуаня ($\mathbf{H}$) и Стокса–Вильсона ($\mathbf{SW}$), граница между которыми определяется эффективным радиусом R_{eff}^{α} дефекта типа α ,

$$F_{\alpha}(\mathbf{q}) = \begin{cases} F_{\alpha}^{\mathbf{H}}(\mathbf{q}) = (\mathbf{H}\mathbf{u}_{q\alpha})(\mathbf{H}\mathbf{u}_{-q\alpha}) & \text{при } q \leq k_{\text{mx}} = \frac{1}{R_{\text{eff}}^{\alpha}}, \\ F_{\alpha}^{\mathbf{SW}}(\mathbf{q}) = F_{\alpha}^{\mathbf{H}}(\mathbf{q}) \frac{k_{\text{mx}}^2}{q^2} & \text{при } q > k_{\text{mx}}. \end{cases}$$

При известных фурье-компонентах полей смещений $\mathbf{u}_q$ для разных типов дефектов (см. [13]), например, в наиболее общем и сложном случае призматических (не

сферически симметричных) дислокационных петель с вектором Бюргерса $\mathbf{b}$ и радиусом R_0 ,

$$\mathbf{u}_q = \frac{\pi|\mathbf{b}|R_0^2}{v_c(1-v)q^2} \left[\frac{2(1-v)\mathbf{b}(\mathbf{b}\mathbf{q})}{|\mathbf{b}|^2} + v\mathbf{q} - \frac{\mathbf{q}(\mathbf{b}\mathbf{q})^2}{q^2|\mathbf{b}|^2} \right],$$

после усреднения по набору их дискретных ориентаций в пространстве (v — коэффициент Пуассона) $F(\mathbf{q})$ принимает следующий вид [46, 47, 49, 51]:

$$\begin{aligned} F(\mathbf{q}) = & \frac{C_{n_1}^2}{3} \left(\frac{\pi H|\mathbf{b}|R_0^2}{v_c(1-v)n_1|\mathbf{q}|} \right)^2 \left\{ \left| \frac{\mathbf{H}_0\mathbf{q}}{q} \right|^2 [(9-4\eta n_1)v^2 + \right. \\ & + 2(\eta n_1 - 6)v + 7] + 4(1-v) \left[(1-v) - 2 \operatorname{Re} \frac{(\mathbf{H}_0\mathbf{q})^2}{|\mathbf{q}|^2} \right] + \\ & + \frac{4(\eta-3)}{|\mathbf{q}|^2} \left[(1-v)^2 S(\mathbf{H}_0, \mathbf{H}_0, \mathbf{q}, \mathbf{q}^*) - \right. \\ & - (1-v) \operatorname{Re} \left(\frac{(\mathbf{H}_0\mathbf{q})S(\mathbf{H}_0, \mathbf{q}, \mathbf{q}^*)}{|\mathbf{q}|^2} \right) + \\ & \left. \left. + \left| \frac{\mathbf{H}_0\mathbf{q}}{2q^2} \right|^2 S(\mathbf{q}, \mathbf{q}, \mathbf{q}^*, \mathbf{q}^*) \right] \right\}, \end{aligned}$$

где $\eta = C_{n_1}^1/C_{n_1}^2$, $C_{n_1}^m$ — биномиальные коэффициенты, а пара чисел (n_1, η) определяет тип усреднения и для ориентаций $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ соответственно представляется как $(2, 2)$ и $(3, 1)$, функция

$$S(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, \mathbf{a}_4) = a_{1x}a_{2x}a_{3x}a_{4x} + a_{1y}a_{2y}a_{3y}a_{4y} + a_{1z}a_{2z}a_{3z}a_{4z}$$

зависит от компонент векторов $\mathbf{a}_n$ [46, 47, 49, 51].

Коэффициент экстинкции когерентных волн за счёт ДР вводится следующим образом:

$$\mu_{ds}(k_0) = \mu_{HH}(\Delta\theta), \quad k_0 = K\Delta\theta \sin 2\theta_B. \quad (44)$$

С учётом выражений (43) формула (44) принимает вид

$$\mu_{ds}(k_0) = cC^2 E^2 \tilde{m}_0 A_0 J(k_0), \quad \tilde{m}_0 = \frac{v_c}{4} \left(\frac{|\chi_{HH}|}{\lambda} \right)^2, \quad (45)$$

$J(k_0) =$

$$= \begin{cases} A_1 \ln e \frac{k_m^2}{k_0^2 + \mu_1^2} + \sum_{n=2}^M \frac{A_n}{n-1} \left(\frac{1}{(k_0^2 + \mu_1^2)^{n-1}} - \frac{1}{nk_m^{2n-2}} \right), & k_0^2 + \mu_1^2 \leq k_m^2, \\ k_m^2 \sum_{n=1}^M \frac{A_n}{n(k_0^2 + \mu_1^2)^n}, & k_0^2 + \mu_1^2 > k_m^2, \end{cases}$$

где μ_1 — интерференционный коэффициент поглощения, $A_0 = \pi^3 C_{n_1}^2 [H|\mathbf{b}|R_0^2/n_1 v_c(1-v)]^2/3$, а коэффициенты A_n зависят от условий дифракции и угла $\Delta\theta$ отклонения образца от точного брэгговского положения (при учёте дискретной ориентации дислокационных петель $M = 4$) [46, 47, 49, 51].

3.3. Влияние интегрирования по вертикальной расхожимости на картину распределения диффузной составляющей дифрагированной интенсивности

Ни один реальный эксперимент не позволяет, ввиду наложения разного рода инструментальных факторов, фиксировать исходное дифференциальное распределение

дифрагированной интенсивности. Так, простейший одноосевой дифрактометр проводит аппаратное интегрирование интенсивности по всем угловым переменным. Высокорастворяющий двухосевой дифрактометр аппаратно интегрирует интенсивность ДР по телесному углу в направлении рассеянной волны, оставляя зависимость одномерного распределения интенсивности (кривых качания) только от угла отклонения вектора дифракции от сферы Эвальда (угла отклонения образца от точного брэгговского положения). Следует отметить, во-первых, отрицательное влияние инструментальных факторов, связанное с потерей после интегрирования информации о тонкой структуре распределений интенсивности ДР, которая позволяет уже по самому виду дифференциальных распределений определять, например, тип (петли, кластеры) и ориентацию дефектов в кристалле; во-вторых, положительный момент, который состоит в увеличении (благодаря тому же интегрированию в широком угловом диапазоне) относительного вклада ДР, что позволяет более надёжно устанавливать наличие дефектов малого размера с широким, но незначительным по абсолютному значению интенсивности распределением ДР.

Наиболее детальную информацию о распределении дифрагированной интенсивности, а затем и о дефектах в кристалле предоставляет трёхосевой дифрактометр, который позволяет строить карты распределения когерентной и диффузной составляющих картины рассеяния в плоскости дифракции. Однако и трёхосевой дифрактометр проводит аппаратное интегрирование по угловой расхожимости падающего пучка лучей в направлении, перпендикулярном плоскости дифракции (по вертикальной расхожимости пучка). Таким образом, при разработке методов трёхосевой дифрактометрии для корректного выделения изменения картины рассеяния вследствие искажений кристаллической решётки обязательным является учёт изменений, обусловленных влиянием инструментальных факторов, в частности интегрированием по вертикальной расхожимости.

Интегрирование выражений (36) и (41) по вертикальной расхожимости пучка рентгеновских лучей в ТОД, т.е. по компоненте переданного импульса k_y , сводится к отысканию интегралов от выражений вида

$$\begin{aligned} \langle (\mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}_1})(\mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}_2})^* \rangle = & \frac{4C_{n_1}^2}{3} \left(\frac{\pi|\mathbf{b}|R_0^2}{v_c(1-v)n_1} \right)^2 \left\{ \frac{(\mathbf{H}\mathbf{q}_1)(\mathbf{H}\mathbf{q}_2^*)}{4q_1^2 q_2^{*2}} \times \right. \\ & \times \left[(9-4\eta n_1)v^2 + 2(\eta n_1 - 6)v + 5 + 2 \frac{(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2^*)^2}{q_1^2 q_2^{*2}} \right] + \\ & + (1-v) \frac{(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2^*)}{q_1^2 q_2^{*2}} \left[(1-v)H^2 - \frac{(\mathbf{H}\mathbf{q}_1)^2}{q_1^2} - \frac{(\mathbf{H}\mathbf{q}_2^*)^2}{q_2^{*2}} \right] + \\ & + \frac{\eta-3}{q_1^2 q_2^{*2}} \left[(1-v)^2 S(\mathbf{H}, \mathbf{H}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2^*) - \right. \\ & - \frac{1-v}{2} \left(\frac{(\mathbf{H}\mathbf{q}_1)S(\mathbf{H}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2^*)}{q_1^2} + \frac{(\mathbf{H}\mathbf{q}_2^*)S(\mathbf{H}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2^*, \mathbf{q}_2^*)}{q_2^{*2}} \right) + \\ & \left. \left. + \frac{(\mathbf{H}\mathbf{q}_1)(\mathbf{H}\mathbf{q}_2^*)S(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2^*, \mathbf{q}_2^*)}{4q_1^2 q_2^{*2}} \right] \right\}, \quad (46) \end{aligned}$$

и его удобно выполнить, если разложить (46) на сумму элементарных дробей:

$$\langle (\mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}\delta\tau})(\mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}\lambda\sigma})^* \rangle = \Sigma_0 \left(\frac{\Sigma_1}{(k_y^2 + p_1^2)^2} + \frac{\Sigma_2}{(k_y^2 + p_2^2)^2} + \frac{\Sigma_3}{k_y^2 + p_1^2} + \frac{\Sigma_4}{k_y^2 + p_2^2} \right), \text{ если } \delta\tau \neq \lambda\sigma, \quad (47)$$

$$\langle (\mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}\delta\tau})(\mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}\lambda\sigma})^* \rangle = \Sigma_0 \left(\frac{\tilde{\Sigma}_1}{k_y^2 + p^2} + \frac{\tilde{\Sigma}_2}{(k_y^2 + p^2)^2} + \frac{\tilde{\Sigma}_3}{(k_y^2 + p^2)^3} + \frac{\tilde{\Sigma}_4}{(k_y^2 + p^2)^4} \right), \text{ если } \delta\tau = \lambda\sigma, \quad (48)$$

где $\mathbf{p}_{\delta\tau} = \mathbf{q}_{\delta\tau} - k_y \mathbf{e}_y$, векторы $\mathbf{p}_1$ и $\mathbf{p}_2$ соответствуют векторам $\mathbf{p}_{\delta\tau}$ с парами несовпадающих индексов, а вектор $\mathbf{p} = \mathbf{p}_{\delta\tau}$ для пар совпадающих индексов. Константы Σ_n и $\tilde{\Sigma}_n$ в выражениях (47) и (48) находятся методом неопределённых коэффициентов. Так, константа Σ_0 имеет следующий вид:

$$\Sigma_0 = \frac{4C_{n_1}^2}{3} \left(\frac{\pi |\mathbf{b}| R_0^2}{v_c(1-v)n_1} \right)^2,$$

а другие константы найдены в [47].

Результат интегрирования (которое является следствием учёта инструментальных факторов ТОД) выражения для дифференциального распределения интенсивности ДР по вертикальной расходимости рентгеновских лучей для случая лауэ-дифракции можно записать как

$$r_{\text{diff}}(\mathbf{p}) = \left(\frac{CEK^2}{16\pi\gamma_{\text{H}}} \right)^2 \left| \frac{CE\chi_{\text{H}} + \Delta\chi_{\text{H0}}}{CE\chi_{-\text{H}} + \Delta\chi_{\text{H0}}} \right| \frac{v_c t c(1-c)\Sigma_0}{|y^2 + 1||y'^2 + 1|} \times \\ \times \sum_{\delta\tau\lambda\sigma} (-1)^{\delta+\tau+\lambda+\sigma} X_{\delta\tau} \sqrt{\zeta'_\delta} \left(X_{\lambda\sigma} \sqrt{\zeta'_\lambda} \right)^* \Pi_{\delta\tau\lambda\sigma} I_{\text{SW}}^\infty, \quad (49)$$

если область рассеяния Хуаня не попадает в пределы интегрирования, или как

$$r_{\text{diff}}(\mathbf{p}) = \left(\frac{CEK^2}{16\pi\gamma_{\text{H}}} \right)^2 \left| \frac{CE\chi_{\text{H}} + \Delta\chi_{\text{H0}}}{CE\chi_{-\text{H}} + \Delta\chi_{\text{H0}}} \right| \frac{v_c t c(1-c)\Sigma_0}{|y^2 + 1||y'^2 + 1|} \times \\ \times \sum_{\delta\tau\lambda\sigma} (-1)^{\delta+\tau+\lambda+\sigma} X_{\delta\tau} \sqrt{\zeta'_\delta} \left(X_{\lambda\sigma} \sqrt{\zeta'_\lambda} \right)^* \times \\ \times \Pi_{\delta\tau\lambda\sigma} (I_{\text{SW}}^\infty - I_{\text{SW}}^A + I_{\text{H}}^A), \quad (50)$$

если интервал интегрирования содержит области рассеяния как Хуаня, так и Стокса – Вильсона.

Результат интегрирования дифференциального распределения интенсивности ДР по вертикальной расходимости рентгеновских лучей в случае брэгговской дифракции имеет вид

$$r_{\text{diff}}(\mathbf{p}) = \left(\frac{CEK^2}{16\pi\gamma_{\text{H}}} \right)^2 \frac{v_c t c(1-c)\Sigma_0}{|U|^2 |U'|^2} \times \\ \times \sum_{\delta\tau\lambda\sigma} (-1)^{\delta+\tau+\lambda+\sigma} X_{\delta\tau} X_{\lambda\sigma}^* \Pi_{\delta\tau\lambda\sigma} I_{\text{SW}}^\infty, \quad (51)$$

если область рассеяния Хуаня не попадает в пределы интегрирования, и

$$r_{\text{diff}}(\mathbf{p}) = \left(\frac{CEK^2}{16\pi\gamma_{\text{H}}} \right)^2 \frac{v_c t c(1-c)\Sigma_0}{|U|^2 |U'|^2} \times \\ \times \sum_{\delta\tau\lambda\sigma} (-1)^{\delta+\tau+\lambda+\sigma} X_{\delta\tau} X_{\lambda\sigma}^* \Pi_{\delta\tau\lambda\sigma} (I_{\text{SW}}^\infty - I_{\text{SW}}^A + I_{\text{H}}^A), \quad (52)$$

если интервал интегрирования содержит области рассеяния как Хуаня, так и Стокса – Вильсона.

Функция I_{SW}^∞ равняется значению интеграла от (47) или (48) по области Стокса – Вильсона, такой, которая занимает всё обратное пространство, а I_{H}^A и I_{SW}^A равняются соответственно интегралам по областям Хуаня и Стокса – Вильсона, ограниченным по переменной k_y отрезком $[-A, A]$.

В случае $\delta\tau \neq \lambda\sigma$ предельное значение $A = \sqrt{k_m^2 - p_a^2}$ (где $p_a = (p_1^2 + p_2^2)/2$) и интегралы в формулах (49)–(52) описываются выражениями

$$I_{\text{SW}}^\infty = \frac{2k_m^2\pi}{K\Delta p^2} \left\{ \frac{1}{p_a} \left(\Sigma_3 - \Sigma_4 + \frac{2(\Sigma_1 + \Sigma_2)}{\Delta p^2} \right) - \frac{1}{p_1} \left[\Sigma_3 + \Sigma_1 \left(\frac{1}{2p_1^2} + \frac{2}{\Delta p^2} \right) \right] + \frac{1}{p_2} \left[\Sigma_4 + \Sigma_2 \left(\frac{1}{2p_2^2} - \frac{2}{\Delta p^2} \right) \right] \right\}, \quad (53)$$

$$I_{\text{SW}}^A = \frac{4k_m^2}{K\Delta p^2} \left\{ \left(\Sigma_3 - \Sigma_4 + \frac{2(\Sigma_1 + \Sigma_2)}{\Delta p^2} \right) \frac{\arctan(A/p_a)}{p_a} - \left[\Sigma_3 + \Sigma_1 \left(\frac{1}{2p_1^2} + \frac{2}{\Delta p^2} \right) \right] \frac{\arctan(A/p_1)}{p_1} + \left[\Sigma_4 + \Sigma_2 \left(\frac{1}{2p_2^2} - \frac{2}{\Delta p^2} \right) \right] \frac{\arctan(A/p_2)}{p_2} - \frac{\Sigma_1 A}{2p_1^2(A^2 + p_1^2)} + \frac{\Sigma_2 A}{2p_2^2(A^2 + p_2^2)} \right\}. \quad (54)$$

$$I_{\text{H}}^A = \frac{1}{K} \left[\left(2\Sigma_3 + \frac{\Sigma_1}{p_1^2} \right) \frac{\arctan(A/p_1)}{p_1} + \left(2\Sigma_4 + \frac{\Sigma_2}{p_2^2} \right) \frac{\arctan(A/p_2)}{p_2} + \frac{\Sigma_1 A}{p_1^2(A^2 + p_1^2)} + \frac{\Sigma_2 A}{p_2^2(A^2 + p_2^2)} \right]. \quad (55)$$

В случае $\delta\tau = \lambda\sigma$ предельное значение $A = \sqrt{k_m^2 - p^2}$ и интегралы в выражениях (49)–(52) принимают вид

$$I_{\text{SW}}^\infty = \frac{k_m^2\pi}{2Kp^3} \left\{ \tilde{\Sigma}_1 + \frac{3}{4p^2} \left[\tilde{\Sigma}_2 + \frac{5}{6p^2} \left(\tilde{\Sigma}_3 + \frac{7\tilde{\Sigma}_4}{8p^2} \right) \right] \right\}, \quad (56)$$

$$I_{\text{SW}}^A = \frac{1}{K} \left\{ \left(\tilde{\Sigma}_1 + \frac{3}{4p^2} \left[\tilde{\Sigma}_2 + \frac{5}{6p^2} \left(\tilde{\Sigma}_3 + \frac{7\tilde{\Sigma}_4}{8p^2} \right) \right] \right) \times \left(\frac{k_m^2 \arctan(A/p)}{p^3} + \frac{A}{p^2} \right) + \frac{A}{2p^2 k_m^2} \left[\tilde{\Sigma}_2 + \frac{3}{4p^2} \left(\tilde{\Sigma}_3 + \frac{5\tilde{\Sigma}_4}{6p^2} \right) \right] + \frac{A}{3p^2 k_m^4} \left(\tilde{\Sigma}_3 + \frac{5\tilde{\Sigma}_4}{6p^2} \right) + \frac{A\tilde{\Sigma}_4}{4p^2 k_m^6} \right\}, \quad (57)$$

$$I_{\text{H}}^A = \frac{1}{K} \left\{ \left(2\tilde{\Sigma}_1 + \frac{1}{p^2} \left[\tilde{\Sigma}_2 + \frac{3}{4p^2} \left(\tilde{\Sigma}_3 + \frac{5\tilde{\Sigma}_4}{6p^2} \right) \right] \right) \frac{\arctan(A/p)}{p} + \frac{A}{p^2 k_m^2} \left[\tilde{\Sigma}_2 + \frac{3}{4p^2} \left(\tilde{\Sigma}_3 + \frac{5\tilde{\Sigma}_4}{6p^2} \right) \right] + \frac{A}{2p^2 k_m^4} \left(\tilde{\Sigma}_3 + \frac{5\tilde{\Sigma}_4}{6p^2} \right) + \frac{A\tilde{\Sigma}_4}{3p^2 k_m^6} \right\}. \quad (58)$$

4. Многообразность динамической картины рассеяния в кристаллах с дефектами и её физическая природа

Рисунки 5–9, полученные с использованием теоретической модели (30)–(58), наглядно демонстрируют обнаруженную многообразность полной динамической картины рассеяния в кристаллах с дефектами. На рисунке 6 (ср. с рис. 5) наблюдается аномальное возрастание вклада диффузной составляющей и в результате изменение вида картины рассеяния с изменением толщины кристалла. Видоизменение картин обусловлено эффектами Бормана для брэгговской и диффузной составляющих и экстинкции за счёт диффузного рассеяния, а также различиями в проявлении этих эффектов для брэгговской и для диффузной составляющих. Рисунки 5–8а иллюстрируют многообразность характера влияния дефектов

на динамическую картину рассеяния в целом, т.е. многообразность полной картины, при изменении условий дифракции.

Таким образом, продемонстрированная на рис. 5–9 динамика картины рассеяния и характера влияния на неё дефектов различного типа при изменении условий дифракции, показанная на примере зависимости от толщины кристалла и геометрии дифракции, различная для дефектов разного типа, оказывается обусловленной конкуренцией совместного влияния всех механизмов эффектов многократности рассеяния, установленных ранее и описанных выше в данном обзоре. При этом, как следует из анализа, для тонких кристаллов ($\mu_0 t \sim 1$) главную роль играют процессы, связанные с различием влияния эффектов многократности на брэгговскую и диффузную составляющие отражательной способности коэффициента отражения кристалла, а для толстых кристаллов

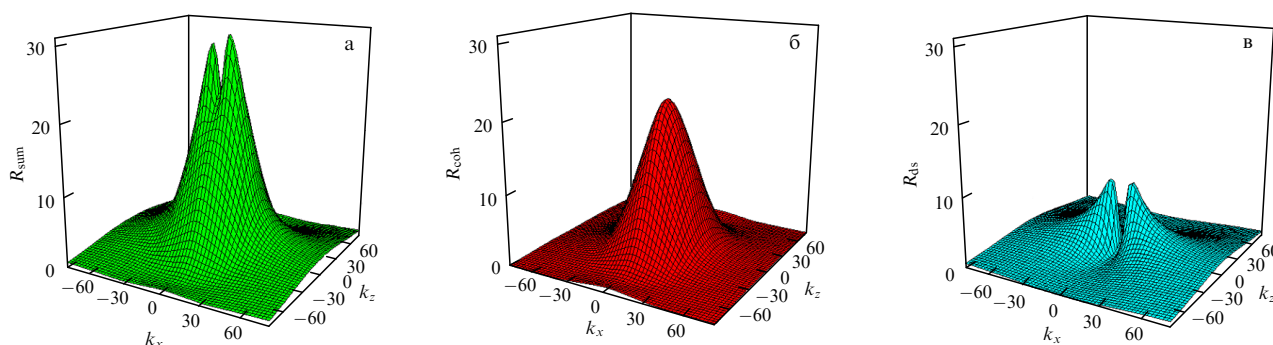


Рис. 5. Двумерные распределения в плоскости дифракции для полной интенсивности дифракции (а) и её брэгговской (б) и диффузной (в) составляющих. Случай геометрии Лауэ, Cu-K α 220 (сферические кластеры в кремнии), $t = \Lambda/10$, $\Lambda = 15,4$ нм — длина экстинкции, k_x, k_z — отклонения в плоскости рассеяния от узла обратной решётки в единицах обратных длин экстинкции, $E_{cl} = 0,583$, $\mu_{ds}(0)/\mu_0 = 0,237$.

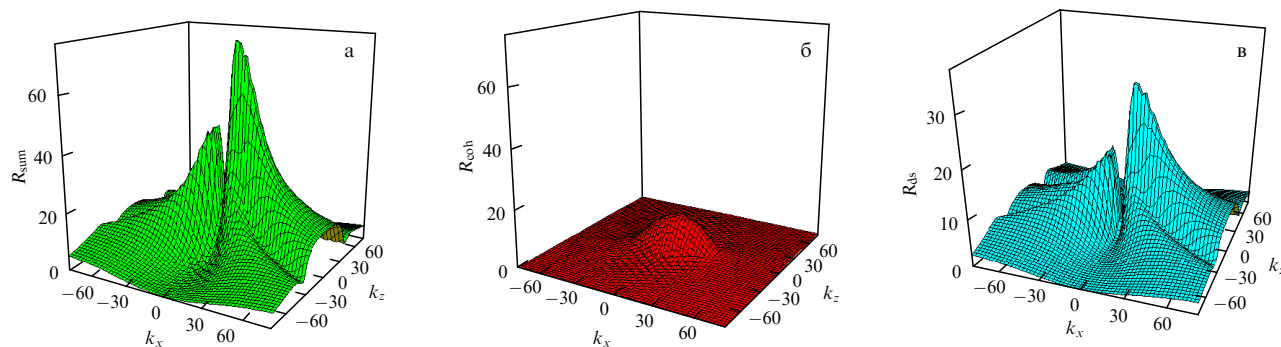


Рис. 6. То же, что и на рис. 5, но при $t = 100$ мкм.

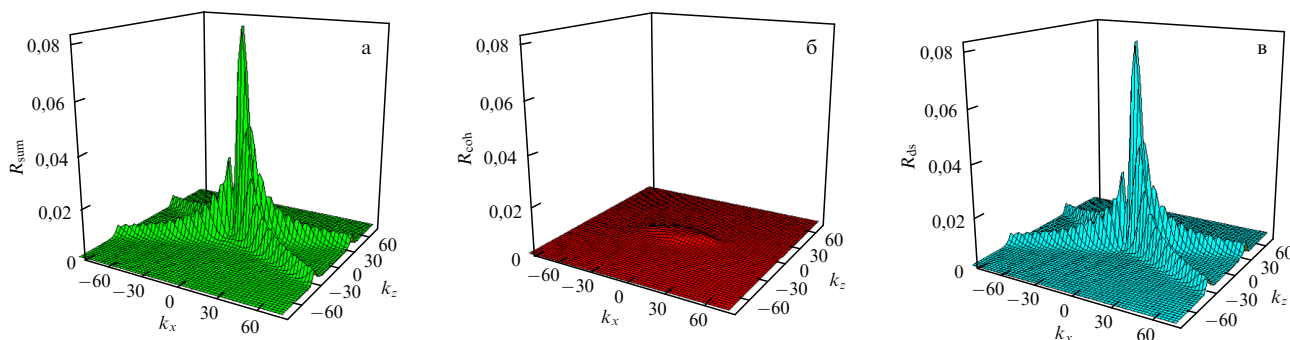


Рис. 7. То же, что и на рис. 5, но при $t = 1000$ мкм и $\mu_{ds} = 0$.

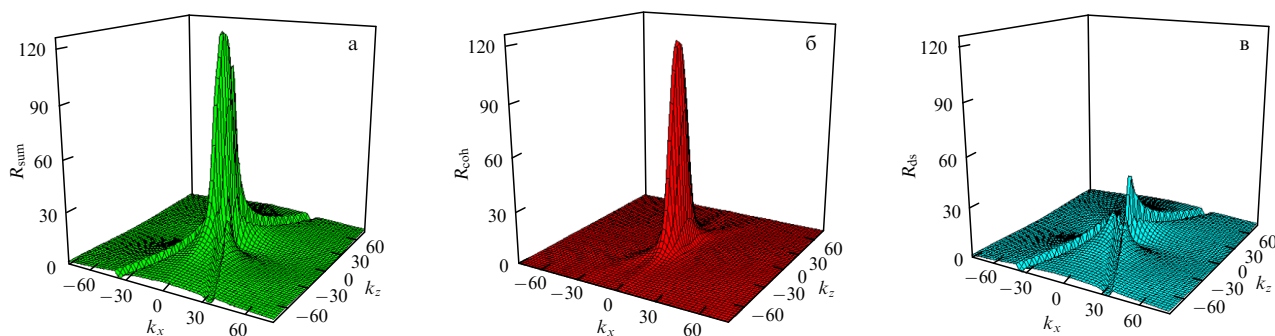


Рис. 8. То же, что и на рис. 5, но для случая геометрии Брэгга при $t = 1000$ мкм. Показано изменение картины в результате изменения геометрии дифракции.

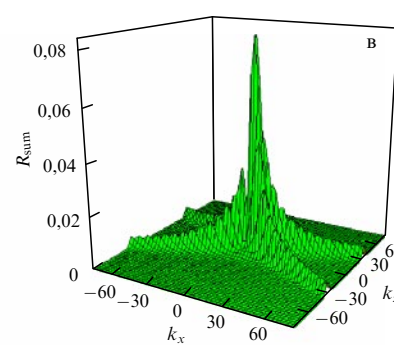
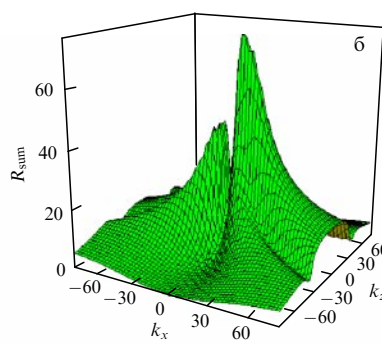
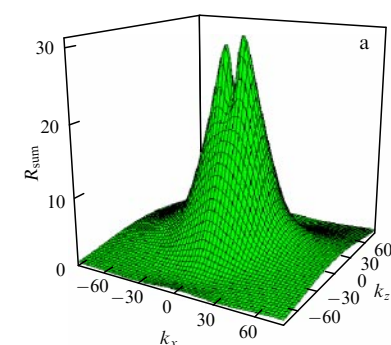
Лауэ, Cu-K α 220

Кластеры

$t = A/10$

$t = 100$ мкм

$t = 1000$ мкм



Петли

$t = A/10$

$t = 100$ мкм

$t = 1000$ мкм

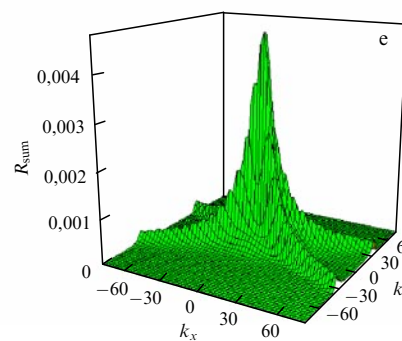
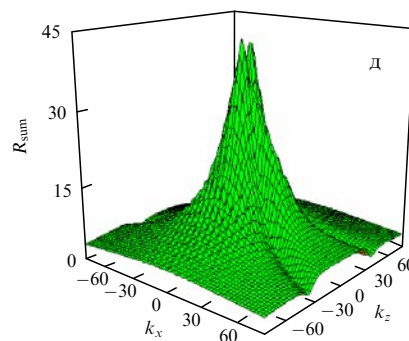
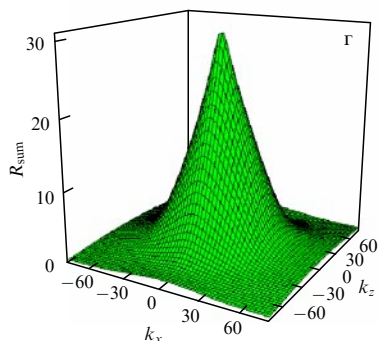


Рис. 9. Изменение характера многообразности с изменением типа дефектов. Случай геометрии Лауэ, Cu-K α 220. $E_{cl} = 0,583$, $\mu_{ds}(0)/\mu_0 = 0,237$ (кластеры), $E_L = 0,443$, $\mu_{ds}(0)/\mu_0 = 0,114$ (петли).

($\mu_0 t \gg 1$) — процессы, связанные с различием влияния многократности рассеяния на поглощательные способности (факторы поглощения) для этих составляющих.

Как видно из рис. 5–9, в тонких кристаллах основную роль играет 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 проявления для них эффектов Бормана и эффектов экстинкции вследствие диффузного рассеяния. Таким образом, с изменением толщины (условий дифракции) изменяются определяющие механизмы эффектов многократности и соотношение вкладов брэгговской и диффузной составляющих, и это приводит к изменению характера (и даже знака)

влияния дефектов на динамическую картину рассеяния, т.е. дефекты могут как уменьшать, так и увеличивать интенсивность рассеяния в любой точке пространства обратной решётки по сравнению с таковой в идеальном кристалле. Различие зависимостей всех перечисленных здесь эффектов многократности рассеяния от характеристик дефектов разного типа, так же как и от условий дифракции, обеспечивает уникальную многообразность динамической картины, связанную с зависимостью от условий дифракции характера результирующего влияния дефектов на картину рассеяния, и обуславливает качественно новые функциональные возможности информативности диагностики, в частности многопараметрической.

Для иллюстрации преимуществ многопараметрической диагностики, основанной на динамической теории, проведём численный эксперимент. Смоделируем

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)

Параметры дефектов \ Условия дифракции	Два истинных типа петель, $R_1 = 200$ нм, $n_1 = 2,05 \times 10^{11}$ см $^{-3}$; $R_2 = 100$ нм, $n_2 = 1,54 \times 10^{12}$ см $^{-3}$	Два восстановленных типа петель, $R_1 = 1800$ нм, $n_1 = 2,87 \times 10^{11}$ см $^{-3}$; $R_2 = 110$ нм, $n_2 = 1,2 \times 10^{12}$ см $^{-3}$	Один восстановленный тип петель, $R_1 = 150$ нм, $n_1 = 9,43 \times 10^{11}$ 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 %

"экспериментальную" картину рассеяния для кристалла с дефектной структурой, приведённой во второй колонке табл. 1, с учётом точности реального эксперимента, обеспечивающей наилучшую подгонку с R -фактором $\approx 4-5\%$. Как видно из табл. 1, в случае кинематически тонкого кристалла как истинная дефектная структура (вторая колонка табл. 1), так и восстановленные в результате независимой подгонки (третья и четвёртая колонки табл. 1) структуры дают одинаково хороший результат (R -фактор на уровне погрешности эксперимента $\approx 4-5\%$), т.е. приведённые в табл. 1 дефектные структуры в кинематическом подходе неразличимы. При изменении условий дифракции (увеличении эффективной толщины кристалла, например, в результате изменения длины волны излучения) картина рассеяния, предсказываемая кинематической теорией, изменяться не будет. Напротив, в динамической теории при переходе к динамически "тонкому" и "толстому" кристаллам из-за изложенных выше причин, которые обусловили многообразность динамической картины дифракции, различие между картинами рассеяния для приведённых в табл. 1 структур дефектов нескольких типов увеличится (возрастёт 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 существенное различие создают основу для разработки принципов решения проблемы однозначной многопараметрической диагностики. В результате применение методов диффузно-динамической многопараметрической дифрактометрии позволяет однозначно восстанавливать параметры сложных дефектных структур.

Наиболее ярко различие между кинематической и динамической теориями рассеяния видно на примере интегральных интенсивностей дифрагированного излучения, которые будут обсуждены в разделе 5.

5. Динамическая теория интегральных интенсивностей рассеяния в кристаллах с дефектами нескольких типов

В рамках динамической теории рассеяния неидеальными кристаллами [30, 61–63] необходимо учитывать многократность отражения как на периодической, так и на флуктуационной частях восприимчивости кристалла.

При этом наличие дефектов в кристалле не только влияет на когерентную компоненту, но и является, так же как и в случае кинематической дифракции в неидеальных кристаллах, причиной возникновения диффузного рассеяния. Диффузное рассеяние, сформированное при рассеянии волн на искажениях кристаллической решётки, вызванных дефектами, и эффекты его влияния на брэгговское рассеяние являются наиболее чувствительными к дефектной структуре монокристалла.

Характер распределения и особенности рассеяния диффузных волн сильно зависят от характеристик того типа дефекта, в результате рассеяния на полях смещения от которого они образовались. В случае дефектов небольших размеров в динамически тонких кристаллах при рассмотрении интегральных выражений можно ограничиться кинематическим одноволновым приближением в диффузной компоненте рассеяния, когда процессы перерассеяния диффузных волн на периодической части потенциала рассеяния несут существенны, поскольку ширина углового распределения таких волн намного больше ширины когерентного пика. При этом направления распространения подавляющего большинства диффузных волн существенно отличаются от условия Вульфа – Брэгга и, следовательно, такие волны не принимают участия в динамической дифракции на периодической части потенциала рассеяния.

Однако когда в кристалле имеются дефекты больших размеров (соизмеримых с длиной экстинкции или превышающих её), направления распространения таких волн слабо отличаются от направления, соответствующего точному выполнению условия Вульфа – Брэгга, и, следовательно, такие диффузные волны попадают преимущественно именно в динамическую область, поэтому для них должны быть существенными указанные динамические эффекты, даже при рассмотрении их интегральных вкладов.

5.1. Интегральные интенсивности в случае малых эффектов экстинкции

По мере развития интегральных методов диагностики возникла необходимость получить выражения для ПИИ, которая является суммой когерентной и диффузной компонент. Динамические экстинкционные эффекты в ПИИ учитываются когерентным и диффузным факторами экстинкции, в результате чего выражения для ПИИ в разных условиях дифракции имеют универсальный вид:

$$R_i = E R_{ip} F_{ds}^{\text{coh}} + R_{id}^{\text{kin}} F_{ds}^{\text{diff}},$$

где R_{ip} — интегральная интенсивность рассеяния для идеального динамически рассеивающего кристалла, E —

фактор Кривоглаза – Дебая – Валлера, $R_{\text{ID}}^{\text{kin}}$ — диффузная компонента рассеяния кинематически рассеивающего кристалла, $F_{\text{ds}}^{\text{coh}}$ и $F_{\text{ds}}^{\text{diff}}$ — соответственно когерентный и диффузный факторы экстинкции за счёт диффузного рассеяния.

В случае малых эффектов экстинкции интегральные интенсивности, которые в общем случае выражаются через интегральные факторы экстинкции, можно выразить через интегральные коэффициенты экстинкции, обусловленные диффузным рассеянием.

5.1.1. Геометрия Лауэ, тонкий кристалл. Для геометрии дифракции по Лауэ в приближении тонкого кристалла ($\mu_0 l \ll 1$, $l = t / \cos \theta_B$, t — толщина кристалла, μ_0 — линейный коэффициент фотоэлектрического поглощения) ПИИ выражается следующим образом [19, 24]:

$$R_i = \exp(-\mu_0 l) [CQEI_0(h_s) F_{\text{ds}}^{\text{coh}} + (1 - E^2) QI F_{\text{ds}}^{\text{diff}}], \quad (59)$$

где I_0 — функция Бесселя нулевого порядка от мнимого аргумента, $h_s = \mu_H / CE$ — динамический коэффициент фотоэлектрического поглощения. Введённые в (59) интегральные факторы экстинкции определены как

$$F_{\text{ds}}^{\text{coh}} = \int_{-\infty}^{\infty} R_c(k_0) \exp(-\mu_{\text{ds}}(k_0)l) dk_0 \left[\int_{-\infty}^{\infty} R_c(k_0) dk_0 \right]^{-1}, \quad (60)$$

$$F_{\text{ds}}^{\text{diff}} = \int_{-\infty}^{\infty} \mu_{\text{ds}}(k_0) \exp(-\mu_{\text{ds}}(k_0)l) dk_0 \left[\int_{-\infty}^{\infty} \mu_{\text{ds}}(k_0) dk_0 \right]^{-1}, \quad (61)$$

где $R_c(k_0)$ — когерентная компонента кривой отражения. В случае малых эффектов экстинкции из-за диффузного рассеяния ($\mu_{\text{ds}}(0)l \ll 1$) факторы (60) и (61) сводятся к $\exp(-\mu_{\text{ds}}^0 l)$ и $\exp(-\mu^* l)$:

$$F_{\text{ds}}^{\text{coh}} = \exp(-\mu_{\text{ds}}^0 l), \quad (62)$$

$$F_{\text{ds}}^{\text{diff}} = \exp(-\mu^* l), \quad (63)$$

где интегральные коэффициенты экстинкции даются выражениями

$$\mu_{\text{ds}}^0 = \int_{-\infty}^{\infty} R_c(k_0) \mu_{\text{ds}}(k_0) dk_0 \left[\int_{-\infty}^{\infty} R_c(k_0) dk_0 \right]^{-1}, \quad (64)$$

$$\mu^* = \int_{-\infty}^{\infty} \mu_{\text{ds}}^2(k_0) dk_0 \left[\int_{-\infty}^{\infty} \mu_{\text{ds}}(k_0) dk_0 \right]^{-1}. \quad (65)$$

Поскольку при малых размерах дефектов ширина функции $\mu_{\text{ds}}(\Delta\theta)$ значительно больше, чем $R_c(k_0)$, то последнюю можно рассматривать как δ -функцию, в результате имеем $\mu_{\text{ds}}^0 = \mu_{\text{ds}}(0)$, а учитывая (27), вместо (64) и (65) получим

$$\mu_{\text{ds}}^0 = cC^2 m_0 B, \quad (66)$$

$$B = b_1 + b_2 \ln \left(e \frac{k_m^2}{k_c^2} \right),$$

$$\mu^* = \mu_{\text{ds}}^0 f(r_0), \quad (67)$$

$$f(r_0) = \begin{cases} \frac{5 + 2r_0 \ln r_0 - 3,8r_0}{3(1 - \ln r_0)} & \text{для дислокационных петель,} \\ \frac{4 + r_0 \ln r_0 - 2r_0}{5 - 6 \ln r_0} & \text{для сферических кластеров,} \end{cases}$$

где $r_0 = R_0 / A$, R_0 — радиус дефекта.

Таким образом, для ПИИ в геометрии Лауэ в приближении тонкого кристалла с учётом малых эффектов экстинкции имеем

$$R_i = \exp(-\mu_0 l) [CQEI_0(h_s) \exp(-\mu_{\text{ds}}^0 l) + (1 - E^2) QI \exp(-\mu^* l)].$$

В случае дефектов больших размеров приближения (66), (67) становятся некорректными и для определения коэффициентов экстинкции необходимо интегрировать (64), (65), учитывая (28).

5.1.2. Геометрия Лауэ, толстый кристалл. Когерентный интегральный фактор экстинкции $F_{\text{ds}}^{\text{coh}}$ в геометрии дифракции по Лауэ в приближении толстого кристалла согласно (60) описывается выражением

$$F_{\text{ds}}^{\text{coh}} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} R_p(y) \exp \left[-\mu_{\text{ds}}(y) l \left(1 - \frac{\xi C}{\sqrt{1 + y^2}} \right) \right] dy}{\int_{-\infty}^{\infty} R_p(y) dy}. \quad (68)$$

В случае малых эффектов экстинкции

$$F_{\text{ds}}^{\text{coh}} = \exp(-\mu_{\text{ds}}^0 l).$$

В отличие от эффекта полного отражения, являющегося характерной особенностью динамической дифракции в геометрии Брэгга, в случае геометрии дифракции по Лауэ наблюдается эффект аномального прохождения рентгеновских лучей. Этот эффект заключается в том, что в малой угловой области в непосредственной близости от угла Брэгга наблюдается значительная интенсивность прошедшего излучения даже в достаточно толстых монокристаллах ($t \gg t_{\text{abs}}$, где t_{abs} — глубина абсорбции, обратно пропорциональная фотоэлектрическому коэффициенту поглощения μ_0), что вызвано существенным интерференционным уменьшением коэффициента поглощения для таких волн.

В случае толстого кристалла диффузно рассеянное излучение от дефектов небольших размеров из-за его широкого углового распределения практически полностью поглощается в кристалле (кроме малой части, которая попадает в указанный узкий угловой интервал), за исключением небольшого слоя (толщиной порядка длины абсорбции) на выходной стороне кристалла.

Однако в случае дефектов больших размеров, направления распространения диффузных волн от которых попадают преимущественно в указанный узкий угловой интервал, для диффузного рассеяния также становится существенным эффект аномального прохождения. Следовательно, объём формирования диффузных волн в этом случае значительно больше, чем в случае дефектов небольших размеров. Эта особенность приводит к тому, что при исследовании кристаллов в геометрии Лауэ в приближении толстого кристалла чувствительность к динамическим экстинкционным эффектам в диффузном рассеянии от крупных дефектов значительно возрастает. При этом существенно важными в данном случае являются выражения для интенсивности рассеяния в кристаллах с дефектами больших размеров, диффузное рассеяние от которых имеет преимущественно динамический характер.

Диффузный фактор экстинкции в геометрии Лауэ в толстом кристалле определяется выражением

$$F_{\text{ds}}^{\text{diff}} = \frac{2P_0}{\pi K t} \sum_{\delta, \tau} I_{\delta\tau},$$

$$I_{\delta\tau} = \frac{1}{K^3 \sin 2\theta_B} \int D_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') F(\mathbf{q}) \rho_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') \times$$

$$\times [\exp(2Kt m_{\delta}(\alpha)) - \exp(2Kt m_{\tau}(\alpha'))] d\mathbf{k}, \quad (69)$$

$$m_{\delta}(\alpha) = \text{Im } \Delta_{\delta}(\alpha) =$$

$$= \frac{1}{2\gamma_0} \left(-|\chi_{0i}| - (-1)^{\delta} \frac{C^2 E^2 \chi_{Hr} \chi_{Hi}}{\sqrt{\alpha^2 + C^2 E^2 (\chi_{Hr}^2 - \chi_{Hi}^2)}} \right) - \frac{\mu_{\text{ds}}(\alpha)}{2\gamma_0 K},$$

$$P_0 = \frac{ctv_c H^2}{16\gamma_0^3 \lambda^2}, \quad D_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') = \frac{|\Delta'_{\tau} - \Delta_{\delta}|^2 |2\gamma_0 \Delta_{\delta'} - \chi_0|^2}{|A_1 - A_2|^2 |\Delta'_1 - \Delta'_2|^2}.$$

Здесь слагаемые $I_{\delta\tau}$ описывают вклад в интенсивность диффузного рассеяния от сильно ($\tau = 2$) и слабо ($\tau = 1$) поглощающихся диффузных волновых полей, которые сформированы при рассеянии на искажениях кристаллической решётки сильно ($\delta = 2$) и слабо ($\delta = 1$) поглощающихся когерентных волн.

Для определения диффузного интегрального фактора экстинкции в геометрии Лауэ в приближении толстого кристалла при малых эффектах экстинкции и малых размерах дефектов в (69) перейдём от переменных интегрирования k_x, k_z к переменным

$$y = \frac{|\mathbf{K} + \mathbf{H}| - K}{KCE\sqrt{\chi_{Hr}\chi_{-Hr}}}, \quad y' = \frac{|\mathbf{K}' - \mathbf{H}| - K}{KCE\sqrt{\chi_{Hr}\chi_{-Hr}}},$$

воспользовавшись соотношениями

$$k_x = \left[(y' - y) \frac{\cos \psi}{\tan \theta_B} + (y' + y) \sin \psi \right] \frac{\pi}{A},$$

$$k_z = \left[-(y' - y) \frac{\sin \psi}{\tan \theta_B} + (y' + y) \cos \psi \right] \frac{\pi}{A}.$$

В результате получим

$$F_{\text{ds}}^{\text{diff}} = \frac{P_0 (KCE |\chi_{Hr}|)^2 (KA)^2}{16\pi^2 K \sin^2 \theta_B R_{\text{ID}}^{\text{kin}}} \sum_{\delta, \tau=1,2} I_{\delta\tau}, \quad (70)$$

$$I_{\delta\tau} = \iint dy dy' f_{\delta\tau}(y, y') P_{\delta\tau}(y, y'),$$

$$f_{\delta\tau}(y, y') = \frac{|\Delta'_{\tau} - \Delta_{\delta}|^2 |2\gamma_0 \Delta_{\delta'} - \chi_0|^2}{(y^2 + 1)(y'^2 + 1)} \int dk_y |\mathbf{H}_0 \mathbf{u}(\mathbf{q}_{\delta\tau})|^2,$$

$$P_{\delta\tau} = \exp(-\mu_0 l) \frac{\exp(-m_{\delta}(y)) - \exp(-m_{\tau}(y'))}{m_{\tau}(y') - m_{\delta}(y)},$$

$$m_{\delta}(y) = \mu_{\text{ds}}(y)l + (-1)^{\delta} \frac{\mu_H l C}{\sqrt{y^2 + 1}}.$$

Множитель $P_{\delta\tau}$ в подынтегральном выражении (70), который описывает эффект аномального прохождения диффузно рассеянных волн [23, 42], является резко убывающей функцией переменных y и y' . Множители $f_{\delta\tau}$ в (70) представляют собой плавные функции y и y' . Ввиду этого для асимптотической оценки интеграла (70) при $\mu_H l \gg 1$ можно воспользоваться методом Лапласа

[23, 42], согласно которому асимптотика интеграла

$$F(\lambda) = \int_a^b dx f(x) \exp(\lambda S(x))$$

при выполнении условий $\lambda \rightarrow \infty$, $S''(x_0) \neq 0$, $a < x_0 < b$ (где x_0 — точка максимума функции $S(x)$) имеет вид

$$F(\lambda) \approx f(x_0) \sqrt{\frac{-2\pi}{\lambda S''(x_0)}} \exp(\lambda S(x_0)).$$

Таким образом, для диффузного фактора экстинкции получим

$$F_{\text{ds}}^{\text{diff}} = \frac{\alpha C E |\chi_{Hr}| \mu_{\text{ds}}^0}{16 \sin^2 \theta_B \mu_H C \gamma_0^2 R_{\text{ID}}^{\text{kin}}} \sqrt{\frac{2\pi}{\mu_H l C}} \times$$

$$\times \exp[-(\mu_0 - \mu_H C + \mu_{\text{ds}}^0)l].$$

5.1.3. Геометрия Брэгга: тонкий и толстый кристаллы. В приближении тонкого кристалла выражение для когерентного фактора экстинкции в геометрии Брэгга имеет вид

$$F_{\text{ds}}^{\text{coh}} = \frac{3}{8} \int_{-\infty}^{\infty} r(z; t, g, \kappa) dz, \quad (71)$$

где

$$r(z; t, g, \kappa) =$$

$$= \frac{\cosh x_r - \cos x_i}{L_+ \cosh x_r + \sqrt{L_+^2 - 1} \sinh x_r - L_- \cos x_i + \sqrt{1 - L_-^2} \sin x_i}.$$

Вообще говоря, выражение (71) описывает экстинкционные эффекты в когерентном рассеянии в приближении как тонкого, так и толстого кристаллов, однако в последнем случае для интегрального когерентного фактора выражение (71) можно значительно упростить, поскольку при выполнении условия $\mu_0 t \rightarrow \infty$ справедливо приближение $x_r \rightarrow \infty$. Тогда когерентный фактор экстинкции в геометрии Брэгга в приближении толстого кристалла будет иметь вид

$$F_{\text{ds}}^{\text{coh}} = \frac{3}{8} \int_{-\infty}^{\infty} r(z; t, g, \kappa) dz, \quad (72)$$

где $r(z; t, g, \kappa) = L_+ - \sqrt{L_+^2 - 1}$.

Когерентный фактор экстинкции при геометрии дифракции по Брэггу (на отражение) в случае малых эффектов экстинкции даётся выражением

$$F_{\text{ds}}^{\text{coh}} = 1 - \frac{3\pi s}{4}, \quad (73)$$

где $s = (\mu_0 + \mu_{\text{ds}}(0))\lambda E/(\gamma C)$ и должно выполняться условие $s \ll 1$.

Для диффузного фактора экстинкции при учёте не малых эффектов экстинкции в геометрии Брэгга находим

$$F_{\text{ds}}^{\text{diff}} = \frac{ctv_c}{(2\pi)^3 L_H} \int d\mathbf{k} |\mathbf{H}_0 \mathbf{u}_{\mathbf{k}}|^2 \frac{1 - \exp(-2\mu_i t)}{2\mu_i t}. \quad (74)$$

Полагая $\mu_{\text{ds}}(0) \ll \mu_0$ и выполняя соответствующие разложения по малому параметру, в приближении толстого кристалла получим

$$F_{\text{ds}}^{\text{diff}} \approx \frac{\gamma/2}{(\mu_0 + \mu^*)t}, \quad (75)$$

где $\gamma = (1/\gamma_0 + 1/|\gamma_H|)^{-1}$.

В приближении тонкого кристалла для интегрального диффузного фактора экстинкции в геометрии Брэгга

$$F_{\text{ds}}^{\text{diff}} \approx \frac{1}{1 + (\mu_0 + \mu^*)t/\gamma}.$$

Как следует из выражений для факторов экстинкции в различных случаях дифракции, выражения для ПИИ в общем случае не являются аддитивными относительно вкладов в них дефектов разных типов. Это обусловлено нелинейным, как правило, характером зависимостей ПИИ от структурно-чувствительных параметров L_H , μ_{ds}^0 и μ^* .

5.2. Интегральные интенсивности в случае больших эффектов экстинкции

5.2.1. Геометрия Лауэ: тонкий кристалл. Интегральный фактор экстинкции $F_{\text{ds}}^{\text{coh}}$ когерентной составляющей ПИИ в случае геометрии Лауэ в приближении тонкого кристалла при наличии в кристалле нескольких типов дефектов даётся выражением

$$F_{\text{ds}}^{\text{coh}} = \frac{I_{\text{coh}}}{R_{\text{ip}}} = \int_{-\infty}^{\infty} R(k_0) \exp\left(-\sum_{\alpha=1}^n \mu_{\text{ds}}^{\alpha}(k_0)l\right) dk_0 \times \left[\int_{-\infty}^{\infty} R(k_0) dk_0\right]^{-1}, \quad (76)$$

где $R(k_0)$ — дифференциальная отражательная способность идеального кристалла с учётом фактора Кривоглаза – Дебая – Валлера. Однако здесь, в отличие от [55], коэффициент эффективного поглощения или экстинкции за счёт диффузного рассеяния $\mu_{\text{ds}}^{\alpha}(k_0)$ даётся выражением (28), справедливым и в случае крупных дефектов. Пренебрегая динамическими осцилляциями дифференциальной отражательной способности идеального кристалла при интегрировании и учитывая, что в таком случае

$$R(k_0) = \frac{K^2 \sigma_0^2}{2(k_0^2 b + K^2 \sigma_0^2)} \exp(-\mu_0 l),$$

где $K = 2\pi/\lambda$, λ — длина волны излучения, $\sigma_0^2 = C_j^2 E^2 \chi_H \chi_{-H}$, для R_{ip} получим

$$R_{\text{ip}} = \frac{\pi K \sigma_0}{2\sqrt{b}} \exp(-\mu_0 l).$$

Для рассмотрения интеграла I_{coh} величины $k_{\text{m}\alpha}$, разделяющие области Хуаня и Стокса – Вильсона, удобно расположить в порядке возрастания, т.е. $k_{\text{m}1} < k_{\text{m}2} < k_{\text{m}3} < \dots < k_{\text{m}n}$, n — число типов дефектов в кристалле. Учитывая чётность подынтегрального выражения, I_{coh} можно представить следующим образом: первый интеграл берётся по интервалу $k_0 \in (0, k_{\text{m}1}]$, в котором все $\mu_{\text{ds}}^{\alpha}(k_0)$ будут представлены в виде, соответствующем области Хуаня; второй интеграл берётся по интервалу $k_0 \in (k_{\text{m}1}, k_{\text{m}2}]$, в котором $\mu_{\text{ds}}^1(k_0)$ будет представляться в виде, соответствующем области Стокса –

Вильсона, а все остальные $\mu_{\text{ds}}^{\alpha}(k_0)$ — области Хуаня и т.д. В интервале $k_0 \in (k_{\text{m}n}, \infty)$ все интегралы имеют вид, соответствующий области Стокса – Вильсона. Таким образом, для $F_{\text{ds}}^{\text{coh}}$ получим

$$F_{\text{ds}}^{\text{coh}} = \frac{K^2 \sigma_0^2}{\gamma R_{\text{ip}}} \exp(-\mu_0 l) \left(\sum_{i=0}^{n-1} \exp(-\beta_{5i} + \beta_{4i}) \times \int_{k_{\text{mi}}}^{k_{\text{mi}+1}} \frac{(k_0^2 + \mu^2)^{\beta_{1i}}}{k_0^2 + A_1^2} \exp\left[-\left(\frac{\beta_{3i}}{k_0^2} + \frac{\beta_{2i}}{2} k_0^2\right)\right] dk_0 + \right. \\ \left. + 2 \int_{k_{\text{mn}}}^{\infty} \frac{\exp(-\beta_{3n}/k_0^2)}{k_0^2 + A_1^2} dk_0 \right),$$

где

$$\beta_{1i} = \sum_{j=i+1}^n F_j l b_{2j}, \quad \beta_{2i} = \sum_{j=i+1}^n \frac{F_j l b_{3j}}{k_{\text{mj}}}, \\ \beta_{3i} = \sum_{j=1}^i F_j l \left(b_{2j} - \frac{1}{2} b_{3j}\right) k_{\text{mj}}^2, \quad \beta_{4i} = \sum_{j=i+1}^n F_j l b_{3j}, \\ \beta_{5i} = \sum_{j=i+1}^n F_j l b_{2j} \ln[e(k_{\text{mj}}^2 + \mu^2)], \\ A_1^2 = \frac{K^2 \sigma_0^2}{\gamma}, \quad F_j = c_j C^2 E^2 m_0.$$

Когда эффективные размеры дефектов намного меньше длины экстинкции, распределение диффузного фона, создаваемого такими дефектами, намного шире когерентного пика, т.е. направления распространения большинства диффузных волн значительно отклоняются от угла Брэгга, тогда при определении интегральной интенсивности диффузного фона можно пренебречь динамическими эффектами в диффузном рассеянии, так как их удельный вклад пренебрежимо мал. Однако когда размеры дефектов соизмеримы с длиной экстинкции, распределение диффузного фона является узким и все диффузно рассеянные волны по направлению распространения мало отличаются от когерентных волн, т.е. они сосредоточены в существенно динамической области. В таком случае необходимо учитывать динамический характер диффузного рассеяния. При этом диффузная составляющая ПИИ имеет вид

$$R_{\text{ID}} = C^2(1 - E^2) F_{\text{ds}}^{\text{diff}} Q l \exp(-\mu_0 l).$$

С учётом динамических эффектов в диффузном рассеянии интегральный фактор экстинкции соответствующей компоненты ПИИ даётся выражением

$$F_{\text{ds}}^{\text{diff}} = \frac{I_{\text{diff}}}{I_0} = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha=1}^n \mu_{\text{ds}}^{\alpha}(k_0) \exp\left(-\sum_{\alpha=1}^n \mu_{\text{ds}}^{\alpha}(k_0)l\right) dk_0 \times \left[\int_{-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha=1}^n \mu_{\text{ds}}^{\alpha}(k_0) dk_0\right]^{-1}. \quad (77)$$

Здесь следует отметить, что справедливо также выражение

$$I_0 = (1 - E^2) R_{\text{ip}}^{\text{kin}} \approx 2L_H R_{\text{ip}}^{\text{kin}}.$$

Учитывая (76) и (77), для I_0 получим

$$\begin{aligned} I_0 &= \sum_{\alpha=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} \mu_{\text{ds}}^{\alpha}(k_0) dk_0 = \\ &= 2 \sum_{\alpha=1}^n F_{\alpha} \left[b_{2\alpha} \left(3k_{\text{mz}} - 2\mu \arctan \frac{k_{\text{mz}}}{\mu} \right) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{5k_{\text{mz}} b_{3\alpha}}{6} + k_{\text{mz}} \left(b_{2\alpha} - \frac{1}{2} b_{3\alpha} \right) \right]. \end{aligned}$$

Упорядочивая k_{mz} так же, как и при вычислении $F_{\text{ds}}^{\text{coh}}$, находим

$$\begin{aligned} F_{\text{ds}}^{\text{diff}} &= \frac{2}{I_0} \left\{ \sum_{i=0}^{n-1} e_i \left[(\beta_{5i} - \beta_{4i}) I_i - \sum_{j=1}^3 \beta_{ij} \frac{\partial I_i}{\partial \beta_{ij}} \right] + \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{\beta_{3n}} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{\beta_{3n}}}{k_{\text{mn}}} \right) \right\}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} I_i &= \int_{k_{\text{mi}}}^{k_{\text{mi}+1}} (x^2 + \mu^2)^{\beta_{5i}} \exp \left[- \left(\frac{\beta_{2i}}{2} x^2 + \frac{\beta_{3i}}{x^2} \right) \right] dx, \\ e_i &= \exp(-\beta_{5i} + \beta_{4i}). \end{aligned}$$

5.2.2. Геометрия Лауэ: толстый кристалл. В случае когерентного фактора при больших эффектах экстинкции в геометрии Лауэ имеем

$$F_{\text{ds}}^{\text{coh}} = \frac{1}{R_{\text{ip}}} \int_{-\infty}^{\infty} R_{\text{p}}(y) \exp \left[-\mu_{\text{ds}}(y) l \left(1 - \frac{\xi C}{\sqrt{1+y^2}} \right) \right] dy, \quad (78)$$

где

$$R_{\text{ip}} = \frac{B i_0 (\mu_H l C)}{\sqrt{2\pi\mu_H l C}} \exp [-(\mu_0 - \mu_H C) l]$$

— интегральная отражательная способность в случае лауэ-дифракции в приближении толстого идеального кристалла,

$$B = \frac{\pi C E |\chi_{\text{Hr}}|}{2 \sin(2\theta_{\text{B}})}, \quad i_0(x) = 1 + \frac{1}{8x} + \frac{9}{128x^2} + \dots$$

Для вычисления диффузного фактора экстинкции можно сделать некоторые упрощения:

$$\begin{aligned} |A'_\tau - A_\delta|^2 &\approx \\ &\approx \frac{1}{4\gamma_0^2} \left[(\alpha - \alpha') + (-1)^\delta \sqrt{\alpha^2 + \alpha_0^2} - (-1)^\tau \sqrt{\alpha'^2 + \alpha_0^2} \right]^2, \\ |2\gamma_0 A_{\delta'} - \chi_0|^2 &\approx \left(\alpha + (-1)^{\delta'} \sqrt{\alpha^2 + \alpha_0^2} \right)^2, \\ |A_1 - A_2|^2 &\approx \frac{1}{\gamma_0^2} (\alpha^2 + \alpha_0^2), \quad |A'_1 - A'_2|^2 \approx \frac{1}{\gamma_0^2} (\alpha'^2 + \alpha_0^2), \\ D_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') &= \\ &= \frac{\gamma_0^2}{4} \frac{1}{(\alpha^2 + \alpha_0^2)(\alpha'^2 + \alpha_0^2)} \left(\alpha + (-1)^{\delta'} \sqrt{\alpha^2 + \alpha_0^2} \right)^2 \times \\ &\times \left[(\alpha - \alpha') + (-1)^\delta \sqrt{\alpha^2 + \alpha_0^2} - (-1)^\tau \sqrt{\alpha'^2 + \alpha_0^2} \right]^2. \end{aligned}$$

Выражение для $\rho_{\delta\tau}(k_0, k')$ можно привести к следующему виду:

$$\begin{aligned} \rho_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') &= \frac{1}{2Kl \operatorname{Im}(A_\delta - A'_\tau)} = \\ &= \left[(\mu_{\text{ds}}(\alpha) - \mu_{\text{ds}}(\alpha')) l + \frac{\beta_0 K l}{2} \left(\frac{(-1)^\delta}{\sqrt{\alpha^2 + \alpha_0^2}} - \frac{(-1)^\tau}{\sqrt{\alpha'^2 + \alpha_0^2}} \right) \right]^{-1}. \end{aligned}$$

Перейдём в (69) от интегрирования по $d\mathbf{k}$ к интегралу по $d\theta d\theta' d\varphi'$, где φ' — угол отклонения диффузно рассеянной волны от плоскости дифракции. Выразим компоненты волнового вектора диффузной волны в вакууме $\mathbf{k}$ через угловые переменные $\theta, \theta', \varphi'$ (см. рис. 4):

$$k_x = K(\theta' + 2\theta \cos^2 \theta_{\text{B}}), \quad k_y = K\varphi', \quad k_z = -K\theta \sin 2\theta_{\text{B}}.$$

Таким образом, переходя в интеграле (62) к угловым переменным, для элемента интегрирования получим

$$d\mathbf{k} = dk_x dk_y dk_z = K^3 \sin 2\theta_{\text{B}} d\theta d\theta' d\varphi'.$$

При наличии в кристалле дефектов нескольких типов, необходимо, так же как и в случае когерентной компоненты, заменить дифференциальный коэффициент экстинкции суммой коэффициентов экстинкции от каждого типа дефектов и, кроме того, необходимо также заменить выражение для $F(\mathbf{q})$ суммой таких выражений от каждого типа дефектов, т.е.

$$F(\mathbf{q}) = \sum_{\alpha} F_{\alpha}(\mathbf{q}).$$

Такие замены справедливы, так как величины, квадратичные по полям смещений от дефектов разных типов, складываются аддитивно (при этом предполагается, что парными корреляциями между смещениями от дефектов различного типа можно пренебречь, что справедливо в случае небольшой объёмной доли дефектов, когда $c \ll 1$).

Интегрируя (69) по φ' , получим

$$\begin{aligned} I_{\delta\tau} &= \int D_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') F(\alpha, \alpha') \rho_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') \times \\ &\times \left[\exp(2Klm_{\delta}(\alpha)) - \exp(2Klm_{\tau}(\alpha')) \right] d\theta d\theta', \quad (79) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} F(\alpha, \alpha') &= \\ &= \begin{cases} f_{\text{H}} \left(\sqrt{k_{\text{m}}^2 - k_{\parallel}^2} \right) - f_{\text{H}}(0) + f_{\text{sw}}(\infty) - f_{\text{sw}} \left(\sqrt{k_{\text{m}}^2 - k_{\parallel}^2} \right) & \text{при } |k_{\parallel}| < k_{\text{m}}, \\ f_{\text{sw}}(\infty) - f_{\text{sw}}(0) & \text{при } |k_{\parallel}| \geq k_{\text{m}}, \end{cases} \\ f_{\text{H}}(x) &= \frac{B_2 k_{\parallel}^2 x}{K(k_{\parallel}^2 + \mu_1^2)(k_{\parallel}^2 + x^2 + \mu_1^2)} + \\ &+ \frac{B_2 k_{\parallel}^2 + 2B_1(k_{\parallel}^2 + \mu_1^2)}{K(k_{\parallel}^2 + \mu_1^2)^{3/2}} \arctan \frac{x}{\sqrt{k_{\parallel}^2 + \mu_1^2}}, \\ f_{\text{sw}}(x) &= \frac{k_{\text{m}}^2}{4K} \left\{ \frac{x}{(k_{\parallel}^2 + \mu_1^2)^2 (k_{\parallel}^2 + x^2 + \mu_1^2)^2} \times \right. \\ &\times [B_2 k_{\parallel}^2 (5k_{\parallel}^2 + 3x^2 + \mu_1^2) + 4B_1(k_{\parallel}^2 + x^2 + \mu_1^2)(k_{\parallel}^2 + \mu_1^2)] + \\ &\left. + \frac{3B_2 k_{\parallel}^2 + 4B_1(k_{\parallel}^2 + \mu_1^2)}{(k_{\parallel}^2 + \mu_1^2)^{5/2}} \arctan \frac{x}{\sqrt{k_{\parallel}^2 + \mu_1^2}} \right\}, \\ k_{\parallel} &= \sqrt{k_x^2 + k_z^2}, \quad k_{\perp} = -k_x \sin \theta_{\text{B}} + k_z \cos \theta_{\text{B}}. \end{aligned}$$

5.2.3. Геометрия Брэгга: тонкий и толстый кристаллы. Для диффузного интегрального фактора экстинкции в геометрии Брэгга согласно (74) имеем

$$F_{\text{ds}}^{\text{diff}} = \frac{1}{2\gamma_0 R_{\text{ID}}^{\text{kin}}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1 - \exp(-2\mu t)}{\mu} F_{\text{dyn}} \left(\sum_{\alpha} \mu_{\text{ds}}^{\alpha}(k_0) \right) dk_0. \quad (80)$$

В предельных случаях тонкого и толстого кристаллов экспонента в (80) превратится соответственно в 0 и $1 - 2\mu_1 t$.

Когерентный и диффузный факторы в геометрии Брэгга нужно находить численным интегрированием выражений (71), (72) и (80) для приближений тонкого и толстого кристаллов соответственно. Следует учесть, однако, что факторы экстинкции необходимо интегрировать с учётом ориентационной зависимости интерференционного коэффициента поглощения в случае присутствия в кристалле больших дефектов, которая существенно влияет на ПИИ [60].

6. Метод интегральной диффузно-динамической многопараметрической дифрактометрии (ИДДМД)

6.1. Физические основы метода диффузно-динамической многопараметрической дифрактометрии

На рисунке 10 приведена схема картины рассеяния в идеальном кристалле и для кристалла с дефектами (в верхнем правом углу экрана).

Кинематическая теория Кривоглаза даёт следующие результаты для ПИИ кристалла с дефектами (R_i) [15, 24]:

$$R_i = R_{\text{IB}} + R_{\text{ID}}, \quad (81)$$

$$R_{\text{IB}} = R_{\text{ip}} \exp(-2L), \quad (82)$$

$$R_{\text{ID}} = R_{\text{ip}} [1 - \exp(-2L)], \quad (83)$$

$$R_{\text{ip}} = \frac{2CQt}{\gamma_0}, \quad (84)$$

$$Q = \frac{(\pi|\chi_{\text{Hr}}|)^2}{\lambda \sin(2\theta_{\text{B}})}, \quad (85)$$

где R_{ip} — интегральная интенсивность рассеяния в идеальных кристаллах (без дефектов), χ_{Hr} — веществен-

ная часть фурье-компоненты поляризуемости кристалла, θ_{B} — угол Брэгга, λ — длина волны используемого излучения, t — толщина кристалла, C — поляризационный множитель. Здесь следует особо подчеркнуть, что в выражениях (82) и (83) для брэгговской (R_{IB}) и диффузной (R_{ID}) составляющих ПИИ зависящим от условий дифракции является только множитель R_{ip} , который в силу своей природы не зависит от структуры дефектов в кристалле. При этом от характеристик структуры дефектов кристаллической решётки зависят лишь множители, в которые входит фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера ($E = \exp(-L)$), определяемый независимо от условий дифракции для каждого рефлекса.

Следующим важным обстоятельством оказывается то, что интегральная интенсивность рассеяния в кристаллах с дефектами характеризуется двумя интегральными параметрами, которые целесообразно ввести следующим образом. Первый параметр — это общая яркость картины (размытого лауэ-пятна, изображённого в правом верхнем углу экрана на рис. 10), т.е. полная интегральная интенсивность отражения R_i , равная сумме брэгговской и диффузной составляющих (81). Для удобства дальнейшего рассмотрения этот параметр целесообразно нормировать на общую яркость картины в идеальном кристалле (R_{ip}). Второй параметр — это удельный вклад диффузной составляющей или соотношение диффузной и брэгговской составляющих ($R_{\text{ID}}/R_{\text{IB}}$). Из выражений (81)–(83) следует, что в кинематической теории неидеальных кристаллов

$$R_i = R_{\text{ip}}, \quad \text{или} \quad \frac{R_i}{R_{\text{ip}}} = 1, \quad (86)$$

$$\frac{R_{\text{ID}}}{R_{\text{IB}}} = \frac{1 - \exp(-2L)}{\exp(-2L)} \approx 2L, \quad (87)$$

т.е. для каждого выбранного отражения полная интегральная интенсивность не зависит от степени искажённости кристаллической решётки, а единственным структурно-чувствительным фактором является, следовательно, второй параметр ($R_{\text{ID}}/R_{\text{IB}}$), не зависящий от условий дифракции.

Таким образом, из выражений (86) и (87) для этих двух параметров вытекают два соответствующих закона сохранения кинематической теории.

Первый закон сохранения отражает независимость полной интегральной интенсивности R_i (первого параметра) от характеристик структуры дефектов кристалла, т.е. в кинематической теории R_i для кристалла с дефектами остаётся таким же, как в идеальном кристалле (R_{ip}), и, следовательно, зависит только от условий дифракции. Однако нормирование этого параметра на R_{ip} приводит к потере его зависимости и от условий дифракции и делает его универсальной константой, равной единице в кинематической теории, т.е. полностью неинформативным.

Второй закон сохранения кинематической теории указывает на независимость для каждого рефлекса относительного вклада диффузной составляющей (второго параметра) от условий дифракции. Таким образом, в кинематическом случае существует только этот единственный для любых условий дифракции структурно-чувствительный параметр. Необходимо отметить, что, как следует из анализа формул (81)–(87), законы сохранения (86) и (87) оказываются возможными только благодаря равенству множителей в выражениях для

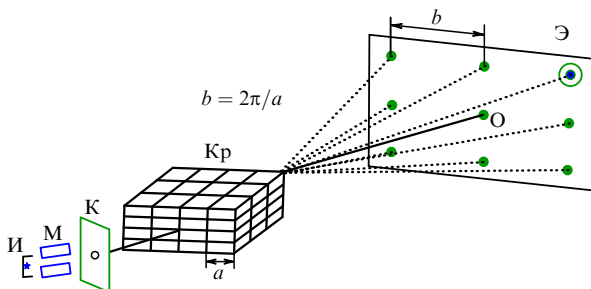


Рис. 10. Картины рассеяния в идеальном кристалле (тёмные пятна на экране (Э), размеры и форма которых определяются в кинематической теории только размерами и формой образца), и в кристалле (Кр) с дефектами. Тёмное пятно в правом верхнем углу экрана соответствует распределению в обратном пространстве брэгговской компоненты дифрагированной интенсивности, а более светлое пятно вокруг него — распределению диффузной составляющей. И — источник, М — монохроматор, К — коллиматор.

интенсивностей брэгговской и диффузной составляющих, которые описывают их зависимости от условий дифракции. Оба эти множителя оказываются равными интегральной интенсивности дифрагированного излучения в идеальном кристалле для соответствующего рефлекса. Благодаря этому при сложении брэгговской и диффузной составляющих сокращается часть, зависящая от характеристик дефектов, а при их делении сокращается зависимость от условий дифракции, что и обеспечивает в кинематической теории появление двух указанных законов сохранения.

Анализ выражений динамической теории рассеяния (76)–(80) показывает, что оба введенных выше интегральных параметра, в отличие от таковых кинематической теории (81)–(87), картины рассеяния (сумма и отношение диффузной и брэгговской составляющих R_i) при динамической дифракции оказываются зависящими как от параметров дефектной структуры, так и от условий дифракции. При этом выражения (76)–(80) демонстрируют принципиальное различие между зависимостями брэгговской и диффузной составляющих R_i не только от параметров дефектов, но и от условий дифракции. Таким образом, вследствие учёта многократного перерассеяния брэгговской и диффузной составляющих и установленного различия в проявлении эффектов многократности для этих составляющих, которое и обуславливает их различную зависимость от условий динамической дифракции, указанные выше законы сохранения кинематической теории при динамической дифракции нарушаются.

Установленное в работе [4] существование в кинематической теории рассеяния в кристаллах с дефектами и сверхструктурой двух законов сохранения для двух интегральных параметров картины рассеяния является причиной, ограничивающей информативность кинематической картины рассеяния. Учитывая, что распределения этих параметров в пространстве обратной решётки являются для первого параметра самой картиной рассеяния, а для второго — распределением её диффузной составляющей, можно сделать выводы о причинах как ограничения информативности самой картины дифракции в условиях кинематического рассеяния, так и принципиальной неадекватности применения кинематического рассмотрения для динамической дифракции не только в случае интегральных подходов, но и в случае дифференциально-интегральных и дифференциальных методов дифрактометрии.

Первый закон сохранения кинематической теории, указывающий на то, что первый из параметров (см. первое выражение в (86)) зависит только от условий дифракции (длины волны излучения, толщины кристалла, геометрии дифракции и т.д.), но не от параметров структурного совершенства и остаётся таким же, как и в идеальном кристалле, при произвольных отклонениях от периодичности кристаллической решётки, был установлен ранее [30–42] как закон сохранения полной интегральной интенсивности дифрагированного излучения в несовершенных кристаллах. В результате структурно-чувствительным интегральным параметром оказывался только второй параметр (87), сводящийся в кинематической теории при малых L к удвоенному показателю фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера, т.е. $R_{ID}/R_{IB} \approx 2L$.

На основе анализа параметра (87) М.А. Кривоглаз провёл классификацию дефектов кристаллов по характеру их влияния на картину рассеяния [15]. При этом кинематическая картина рассеяния оказалась фурье-изображением кристалла с дефектами, однозначно определяемым не зависящим от условий дифракции вторым параметром и его распределением в пространстве обратной решётки. Неизменность этого параметра при изменении условий дифракции является неизбежным следствием приближения однократного рассеяния и составляет суть второго закона сохранения, который, как и первый закон сохранения, автоматически вытекает из кинематической теории. Однако второй закон сохранения кинематической теории ранее не был установлен. Впервые он был сформулирован в работе [4].

Рисунок 11, приведённый в качестве примера, иллюстрирует радикальное изменение при динамической дифракции характера влияния дефектов на интегральную интенсивность рассеяния (первый параметр) в зависимости от радиуса кривизны макроскопического упругого изгиба r кристалла, а также изменение характера влияния дефектов на эти деформационные зависимости (ДЗ) при изменении других условий дифракции, а именно при переходе от предельного случая динамической дифракции в "тонком" кристалле (рис. 11а), в котором наблюдается существенное увеличение полной интегральной интенсивности за счёт дефектов относительно таковой для идеального кристалла, к предельному случаю "толстого" кристалла (рис. 11б), в котором она существенно уменьшается из-за наличия дефектов [3, 39]. Это обуславливается принципиально различными характерами влияния на брэгговскую и диффузную составляющие динамической картины дифракции как радиуса кривизны упругого изгиба, так и толщины кристалла, что иллюстрируется на рис. 11; этим различием и его следствиями объясняется природа нарушения при динамической дифракции второго закона сохранения, а как следствие, и первого.

В результате общая яркость динамической картины рассеяния, нормированная на яркость картины для соответствующего идеального кристалла, и характеры возникших даже после указанной нормировки зависимостей общей яркости и её нормированных компонент от условий дифракции становятся уникально чувствительными к характеристикам дефектов или параметрам сверхструктуры, так как оказываются принципиально различными и этим обеспечивают изменение вследствие изменения условий дифракции характеров влияния дефектов на эти зависимости.

Именно это открытое уникальное явление, а также явление изменения избирательности чувствительности к дефектам разного типа при изменении условий дифракции [41, 42] были положены в основу при создании комплекса новых, принципиально отсутствующих при кинематическом рассмотрении, интегральных методов ДДМД [2, 3, 30–42].

В работах [1, 3] показано, что нелинейные эффекты многократности рассеяния обуславливают принципиально различные для брэгговской и диффузной составляющих динамической картины рассеяния, а также различные для удельных вкладов в картину от дефектов разного типа, зависимости их от условий динамической дифракции (длины волны излучения, толщины кристалла, геометрии дифракции на прохождение или на

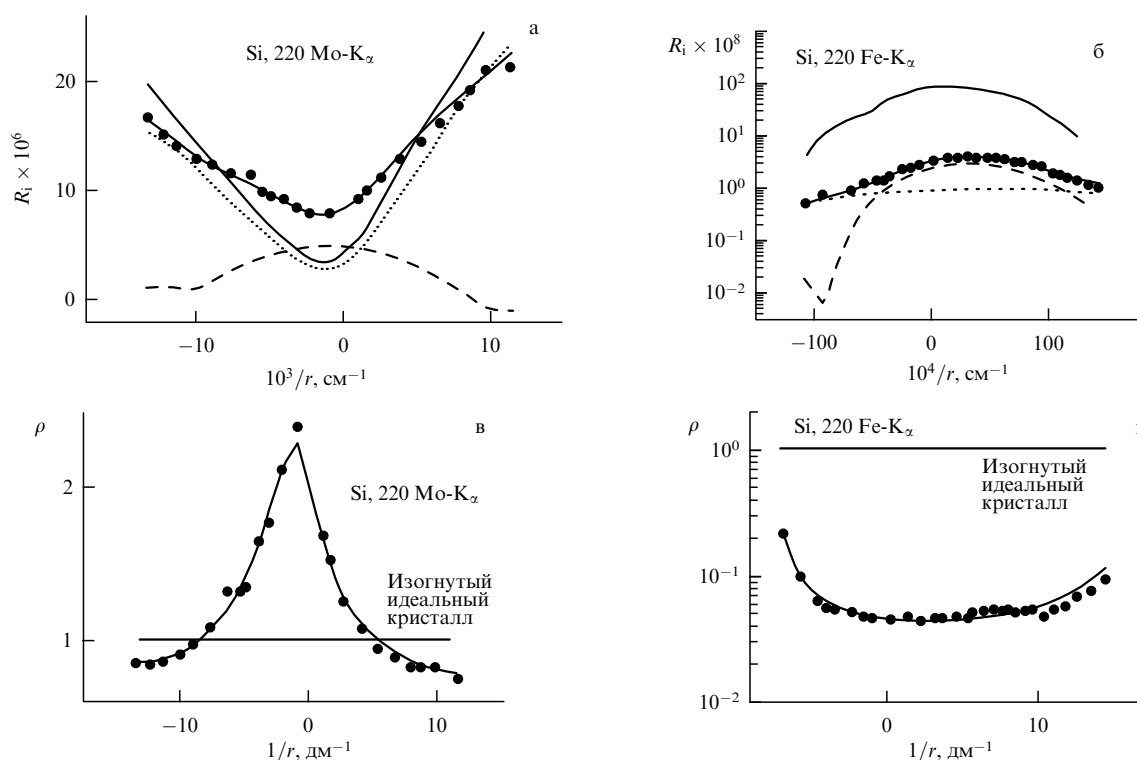


Рис. 11. Теоретические (сплошные жирные кривые) и экспериментальные (символы) значения деформационных зависимостей ПИИ для кристаллов Si с дефектами: (а) тонкий кристалл, (б) толстый кристалл, и значения нормированной ПИИ ($\rho = R_i/R_{ip}$): (в) тонкий кристалл, (г) толстый кристалл. Пунктирные кривые представляют рассчитанные ДЗ когерентной компоненты ПИИ, штриховые — диффузной, сплошные тонкие кривые — ДЗ ПИИ кристалла без дефектов.

отражение, параметра асимметрии отражения, азимутального угла, радиуса кривизны упругого изгиба кристалла и т.д.).

Как видно из рис. 11, именно это различие между зависимостями брэгговской и диффузной составляющих и приводит к нарушению при динамической дифракции второго закона сохранения кинематической теории, а также является причиной нарушения и первого закона сохранения, т.е. этим раскрывается физическая природа установленного ранее явления уникальной чувствительности к искажениям структуры нормированной общей яркости динамической картины рассеяния. Во-первых, в целом, при динамической дифракции оба интегральных параметра динамической картины рассеяния, вводящиеся аналогично (86) и (87), становятся структурно-чувствительными. Во-вторых, что более существенно, количество измеряемых экспериментально пар этих параметров теперь равно количеству условий динамической дифракции, которые могут быть экспериментально реализованы, т.е. указанные структурно-чувствительные параметры становятся многомерными, а сама динамическая картина оказывается многообразной.

Главной особенностью и преимуществом разработанного на этой основе нового поколения диагностики (ДДМД) являются обоснованные в [1–3, 31] и в настоящем обзоре необходимость и уникальная возможность комбинированной компьютерной обработки результатов экспериментальных измерений параметров картины рассеяния в различных условиях динамической дифракции и при использовании различных методик: интегральных, дифференциально-интегральных и дифференциальных, т.е. одно-, двух- и трёхосевых. Основой

новых принципов высокоинформативной диагностики [1–3, 31–33] является обеспечение возможности экспериментального измерения и теоретического анализа необходимого набора указанных выше пар не только интегральных параметров, но и характеристик их распределений в пространстве обратной решётки. То есть речь идёт не только о самих интегральных параметрах, но и о дифференциально-интегральных и дифференциальных характеристиках распределения этих двух главных параметров динамических картин рассеяния, а именно о распределении в обратном пространстве яркости картины дифракции в целом и её диффузной составляющей в частности.

6.2. Толщинные и спектральные зависимости полной интегральной интенсивности

Установление различий в механизмах формирования эффектов многократности рассеяния для брэгговской и диффузной составляющих, как уже отмечалось, привело к открытию ещё в 1980-е годы качественно новых эффектов динамической дифракции [37, 38, 57, 58]. Одним из ярких примеров этого является установление нарушения при динамической дифракции справедливого при кинематическом рассеянии закона сохранения (независимости от искажений кристаллов) полной (сумма брэгговской и диффузной составляющих) интегральной отражательной способности кристаллов с дефектами (первый закон сохранения кинематической теории). Это явление обусловило возникновение [1–8, 30–40] уникально чувствительных к дефектам толщинных, спектральных, азимутальных, деформационных и других зависимостей ПИИ, которые могут быть экспрессно

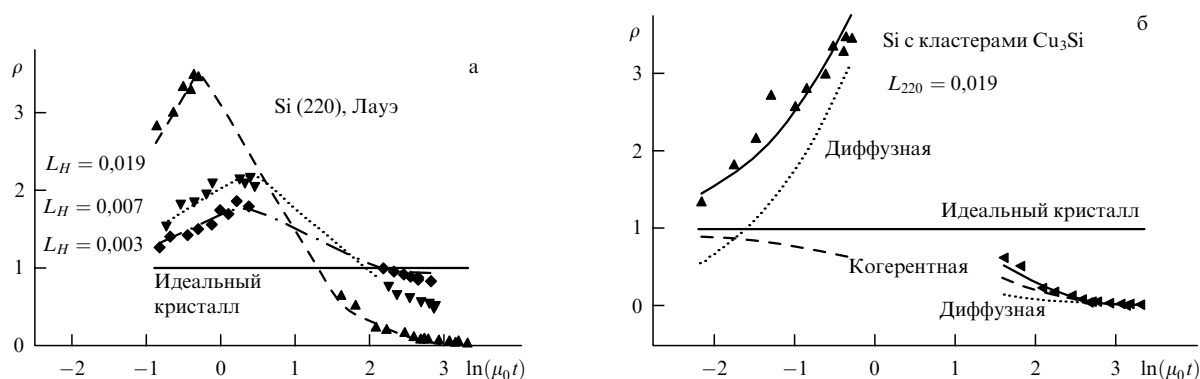


Рис. 12. Зависимости нормированной ПИИ ρ (отношения ПИИ исследуемого реального кристалла R_i к ПИИ для идеального $R_{i\text{perf}}$) от величины $\mu_0 t$. (а) Кривые — результаты расчётов, различными символами показаны результаты измерения ПИИ для трёх образцов в приближениях тонкого (с использованием Mo-K α -излучения, левая часть зависимостей) и толстого (с использованием Cu-K α -излучения и Fe-K α -излучения, правая часть зависимостей) кристаллов. (б) Рассчитанные (кривые) и экспериментальные (символы) толщинные зависимости нормированной ПИИ монокристалла Si. Штриховые кривые — толщинные зависимости когерентной составляющей, пунктирные кривые — диффузной составляющей. Параметры дефектной структуры кристалла: сферические кластеры Cu_3Si с $R = 0,035$ мкм, $\varepsilon = 0,13$ и $c = 9 \times 10^{10} \text{ см}^{-3}$.

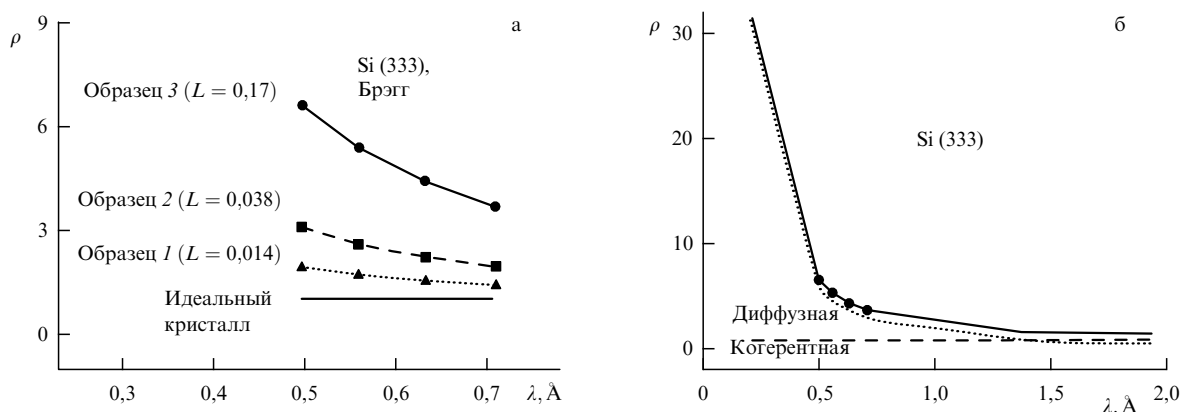


Рис. 13. (а) Зависимость в случае брэгг-дифракции нормированной ПИИ дефектных образцов Si от длины волны излучения. Образцы 1 и 2 были отожжены на воздухе в течение 4 и 6 ч при температуре 1000 °С и 1080 °С соответственно; образец 3 был отожжён в атмосфере азота в течение 7 ч при температуре 1250 °С. (б) Рассчитанная (сплошная кривая) и экспериментальная (кружки) спектральные зависимости нормированной ПИИ монокристалла Si. Штриховая кривая — рассчитанная спектральная зависимость когерентной составляющей, пунктирная — диффузной. Расчёты проводились при параметрах динамического рассеяния $L_H = 0,17$, $\mu^*/\mu_0 = 1,1$.

измерены и интерпретированы с использованием полученных авторами оригинальных аналитических формул, связывающих их с характеристиками дефектов.

На рисунке 12а представлены результаты экспериментального подтверждения [30–40, 58] толщинной зависимости вклада ДР и нарушения закона сохранения ПИИ (символами показаны результаты эксперимента, кривыми — теории). ПИИ нормирована на ПИИ для идеального кристалла, что в кинематической теории всегда даёт единицу (см. формулу (86)).

Следует отметить, что на рис. 12а горизонтальная прямая соответствует идеальному кристаллу при динамическом рассмотрении ($R_{i\text{perf}}$) или любому (идеальному и неидеальному) кристаллу в кинематическом случае, т.е. в последнем случае ПИИ принципиально нечувствительна к искажениям кристалла.

Из рисунка 12б, на котором представлены толщинные зависимости удельных вкладов диффузной и когерентной составляющих ПИИ, видно, что именно изменение относительного вклада диффузной составляющей ПИИ (непрерывное с изменением толщины кристалла и

дискретное при переходе от приближения тонкого кристалла к приближению толстого кристалла), обусловленное принципиально различным характером толщинных зависимостей составляющих ПИИ, а также изменением этого характера при переходе от предельного случая тонкого кристалла к случаю толстого, определяет её уникальную чувствительность к дефектам.

На рисунке 13 представлены спектральные зависимости ПИИ неидеальных кристаллов, служащие экспериментальным подтверждением различия функциональных зависимостей ПИИ в приближениях тонкого (область коротких длин волн) и толстого (длинноволновая часть спектра) кристаллов в случае брэгг-дифракции.

Как следует из представленных результатов, при дифракции в геометрии Брэгга это различие выражено менее ярко, чем в случае лауэ-дифракции. Но и в последнем случае высокая чувствительность динамической дифракции к различным типам дефектов, присутствующим в исследуемых образцах, сохраняется и существенно возрастает с увеличением вклада диффузной составляющей при уменьшении длины волны, т.е. с увеличением

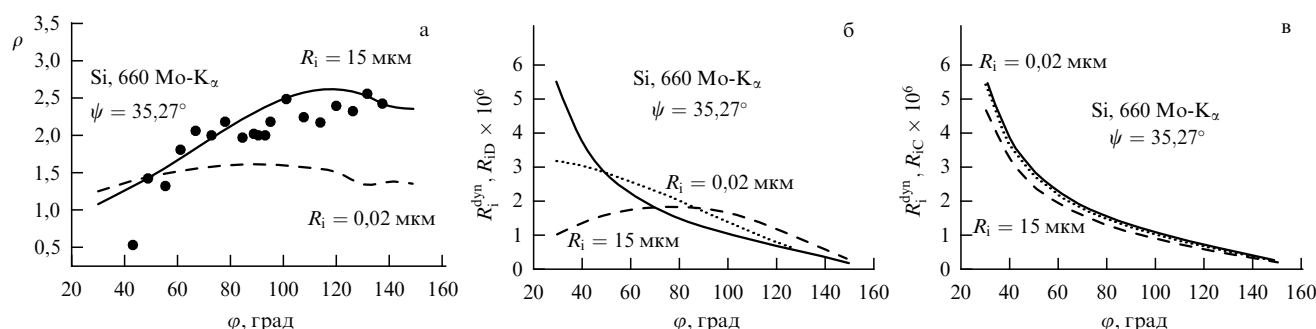


Рис. 14. (а) Экспериментальная (кружки) и рассчитанная с использованием выражений (72), (80) при значениях среднего радиуса дислокационных петель $R = 15$ мкм (сплошная кривая) и $R = 0,02$ мкм (штриховая кривая) азимутальные зависимости нормированной ПИИ. (б, в) Рассчитанные азимутальные зависимости ПИИ для идеального кристалла R_i^{dyn} (сплошные кривые) и рассчитанные с использованием выражений (72), (80) азимутальные зависимости (штриховые и пунктирные кривые) диффузной R_{ID} (б) и когерентной R_{IC} (в) составляющих ПИИ.

длины абсорбции и, следовательно, объёма, в котором формируется диффузное рассеяние.

Из выражений (76)–(80) динамической теории и проведённого анализа видно, что брэгговская и диффузная составляющие картины рассеяния имеют существенно различный характер зависимости от параметров дефектов и, что особенно важно, этот характер зависит как от самих дефектов, так и от условий динамической дифракции (различные геометрии дифракции, случаи тонкого и толстого кристаллов и др.). Главный вывод состоит в том, что зависимости от условий динамической дифракции для брэгговской и диффузной составляющих принципиально различны, следствием чего и являются все отмеченные эффекты и особенности их проявления.

6.3. Эффект асимметрии азимутальной зависимости нормированной полной интегральной интенсивности

Как известно, азимутальные зависимости нормированной ПИИ (нормированной на ПИИ идеального кристалла) для различных типов искажений кристаллической решётки являются симметричными относительно угла 90° . К таким типам искажений кристалла относятся: дефекты кулоновского типа (дислокационные петли, кластеры и пр.) небольших размеров, $R \ll \Lambda$; нарушенный поверхностный слой.

Для исследования вышеуказанной симметрии азимутальной зависимости были измерены азимутальные зависимости для кристалла с дефектами. Образец для исследования был вырезан из слитка CZSi (р-тип проводимости, $\rho \approx 10$ Ом см, ось роста была направлена вдоль оси $\langle 111 \rangle$, концентрации кислорода и углерода составляли $\approx 1 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и $\approx 10^{16} \text{ см}^{-3}$ соответственно). Образец был приготовлен в форме пластины толщиной $t = 4000$ мкм, параллельной плоскости (111) . Нарушения структуры поверхности, возникающие при механической обработке, устранялись химико-механической полировкой с последующим химическим травлением до глубины ≈ 10 мкм.

Оказалось, что в результате наличия в этом кристалле дефектов больших размеров (дислокационных петель с радиусом 15 мкм) азимутальная зависимость нормированной ПИИ является существенно несимметричной (рис. 14а), тогда как расчёты с помощью формул (66), (68) дают симметричный результат даже при подстановке в эти выражения параметров больших дефектов. Однако, поскольку размеры дислокационных петель в

исследуемом образце превышают длину экстинкции, указанные формулы уже не дают корректного описания ПИИ, поскольку они выводились в предположении малых дефектов, что позволило пренебречь процессами перерассеяния диффузных волн на периодической части кристаллического потенциала. В случае больших дефектов, как упоминалось выше, для расчёта ПИИ необходимо использовать выражения (72) и (80).

Как оказалось, результат, полученный с использованием обобщённых формул, также даёт асимметрию азимутальной зависимости нормированной ПИИ и практически совпадает с данными эксперимента (рис. 14а, сплошная кривая).

При анализе причины асимметрии азимутальной зависимости было установлено, что этот эффект вызван поведением диффузной компоненты ПИИ. То есть установлено, что присутствие в кристалле дефектов больших размеров вызывает симметричность азимутальной зависимости ненормированной диффузной компоненты (в случае малых дефектов она асимметрична), тогда как азимутальная зависимость когерентной компоненты остаётся асимметричной (как и в случае идеального кристалла), что показано на рис. 14б, в.

Таким образом, нормируя азимутальную зависимость ПИИ кристалла с дефектами на аналогичную зависимость ПИИ идеального кристалла, получим симметричную зависимость в случае малых дефектов и несимметричную в случае больших. Следовательно, благодаря принципиальному различию характера азимутальной зависимости в случаях малых и больших дефектов и проявлению избирательной чувствительности формы зависимости к большим дефектам возникает возможность определения их параметров. Параметры малых дефектов, если они имеются в кристалле, можно определить, используя другие условия дифракции для того же образца.

6.4. Деформационные зависимости интегральной интенсивности рассеяния кристаллами с дефектами для лауэ-дифракции в области К-края поглощения

Для изучения диагностических возможностей при указанных условиях необходимо сначала построить соответствующую теоретическую модель. В [61] фитированием деформационных зависимостей (ДЗ) ПИИ симметричного 220-лауэ-отражения от монокристалла кремния, измеренных при использовании характеристического

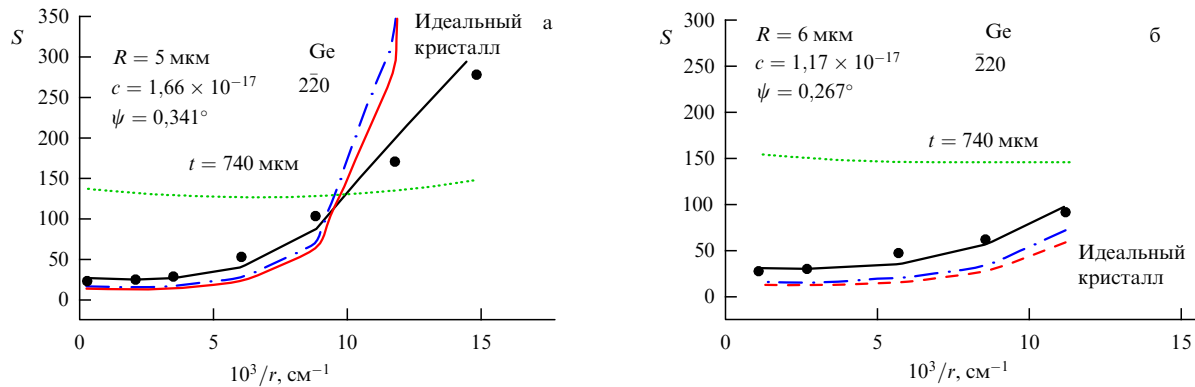


Рис. 15. Рассчитанные (кривые) по модели, основанной на формулах (88), и измеренные (символы) в работе [54] зависимости скачка ПИИ от деформации у К-края поглощения для кристалла Ge толщиной $t = 740$ мкм. Сплошные кривые — ДЗ скачка ПИИ, штриховые — ДЗ скачка её когерентной составляющей, пунктирные — ДЗ скачка её диффузной составляющей, штрихпунктирные — ДЗ скачка ПИИ для идеального кристалла; c — вероятность замещения дефектом узла решётки.

Fe-K $_{\alpha}$ -излучения, получены значения параметров феноменологической модели ПИИ изогнутого толстого кристалла с хаотически распределёнными дефектами. Полученная на её основе соответствующая модель для скачка (S) ПИИ вблизи К-края поглощения имеет вид [7]

$$S = \frac{R_i(\lambda_1)}{R_i(\lambda_2)},$$

где $\lambda_1 = 0,1139$ нм, $\lambda_2 = 0,1094$ нм,

$$R_i(\lambda) \equiv R_i = R_{i\text{coh}} [1 + 0,074 (B T \mu_0 l)] \times \exp [-0,00604 (B T \mu_0 l)^2] + R_{i\text{diff}} [1 + 0,0157 (B T \mu_0 l)] \exp [-0,00044 (B T \mu_0 l)^2], \quad (88)$$

$$B = \frac{\lambda^2 \sin \psi [1 + \gamma_1 \gamma_2 (1 + \nu)]}{2\pi |\chi_{Hr}|^2 r d}, \quad T = \frac{\pi t |\chi_{Hr}|}{\lambda \sqrt{\gamma_1 \gamma_2}},$$

$\gamma_1 = \cos(\theta_B + \psi)$, $\gamma_2 = \cos(\theta_B - \psi)$, r — радиус кривизны цилиндрического изгиба кристалла, $d = a/(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$, a — постоянная решётки, h, k, l — индексы Миллера, $R_{i\text{coh}} = E R_{ip} F_{ds}^{\text{coh}}$ и $R_{i\text{diff}} = R_{i\text{kin}} F_{ds}^{\text{diff}}$ — соответственно когерентная и диффузная компоненты интегральной интенсивности в неизогнутом кристалле, в которых факторы экстинкции определяются выражениями (78) и (70) при учёте (79), E — фактор Кривоглаза — Дебая — Валлера.

Результаты расчётов по модели (88) при различных значениях параметра асимметрии ψ для отражений $[2\bar{2}0]$ и $[220]$ представлены на рис. 15.

Из рисунка 15 видно, что чем больше деформация, тем заметнее отличие ДЗ скачка ПИИ от рассчитанного ДЗ скачка ПИИ для идеального кристалла. Видно, что это является следствием кардинального различия характера ДЗ скачков для когерентной и диффузной составляющих ПИИ и, возможно, достаточно заметным вкладом диффузной составляющей.

На рисунке 16 показаны результаты расчётов ДЗ скачка ПИИ в кристаллах с дефектами, нормированной на ДЗ скачка ПИИ для идеального кристалла.

Из рисунка 16 видно, что чем больше толщина кристалла, тем сильнее влияние дефектов на деформационную зависимость ПИИ. При максимальной толщине кристалла 740 мкм, если в неизогнутом кристалле

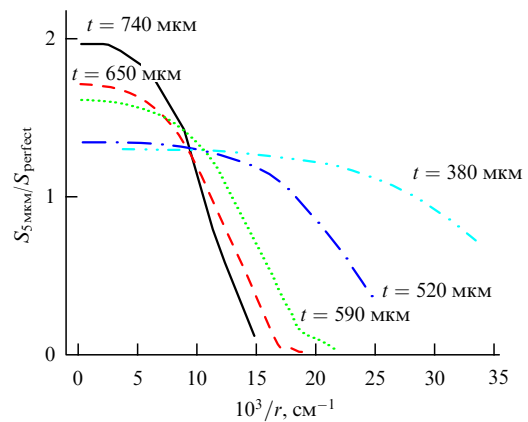


Рис. 16. Рассчитанные по формулам (88) нормированные на ДЗ скачка ПИИ в идеальных кристаллах ДЗ скачка ПИИ в кристаллах с дефектами при различных толщинах кристаллов.

величина скачка ПИИ из-за наличия дефектов возрастает в два раза, то с увеличением степени изгиба её чувствительность к дефектам сначала уменьшается до нуля, а затем при дальнейшем увеличении степени изгиба величина скачка уменьшается на два порядка, а чувствительность к дефектам возрастает на два порядка.

Из рисунка 17 видно, что несмотря на малый угол наклона отражающей плоскости к нормали к поверхности кристалла деформационные зависимости ПИИ в идеальном кристалле, когерентной составляющей ПИИ и самой ПИИ в кристаллах с дефектами для коротковолновой границы К-края поглощения резко выражены.

Это обусловлено эффектом аномального прохождения, который ослабевает с уменьшением эффективной толщины ($\mu_0 t$). В то же время из рис. 17 видно, что вследствие малости угла наклона отражающей плоскости к нормали к поверхности кристалла деформационные зависимости когерентной и диффузной составляющих ПИИ для длинноволновой границы К-края поглощения, а также для диффузной составляющей у коротковолновой границы К-края поглощения практически отсутствуют. Это обусловлено изменением результатов конкуренции с изменением $\mu_0 t$ вкладов ДЗ отражающей и поглощающей способностей как для брэгговской, так и для диффузной составляющих в результирующую ДЗ.

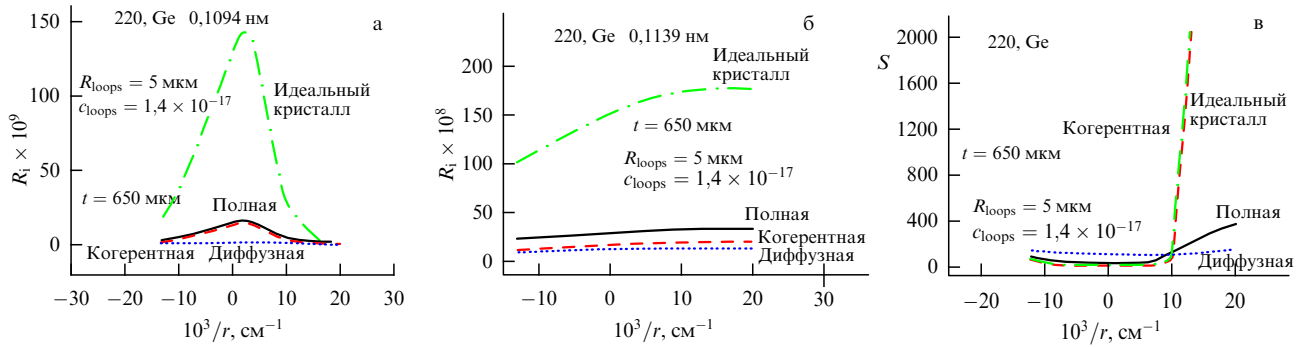


Рис. 17. Рассчитанные по модели, основанной на (88), деформационные зависимости ПИИ в идеальных кристаллах, ПИИ в кристаллах с дефектами, её брэгговской и диффузной составляющих и их скачка в области К-края поглощения при толщине кристалла $t = 650$ мкм.

6.5. Деформационные зависимости интегральной интенсивности рассеяния кристаллами с дефектами для лауэ-дифракции при нарушении закона Фриделя

На основе полуфеноменологической модели ПИИ изогнутого толстого кристалла с хаотически распределёнными дефектами, полученной в работе [61], модель введённого и исследованного в работе [63] параметра асимметрии ДЗ ПИИ можно представить следующим образом [8]:

$$Y = \frac{R_i^{(+)}}{R_i^{(-)}},$$

$$R_i^{(+)} = R_{i\text{coh}} [1 + 0,074 (B T \mu_0 l)] \exp [-0,00604 (B T \mu_0 l)^2] + R_{i\text{diff}} [1 + 0,0157 (B T \mu_0 l)] \exp [-0,00044 (B T \mu_0 l)^2],$$

$$R_i^{(-)} = R_{i\text{coh}} [1 - 0,074 (B T \mu_0 l)] \exp [-0,00604 (B T \mu_0 l)^2] + R_{i\text{diff}} [1 - 0,0157 (B T \mu_0 l)] \exp [-0,00044 (B T \mu_0 l)^2].$$

(89)

Значения среднего радиуса дислокационных петель $R = 5$ мкм и их концентрации $c = 1,69 \times 10^{-17}$, взятые при построении толщинных зависимостей параметров асимметрии для кристаллов с дефектами, представленных на рис. 14, близки к значениям параметров дислокационных петель, найденным в работе [61] фитированием деформационных

зависимостей скачка ПИИ вблизи К-края поглощения, полученных экспериментально авторами работы [62]. Результаты расчётов приведены на рис. 18.

Из рисунка 18 видно, что для излучения с длиной волны 0,1094 нм наличие дефектов вызывает заметное уменьшение нормированного коэффициента асимметрии Y . При этом изменение с увеличением толщины кристалла нормированного коэффициента асимметрии намного чувствительнее к крупным дефектам, чем к мелким.

Из рисунка 19 видно, что для идеального кристалла Y резко возрастает с толщиной для интенсивности сильно поглощающейся длины волны вблизи К-края поглощения.

Следовательно, Y резко уменьшается с толщиной для скачка интенсивностей на К-крае, причём указанное уменьшение тем больше, чем больше степень упругого изгиба образца. При этом отличие указанных зависимостей Y или скачка Y вблизи К-края поглощения для ПИИ в кристалле с дефектами от Y для ПИИ в идеальном кристалле или его нормированных величин от единицы демонстрирует высокую чувствительность метода к дефектам.

6.6. Экспериментальная апробация метода ИДМД

Совместная комбинированная обработка приведённых экспериментальных данных по толщинным и деформационным

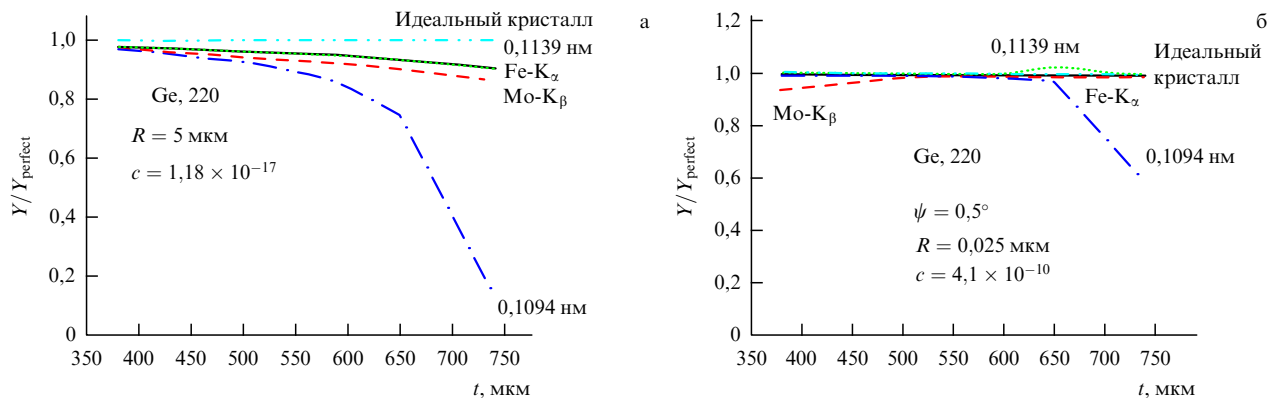


Рис. 18. Рассчитанные зависимости от толщины отношения параметра асимметрии ПИИ $Y = I_i^{hkl} / I_i^{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}$ кристалла с дефектами к параметру асимметрии ПИИ для идеального кристалла Y_{perf} . Параметры хаотически распределённых в объёме кристалла дислокационных петель: (а) средний радиус $R = 5$ мкм и концентрация $c = 1,18 \times 10^{-17}$, (б) средний радиус $R = 0,025$ мкм и концентрация $c = 4,1 \times 10^{-10}$. Расчёты проведены при $r = \pm 2,4$ м для случаев: излучения с длиной волны 0,1139 нм (пунктирная кривая), излучения с длиной волны 0,1094 нм, (штрихпунктирная кривая), Fe- K_α -излучения (сплошная кривая), Mo- K_β -излучения (штриховая кривая), а также ПИИ для идеального кристалла (штрихпунктирная с двумя точками кривая).

Таблица 2. Характеристики (радиусы R и концентрации n) дефектов, определённые при независимой и комбинированной обработках экспериментальных данных, полученных в разных условиях динамической дифракции, отдельно только для толщинных зависимостей ПИИ и совместно для толщинных и деформационных зависимостей ПИИ (комбинированная обработка)

Способ диагностики	Большие петли		Кластеры		Средние петли		Малые петли	
	R , мкм	n , см $^{-3}$	R , мкм; h , мкм	n , см $^{-3}$	R , мкм	n , см $^{-3}$	R , мкм	n , см $^{-3}$
Толщинные зависимости ПИИ	10 ± 1	$0,5 - 3,3 \times 10^3$	$0,45 \pm 0,01$; $0,012 \pm 0,001$	$(1,12 \pm 0,01) \times 10^7$	$0,45 \pm 0,01$	$(2,6 \pm 0,01) \times 10^6$	$0,001 - 0,033$	$7,3 \times 10^{10} - 7 \times 10^{13}$
Комбинированная обработка	$8 \pm 0,8$	$(5 \pm 1) \times 10^3$	$0,45 \pm 0,01$; $0,012 \pm 0,01$	$(1,12 \pm 0,01) \times 10^7$	$0,84 \pm 0,01$	$(8,4 \pm 1) \times 10^6$	$0,035 \pm 0,001$	$(2 \pm 0,1) \times 10^{11}$

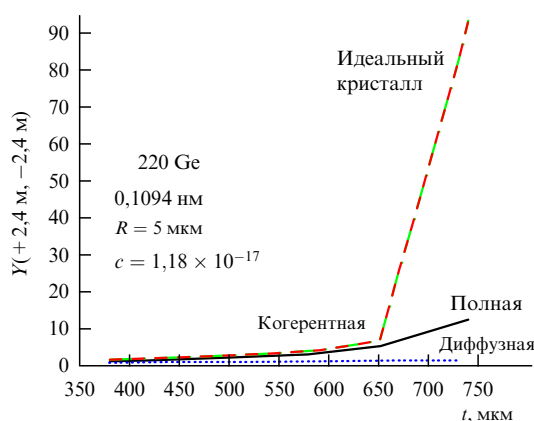


Рис. 19. Рассчитанные зависимости параметра асимметрии $Y = I_{i^{hkl}}/I_{i^{h\bar{k}l}}$ от толщины кристалла при $r = \pm 2,4$ м для ПИИ для излучения с длиной волны $\lambda = 0,1094$ нм. Сплошная линия соответствует ПИИ кристалла с дефектами, штриховая — когерентной составляющей ПИИ, пунктирная — диффузной составляющей ПИИ, штрихпунктирная — ПИИ в идеальном кристалле.

ционным зависимостям ПИИ в описанном в разделе 6.4 образце при использовании представленных в настоящем обзоре теоретических моделей в рамках метода ИДДМД позволила установить характеристики двух типов дефектов: крупных дислокационных петель с величиной вектора Бюргерса $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$, $R = 5$ мкм, $c = 8,85 \times 10^{-18}$ и мелких дислокационных петель с величиной вектора Бюргерса $|\mathbf{b}| = a\sqrt{2}$, $R = 0,02$ мкм, $c = 1,47 \times 10^{-10}$. Фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера $E = \exp(-L_H) = 0,998$ больше теплового фактора Дебая–Валлера для используемого отражения 220: $\exp(-M) = 0,966$, т.е. среднеквадратичные смещения атомов, вызванные присутствием дефектов, меньше тепловых. Это говорит о высоком совершенстве исследуемого монокристалла Ge, что подтверждается полученными малыми концентрациями дефектов. Возможность определения параметров дефектов, создающих столь малые искажения, свидетельствует о высокой структурной чувствительности метода ИДДМД.

Для иллюстрации преимуществ комбинированной обработки результатов рентгенодифракционного эксперимента, т.е. методов ИДДМД, в табл. 2 приведены радиусы и концентрации n [см $^{-3}$] четырёх типов дефектов, определённые при обработке толщинных зависимостей ПИИ и при комбинированной обработке толщинных и деформационных зависимостей ПИИ, полученных в разных условиях динамической дифракции для образца кремния на трёхосевом дифрактометре.

Как видно из табл. 2, при обработке результатов эксперимента только для толщинных зависимостей удаётся более или менее надёжно установить лишь

характеристики дефектов средних размеров (дискообразных преципитатов кислорода (кластеров) с высотой h и дислокационных петель среднего радиуса), что объясняется частичной компенсацией вкладов в ПИИ от крупных и мелких дефектов из-за их различного влияния на брэгговскую и диффузную составляющие динамической картины рассеяния (дефекты с малыми размерами и большой концентрацией преимущественно увеличивают диффузную составляющую, а дефекты больших размеров с малой концентрацией преимущественно уменьшают когерентную составляющую).

При этом следует напомнить, что кинематическое описание подобных экспериментов в принципе невозможно в силу рассмотренных выше законов сохранения и, как следствие, абсолютной нечувствительности кинематической картины рассеяния к любым видам искажений кристаллической решётки на уровне интегральных отражательных способностей неидеальных кристаллов, а также её низкой информативности (или полной неадекватности в условиях динамической дифракции) на уровне дифференциальных коэффициентов отражения. Однако при комбинированной обработке экспериментальных данных по толщинным и деформационным зависимостям ПИИ в различных условиях дифракции удаётся однозначно и с достаточно высокой точностью определить параметры всех четырёх типов дефектов, одновременно присутствующих в кристалле, что существенно повышает информативность метода ИДДМД, в том числе по сравнению с информативностью других динамических подходов.

Дополнительным преимуществом подхода, использованного выше для определения характеристик нескольких типов дефектов, является применение трёхкристальной схемы дифракционного эксперимента. Это позволило в рамках метода ПИИ отдельно измерять интенсивности брэгговских и диффузных волн, т.е. напрямую определять оба структурно чувствительных параметра динамической теории.

Следует подчеркнуть, что методы ДДМД позволяют "видеть" примеси с концентрацией меньшей, чем несколько миллионных долей процента, и смещения атомов, которые в миллион раз меньше размеров самих атомов. Чувствительность наблюдений методами ДДМД структуры дефектов достигает нескольких фемтометров, обеспечивая возможность управляемых технологий даже на фемтоуровне.

7. Диффузно-динамическая многопараметрическая дифрактометрия многослойных структур

Как отмечалось, повышение информативности и однозначности диагностики в рамках ДДМД обусловлено

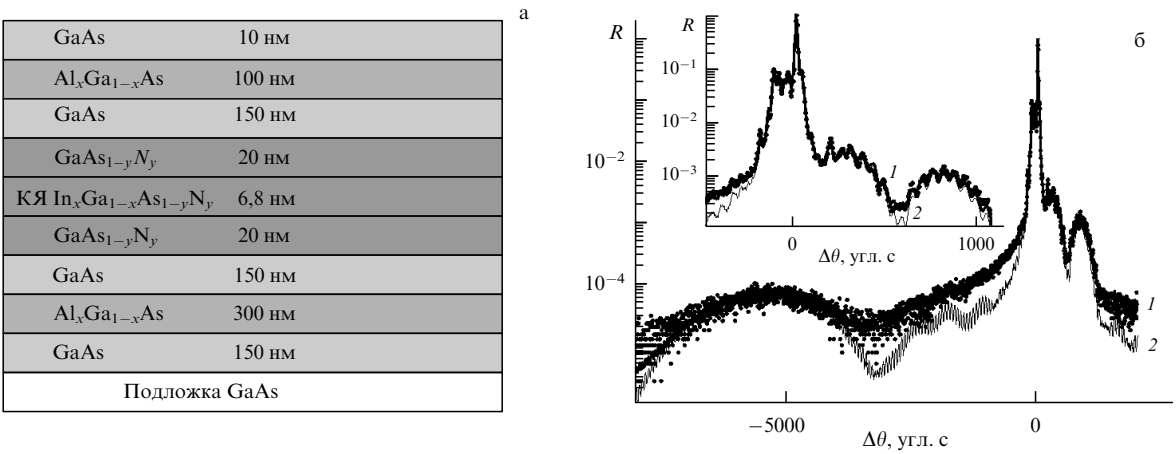


Рис. 20. (а) Схема многослойной структуры с квантовой ямой $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$. (б) Экспериментальные значения (тёмные кружки) дифракционного отражения для многослойной структуры $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y/\text{GaAs}$ и соответствующие теоретические кривые с учётом (1) и без учёта (2) диффузного рассеяния от дефектов в подложке и слоях.

Таблица 3. Параметры многослойной полупроводниковой структуры с квантовой ямой $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y/\text{GaAs}$

		Подложка GaAs	Слои GaAs	Слои $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	Слои $\text{GaAs}_{1-y}\text{N}_y$	КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$
Толщина слоя t , нм		—	150 175 150 10	320 120	24 24	7,4
Химический состав*	x	—	—	0,3	—	0,37
	y	—	—	—	0,012 (0,01)	0,02
Дислокационные петли	Концентрация n_L , см ⁻³	3×10^{16} 1×10^{18}	—	—	—	5×10^{17}
	Радиус R_L , нм	1,5 0,5	—	—	—	1,5
	L_H	$3,79 \times 10^{-3}$ $4,68 \times 10^{-3}$	—	—	—	$6,31 \times 10^{-2}$

* В скобках приведено номинальное значение химического состава.

уникальной возможностью только при динамической дифракции целенаправленно реализовать необходимый полный набор независимых дифракционных экспериментов для одного образца со сложной дефектной структурой с целью решения обратной задачи многопараметрической диагностики материалов и изделий нанотехнологий. Так, в работе [33] метод ДДМД был обобщён для случая гетероструктур и применён к многослойной системе с квантовой ямой (КЯ) $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$ (рис. 20а).

Это впервые позволило путём подгонки теоретических данных (полученных в рамках динамической теории дифракции для слоистых систем) к экспериментальным данным (рис. 20б) определить не только химический состав каждого слоя и его толщину, но и характеристики дефектов, эффектов сегрегации и полей упругой деформации в подложке и каждом слое.

Определённые в рамках ДДМД характеристики отдельных слоёв исследуемой многослойной структуры с квантовой ямой, а также параметры дефектов в них приведены в табл. 3.

Для реализации необходимого полного набора экспериментальных данных можно использовать не только продемонстрированное выше изменение условий диф-

ракции (случаи геометрий Брэгга и Лауэ, пределы тонкого и толстого кристаллов, асимметрия дифракции, длина волны, разные рефлексy), но и изменение самих методик измерений от дифференциальных (через интегро-дифференциальные) до интегральных, которые реализуются на трёхосевых, двухосевых и одноосевых дифрактометрах (см. раздел 4).

8. Заключение

В настоящем обзоре изложены теоретические основы динамической трёхосевой дифрактометрии кристаллов с дефектами нескольких типов. На основе построенной теоретической модели наглядно продемонстрировано явление многообразности динамической картины рассеяния излучений неидеальными кристаллами, обусловленное обнаруженной недавно авторами зависимостью от условий дифракции характера влияния дефектов на динамическую картину рассеяния. Установлены основные механизмы и эффекты многократности как брэгговского, так и диффузного рассеяния, различие в проявлении которых для разных составляющих рассеяния и разных типов дефектов и обуславливает указанную многообразность. Показано, что использование обна-

руженной многообразности динамической картины рассеяния позволяет при наличии в кристаллах дефектов нескольких типов решить проблему однозначной многопараметрической диагностики таких систем.

В обзоре также детально изложена динамическая теория интегральных интенсивностей рассеяния и проведён анализ динамических экстинкционных эффектов как для когерентного, так и для диффузного рассеяния. Детально рассмотрен коэффициент экстинкции, обусловленный диффузным рассеянием, при наличии в кристалле как малых, так и больших дефектов с учётом двух областей рассеяния: Хуаня и Стокса–Вильсона. Представлены выражения для интегральных коэффициентов и факторов экстинкции в случае малых и больших дефектов при малых эффектах экстинкции. Кроме того, получены выражения для интегральных факторов экстинкции при больших эффектах экстинкции и произвольных размерах дефектов. Рассмотрение указанных случаев проводилось в геометриях дифракции по Лауэ и по Брэггу в приближениях толстого и тонкого кристаллов, в которых протекание динамических дифракционных процессов в когерентной и диффузной компонентах ПИИ существенно различно, что показано в соответствующих разделах.

Такое различие в условиях протекания динамических дифракционных процессов обуславливает различный характер зависимостей компонент ПИИ от параметров эксперимента, таких как длина волны, толщина кристаллов, азимутальный угол и пр., и вкладов в них от дефектов разного типа. С использованием выражений для указанных случаев и соответствующих экспериментальных данных проведение диагностики дефектов нескольких типов в кристаллах становится значительно более надёжным и информативным, чем в случае исследования какого-либо одного условия дифракции. Комбинированное использование различных условий дифракции для одного и того же образца представляет собой новое поколение диагностики, названное диффузно-динамической многопараметрической дифрактометрией.

В данном обзоре в качестве примера рассмотрены дефекты кулоновского типа, а именно дислокационные петли и сферические кластеры. Однако полученные выражения использовались как базис для построения теоретических моделей в случаях других типов искажений кристаллической решётки, например таких, как упругий изгиб, нарушенный поверхностный слой, неравномерное распределение дефектов по глубине и т.п., а также для построения динамических моделей в различных гетероструктурах.

Таким образом, в настоящем обзоре представлены теоретические основы для реализации нового, созданного авторами, метода интегральной диффузно-динамической многопараметрической дифрактометрии.

В обзоре также проведён детальный сравнительный анализ информативных возможностей кинематической и динамической картин рассеяния на основе результатов соответственно кинематической и динамической теорий интегральных интенсивностей рассеяния и распределений интенсивностей в пространстве обратной решётки. Во-первых, установлено, что физической причиной, которая существенно ограничивает информативность кинематической картины рассеяния и описывающей её теории, оказывается наличие двух интегральных параметров кинематической картины рассеяния и соответственно двух законов сохранения кинематической теории: независимости полной интегральной интенсивности дифрак-

ционного отражения (первый параметр) от характеристик дефектов (первый закон) и отсутствия зависимости от условий дифракции удельного вклада в эту интегральную интенсивность её диффузной составляющей (соответственно второй параметр и второй закон сохранения).

Во-вторых, показано, что именно нарушение этих законов при динамической дифракции и ряд следствий из этого отражают физическую природу радикального повышения информативности ДДМД и обеспечивают появление возможности диагностики кристаллов с дефектами нескольких типов и многопараметрических наносистем при переходе от кинематической картины рассеяния Кривоглаза к динамической, т.е. при обобщении теории Кривоглаза для случая динамического рассеяния. При динамической дифракции оба из введённых здесь параметров (первый — общая яркость отражения, второй — доля в общей яркости её диффузной составляющей) становятся структурно-чувствительными и при этом многомерными, т.е. зависящими от условий дифракции, а динамическая картина рассеяния становится многообразной. То есть для всех экспериментально возможных условий динамической дифракции существуют своя динамическая картина рассеяния и своя пара интегральных параметров (или их распределений в обратном пространстве) этой картины с собственным (разным для различных условий дифракции) характером влияния дефектов кристалла как на саму картину рассеяния в целом, так и на оба её параметра в отдельности. На этой основе разработаны новые принципы повышения информативности диагностики и обеспечены новые функциональные возможности разработанных методов диффузно-динамической многопараметрической дифрактометрии, продемонстрированные выше на целом ряде примеров.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Украины (договоры М/93-2010 и М/94-2010).

Список используемых сокращений

ДДМД — диффузно-динамическая многопараметрическая дифрактометрия,
ДЗ — деформационная зависимость,
ДОД — двухосевой дифрактометр,
ДР — диффузное рассеяние,
ИДДМД — интегральная диффузно-динамическая многопараметрическая дифрактометрия,
КЯ — квантовая яма,
ООД — одноосевой дифрактометр,
ПИИ — полная интегральная интенсивность,
ТОД — трёхосевой дифрактометр.

Список литературы

1. Molodkin V B et al., in *Diffuse Scattering and the Fundamental Properties of Materials* (Eds R I Barabash, G E Ice, P E A Turchi) (New York: Momentum Press, 2009) p. 391
2. Шпак А П и др. "Спосіб багатопараметрично структурної діагностики монокристалів з декількома типами дефектів", Патент України № 36075. Зарєстровано в Державному реєстрі патентів України на винаходи 10.10.2008 р.
3. Шпак А П и др. *Успехи физ. мет.* **9** (3) 305 (2008)
4. Шпак А П и др. *Металлофиз. и новейшие технол.* **31** 615 (2009)
5. Шпак А П и др. *Успехи физ. мет.* **10** 229 (2009)
6. Шпак А П и др. "Спосіб багатопараметрично структурної діагностики монокристалів з декількома типами дефектів", Патент України № 89594. Зарєстровано в Державному реєстрі патентів України на винаходи 10.02.2010 р.
7. Шпак А П и др. *Металлофиз. новейшие технол.* **31** 927 (2009)

8. Шпак А П и др. *Металлофиз. новейшие технол.* **31** 1041 (2009)
9. Ковальчук М В, Кон В Г *УФН* **149** 69 (1986) [Koval'chuk M V, Kohn V G *Sov. Phys. Usp.* **29** 426 (1986)]
10. Von Laue M *Röntgenstrahlinterferenzen* (Leipzig: Akademische Verlagsgesellschaft, 1941)
11. Hammond C *The Basics of Crystallography and Diffraction* 2nd ed. (Oxford: Oxford Univ. Press, 2001)
12. James R W *Solid State Phys.* **15** 55 (1963)
13. Batterman B W, Cole H *Rev. Mod. Phys.* **36** 681 (1964)
14. Ахизер А И, Померанчук И Я *Некоторые вопросы теории ядра* (М.-Л.: Гостехиздат, 1948)
15. Krivoglaz M A *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin: Springer, 1996)
16. Молодкин В Б, Тихонова Е А *ФММ* **24** 385 (1967)
17. Молодкин В Б *ФММ* **25** 410 (1968)
18. Молодкин В Б *ФММ* **27** 582 (1969)
19. Молодкин В Б *Металлофизика* **2** (1) 3 (1980)
20. Molodkin V B *Phys. Metals* **3** 615 (1981)
21. Molodkin V B, Olikhovskii S I, Osinovskii M E *Phys. Metals* **5** 1 (1984)
22. Molodkin V B, Olikhovskii S I, Osinovskii M E *Phys. Metals* **5** 847 (1985)
23. Kochelab V V et al. *Phys. Status Solidi A* **108** 67 (1988)
24. Даценко Л И, Молодкин В Б, Осинковский М Е *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами* (Киев: Наукова думка, 1988)
25. Molodkin V B et al. *Phys. Status Solidi B* **227** 429 (2001)
26. Olikhovskii S I et al. *Phys. Status Solidi B* **231** 199 (2002)
27. Олиховский С И и др. *Металлофиз. новейшие технол.* **29** 887 (2007)
28. Олиховский С И и др. *Металлофиз. новейшие технол.* **29** 1225 (2007)
29. Олиховский С И и др. *Металлофиз. новейшие технол.* **29** 1333 (2007)
30. Молодкин В Б и др. *Дифрактометрия наноразмерных дефектов и гетерослоев кристаллов* (Киев: Академперіодика, 2005)
31. Багов А Н и др. *Рентгенодифракционная диагностика упруго-напряженного состояния наногетероструктур* (Под ред. Б С Карамурзова, Ю П Хапачева) (Нальчик: Кабардино-Балкарский гос. ун-т, 2008)
32. Shpak A P et al. *Phys. Status Solidi A* **204** 2651 (2007)
33. Molodkin V B et al. *Phys. Status Solidi A* **204** 2606 (2007)
34. Молодкин В Б и др. *Металлофизика* **5** (3) 10 (1983)
35. Молодкин В Б и др. *Металлофизика* **6** (2) 18 (1984)
36. Молодкин В Б *Металлофизика* **6** (3) 105 (1984)
37. Molodkin V B et al. *Phys. Status Solidi A* **87** 597 (1985)
38. Nemozhkalenko V V, Molodkin V B, Kislovskii E N, Kogut M T *Металлофизика* **16** (2) 48 (1994)
39. Шпак А П, Молодкин В Б, Низкова А И *Успехи физ. мет.* **5** (1) 51 (2004)
40. Низкова А И, Молодкин В Б, Московка И А *Металлофиз. новейшие технол.* **26** 783 (2004)
41. Молодкин В Б и др. *Металлофиз. новейшие технол.* **22** (3) 3 (2000)
42. Молодкин В Б и др. *Металлофиз. новейшие технол.* **27** 1659 (2005)
43. Thomas J E, Baldwin T O, Dederichs P H *Phys. Rev. B* **3** 1167 (1971)
44. Кютт Р Н, Ратников В В *Металлофизика* **7** (1) 36 (1985)
45. Bond W L *Acta Crystallogr.* **13** 814 (1960)
46. Молодкин В Б и др. *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнології* **6** 785 (2008)
47. Молодкин В Б и др. *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнології* **6** 807 (2008)
48. Кисловский Е М и др. *Металлофиз. новейшие технол.* **29** 701 (2007)
49. Молодкин В Б и др. *Металлофиз. новейшие технол.* **30** 1173 (2008)
50. Молодкин В Б и др. *Металлофиз. новейшие технол.* **19** (12) 25 (1997)
51. Molodkin V B et al. *Phys. Status Solidi A* **206** 1761 (2009)
52. Пинскер З Г *Рентгеновская кристаллооптика* (М.: Наука, 1982)
53. Тихонова Е А *ФТТ* **9** 516 (1967) [Tikhonova E A *Sov. Phys. Solid State* **9** 394 (1967)]
54. Dederichs P H *Phys. Rev. B* **1** 1306 (1970)
55. Немошкаленко В В и др. *Металлофиз. новейшие технол.* **22** (2) 51 (2000)
56. Олиховский С И и др. *Металлофиз. новейшие технол.* **22** (6) 3 (2000)
57. Барьяхтар В Г, Гаврилова Е Н, Молодкин В Б, Олиховский С И *Металлофизика* **14** (11) 68 (1992)
58. Nemozhkalenko V V et al. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A* **308** 294 (1991)
59. Молодкин В Б и др. *Металлофиз. новейшие технол.* **28** 953 (2006)
60. Молодкин В Б и др. *Металлофиз. новейшие технол.* **28** 1047 (2006)
61. Шпак А П и др. *Металлофиз. новейшие технол.* **30** 1189 (2008)
62. Даценко Л И, Кисловский Е Н *Укр. физ. журн.* **20** 810 (1975)
63. Datsenko L I, Kislovsky E N, Prokopenko I V *Ukr. Fiz. Zh.* **22** 513 (1977)
64. Molodkin V B et al. *Phys. Rev. B* **78** 224109 (2008)
65. Олиховский С И и др. *Металлофиз. новейшие технол.* **27** 947 (2005)
66. Олиховский С И и др. *Металлофиз. новейшие технол.* **27** 1251 (2005)
67. Каганер В М, Инденбом В Л *Металлофизика* **8** (1) 25 (1986)
68. Дмитриенко В Е, Каганер В М *Металлофизика* **9** (1) 71 (1987)
69. Белов А Ю, Каганер В М *Металлофизика* **9** (4) 79 (1987)
70. Бушуев В А *Кристаллография* **39** 803 (1994) [Bushuev V A *Crystallogr. Rep.* **39** 725 (1994)]
71. Бушуев В А *Кристаллография* **39** 983 (1994) [Bushuev V A *Crystallogr. Rep.* **39** 897 (1994)]
72. Пунегов В И, Харченко А В *Кристаллография* **43** 1078 (1998) [Punegov V I, Kharchenko A V *Crystallogr. Rep.* **43** 1020 (1994)]
73. Pavlov K M, Punegov V I *Acta Crystallogr. A* **56** 227 (2000)
74. Holý V, Gabrielyan K T *Phys. Status Solidi B* **140** 39 (1987)
75. Поляков А М, Чуховский Ф Н, Пискунов Д И *ЖЭТФ* **99** 589 (1991) [Polyakov A M, Chukhovskii F N, Piskunov D I *Sov. Phys. JETP* **72** 330 (1991)]
76. Kato N *Acta Crystallogr. A* **36** 763 (1980)

Multiparametric crystallography using the multiplicity scattering pattern diversity of Bragg and diffuse waves (diffuse-dynamical multiparametric diffractometry)

V.B. Molodkin, A.P. Shpak

G.V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, Vernadskyi blvd. 36, 03680 Kyiv, Ukraine. Tel. + 3 (044) 424-05 30. E-mail: molodkn@imp.kiev.ua

M.V. Kovalchuk, V.L. Nosik

A.V. Shubnikov Institute of Crystallography, Russian Academy of Sciences, Leninskii prosp. 59, 119333 Moscow, Russian Federation

V.F. Machulin

V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, prosp. Nauki 41, 03028 Kyiv, Ukraine

Fundamentals of the authors-developed new generation crystallography, known as diffuse-dynamical multiparametric diffractometry (DDMD), are reviewed. M.V. Kovalchuk and V.G. Kon, in their classical paper "X-ray standing waves — a new method of studying the structure of crystals" (*Usp. Fiz. Nauk* **149** 69 (1986) [*Sov. Phys. Usp.* **29** 426 (1986)]) provided theoretical and experimental justification for applying the method of standing Bragg waves to ideal crystals. The present paper discusses the results of extending their work to crystals with defects in which, in addition to standing Bragg waves, standing diffuse waves arise. With these present, the character of how defects influence the dynamic scattering pattern depends on the diffraction conditions, thus creating a new phenomenon, which manifests itself in a widely diverse diffuse-dynamical picture inherently impossible for kinematic scattering. This makes it possible, by tailoring diffraction conditions, to modify the Bragg and diffuse wave fields (from traveling to standing) and hence to change the character in which the fields interact with the crystal, with the result that experiments can provide enough various scattering patterns for the problem of unique multiparametric diagnosis to be solved by processing the patterns collectively. Theoretical and experimental fundamentals of DDMD are discussed, as are the results of its practical application.

PACS numbers: 42.25.Fx, **61.05. – a**, **61.72. – y**

Bibliography — 76 references

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **181** (7) 681 – 712 (2011)

DOI: 10.3367/UFNr.0181.201107a.0681

Received 22 September 2010, revised 27 October 2010

Physics – Uspekhi **54** (7) (2011)