

ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ И ЧАСТИЦ С КОНДЕНСИРОВАННЫМ ВЕЩЕСТВОМ

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

Многообразие динамической картины рассеяния излучений монокристаллами с несколькими типами микродефектов

В. Б. Молодкин, А. П. Шпак, М. В. Ковальчук*, В. Ф. Мачулин**,
И. М. Карнаухов***, В. Л. Носик*, А. Ю. Гаевский, В. П. Кладько**,
С. И. Олиховский, Е. Г. Лень, Б. В. Шелудченко, С. В. Лизунова,
В. В. Молодкин, С. В. Дмитриев, В. В. Лизунов

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

**Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН,
Ленинский проспект, 59,
119333 Москва, Россия*

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

****ННЦ «Харьковский физико-технический институт»,
ул. Академическая, 1,
61108 Харьков, Украина*

Уникальная чувствительность зависимостей картин многократного брэгговского и диффузного рассеяния от различных условий дифракции к характеристикам дефектов была обнаружена в [1]. Комбинированная обработка необходимых наборов этих зависимостей обеспечивает исключительную информативность диагностики. В данной работе показано, что в эксперименте в различных условиях дифракции это проявляется как многообразие динамической картины рассеяния при фиксированной дефектной структуре кристалла. При этом указанная многообразие оказывается индивидуальной для каждого типа дефектов в кристаллах. В результате появляется возможность рассмотрения рентгеновских или нейтронных дифракционных измерений для одного образца с несколькими типами дефектов, полученных в разных условиях динамической дифракции, в качестве независимых экспериментальных данных, что позволяет однозначно решать многопараметрическую обратную задачу рассеяния — восстанавливать параметры одновременно нескольких типов дефектов, присутствующих в кристаллах, по нескольким картинам ди-

фракции. Решение указанной многопараметрической задачи для систем со сложной дефектной структурой путём совместной обработки необходимого набора независимых экспериментальных данных положено в основу нового поколения кристаллографии — многопараметрической диффузодинамической комбинированной дифрактометрии (МДДКД), обоснованию и развитию которой и посвящается настоящая работа.

Показано, що відкрите в [1] явище унікальної чутливості до характеристик дефектів залежностей від різних умов дифракції картини багаторазового Бреґґового і дифузного розсіювання та виключної інформативності діагностики шляхом комбінованого оброблення необхідних наборів цих залежностей виявляється в експерименті за різних умов дифракції як багатобразність динамічної картини розсіювання при фіксованій дефектній структурі кристалу. При цьому зазначена багатобразність виявляється індивідуальною для кожного типу дефектів у кристалах. В результаті з'являється можливість розгляду Рентґенових або нейтронних дифракційних мірянь для одного зразка з кількома типами дефектів, яких одержано за різних умов динамічної дифракції, як незалежні експериментальні дані, що дозволяє однозначно розв'язувати багатопараметричну обернену задачу розсіювання — відновляти параметри одночасно кількох типів дефектів, які присутні в кристалі, за декількома картинами дифракції. Розв'язок зазначеної багатопараметричної задачі для систем зі складною дефектною структурою шляхом сумісного оброблення необхідного набору незалежних експериментальних даних покладено в основу нового покоління кристаллографії — багатопараметричної дифузодинамічної комбінованої дифрактометрії (БДДКД), обґрунтуванню та розвитку якої й присвячено дану роботу.

Unique sensitivity of dependences of Bragg and diffuse scattering multiple diffraction patterns on different conditions of diffraction to defects' parameters was revealed in [1]. A combined processing of necessary sets of these dependences provides extremely high diagnostics information capability. As shown in a given article, this phenomenon manifests itself in the experiments under various diffraction conditions as diversity of dynamical scattering pattern at a fixed defect structure of crystal. This diversity is individual for every type of crystal defects. As a result, possibility is appeared to consider the x-ray or neutron diffraction measurements obtained under different conditions of dynamical diffraction for the sample containing the several types of defects as independent experimental data. This fact permits to solve multiparameter inverse scattering problem, *i.e.* to re-establish parameters for several types of crystal defects simultaneously by means of several scattering patterns. The solution of the mentioned multiparameter problem for systems with complex defect structure by means of combined processing of necessary set of independent experimental data is used as a basis of new generation of crystallography—multiparameter diffuse-dynamical combined diffractometry (MDDCD). The article deals with substantiation and development of this approach.

Ключевые слова: динамическая дифракция, когерентное рассеяние, диффузное рассеяние, микродефекты, многопараметрическая кристаллография.

(Получено 26 апреля 2010 г.; окончат. вариант — 30 июня 2011 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Работа посвящается развитию созданного авторами [1–8] нового поколения кристаллографии, названного диффузодинамической многопараметрической кристаллографией (ДДМК).

Классическая кристаллография, созданная в самом начале прошлого века, базируется либо на кинематической (приближение однократного рассеяния), либо на динамической, т.е. с учетом эффектов многократности рассеяния, теориях дифракции в кристаллах с идеально периодической структурой (без дефектов) и по этой причине характеризует лишь только эту идеальную структуру и не позволяет диагностировать характеристики дефектов [9–15]. Однако, как стало очевидным в последнее время, комплекс необходимых свойств разрабатываемых новых материалов определяется не столько исходной структурой их периодических решеток, сколько характеристиками наведенных в них современными технологиями отклонений от периодичности, т.е. дефектов различных типов и искусственной наноразмерной сверхструктурой. 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, созданы как в рамках кинематического (Кривоглазом) [15], так и динамического (авторами с коллегами) [16–42] рассмотрений. При этом именно диффузодинамическая кристаллография оказалась способной решить проблему однозначной многопараметрической диагностики, к примеру, большого числа характеристик дефектов нескольких типов, одновременно присутствующих в кристаллах, или структурных параметров многослойных систем с дефектами селективно для каждого слоя без разрушения, благодаря обнаруженному в случае динамического (многократного) как брэгговского, так и диффузного рассеяния явлению многообразности дифракционной картины, раскрытие природы которой и предполагается в этой статье.

2. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ДЕФЕКТОВ НА КИНЕМАТИЧЕСКУЮ И ДИНАМИЧЕСКУЮ КАРТИНЫ РАССЕЯНИЯ

2.1. Кинематический случай

Потенциал рассеяния излучения для кристалла с дефектами, в отличие от такового для идеального кристалла, становится непериио-

дическим и зависит 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. Второе слагаемое — отклонения от периодичности, флуктуационная часть. Периодическая часть, в отличие от идеального кристалла, оказывается зависящей от статистических характеристик дефектов (в основном за счёт фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера, который Кривоглаз называл статическим фактором Дебая–Валлера) и непосредственно формирует и описывает брэгговское рассеяние.

Флуктуационная часть непосредственно формирует диффузное рассеяние, распределение интенсивности которого в пространстве обратной решётки с помощью разработанного Кривоглазом метода флуктуационных волн выражено им через характеристики дефектов и которое оказалось наиболее информативным при диагностике дефектов по кинематической картине рассеяния.

2.2. Случай динамического рассеяния

При динамической дифракции, как показано в [16–20], благодаря процессам многократности рассеяния и брэгговская, и диффузная составляющие интенсивности формируются существенно обеими частями потенциала. Это приводит к тому, что динамическое брэгговское рассеяние определяется не средним, как у Кривоглаза, а дополнительно перенормированным за счёт перерассеяния на флуктуационной части эффективным периодическим потенциалом (комплексным и нелокальным). Этот эффективный потенциал существенно отличается от среднего по конфигурациям дефектов. Главное отличие — появление уникально структурно чувствительного фактора экстинкции за счёт диффузного рассеяния [16]. Такое новое фундаментальное понятие динамической теории впервые введено в работе [16] (В. Б. Молодкин, Е. А. Тихонова, *ФФМ*, 1967), в которой установлены физическая природа и связь этого фактора с характеристиками дефектов. Этот фактор описывает предсказанный авторами эффект ослабления брэгговских и диффузных волн за счёт их рассеяния на отклонениях от периодичности потенциала (первоначально был назван эффектом эффективного поглощения) и, как правило, оказывается существенно более чувствительным к характеристикам дефектов, чем введенный Кривоглазом статический фактор Дебая–Валлера, т.е. фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера.

Главной динамической особенностью диффузного рассеяния является обнаруженная зависимость его распределения в простран-

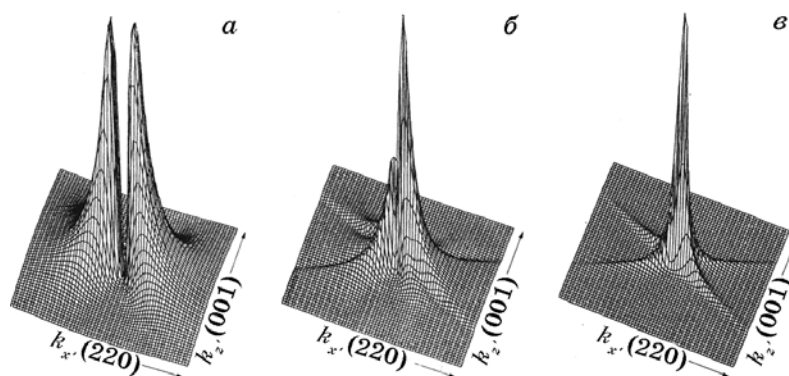


Рис. 1. Изменение картины рассеяния (трёхмерных изображений двумерных распределений интенсивности диффузного рассеяния в плоскости дифракции) с увеличением толщины t кристалла от $\mu_0 t = 0,027$ (а) до $\mu_0 t = 1,34$ (б) и $\mu_0 t = 5,36$ (в) иллюстрирует явление аномального прохождения диффузного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

стве обратной решетки от условий дифракции.

Как показано в [16–20], многократное перерассеяние диффузных волн на периодической части потенциала преобразует их в блоховские волновые поля, для которых в [21–23] предсказаны и нашли многократное экспериментальное подтверждение эффекты аномального прохождения и экстинкции диффузного рассеяния. Эти эффекты изменяют картину 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.

Видно, как радикально изменяются с ростом эффективной толщины кристалла трехмерные изображения, описывающие распределение интенсивности диффузного рассеяния в пространстве обратной решетки для кристалла, содержащего мелкие кластеры. Пик на рис. 1, в в 40 раз выше, чем два пика на рис. 1, а. В динамической картине как бы маскируется влияние дефектов, которое необходимо при диагностике демаскировать.

Отметим, что работа [23] была первым шагом, касающимся только диффузного рассеяния, на пути к раскрытию природы многообразности динамической картины рассеяния в целом. Установленные зависимости картин диффузного рассеяния от толщины (рис. 1) более существенны, чем от типа дефектов, представленные на рис. 2.

Таким образом, первый шаг к пониманию явления многообразности динамической картины рассеяния был реализован еще в 1988 г., когда была показана принципиальная возможность управления характером распределения диффузной составляющей карти-

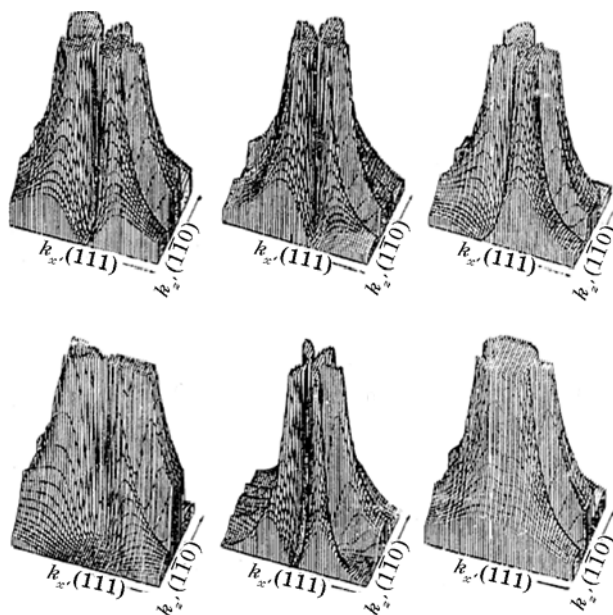


Рис. 2. Рентгеновские Фурье-изображения полей смещений вокруг дефектов разного типа (дислокационных петель различной ориентации) [23].

ны рассеяния при динамической дифракции путем изменения толщины образца, что не может быть осуществлено принципиально при кинематическом рассеянии. Вторым таким шагом оказался предсказанный в [34–37] эффект аномального роста с толщиной вклада диффузной составляющей, который был обусловлен установленным в этих работах существенным различием (на несколько порядков величины) эффектов экстинкции за счет брэгговского и за счет диффузного рассеяний. Описанные эффекты оказались, как будет показано ниже, частными механизмами проявления установленного впоследствии в работах [1–8] общего явления зависимости от условий дифракции (любых других, а не только толщины) характера влияния дефектов на картину рассеяния, т.е. явления многообразности динамической картины рассеяния.

3. ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ТРЕХОСЕВОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ДЕФЕКТАМИ

Интенсивность дифрагированного излучения, которое регистрируется трехосевым 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, ко-

гда исследуемый кристалл содержит хаотически распределенные дефекты, эта интенсивность может быть представлена в виде суммы когерентной (I_{coh}) и диффузной (I_{diff}) компонент [43]:

$$I(\Delta\theta, \Delta\theta') = I_{\text{coh}}(\Delta\theta, \Delta\theta') + I_{\text{diff}}(\Delta\theta, \Delta\theta'). \quad (1)$$

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

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

$$I_{\text{diff}}(\Delta\theta, \Delta\theta') = I_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx R_M^{n_M}(x) \int_{-\infty}^{\infty} dx' r_{\text{diff}}(\mathbf{k}) R_A(x' - \Delta\theta'), \quad (3)$$

а при использовании бездисперсионной схемы ТОД ($n, -n, n$) с геометрией дифракции по Брэггу на всех кристаллах рентгенооптической схемы выражение (2) для когерентной компоненты измеряемой интенсивности следует заменить выражением:

$$I_{\text{coh}}(\Delta\theta, \Delta\theta') = I_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx R_M^{n_M} \left\{ b_M^{-1} \left[b_S^{-1}(x - \Delta\theta) - \Delta\theta \right] \right\} \times \\ \times R_{\text{coh}} \left[b_S^{-1}(x - \Delta\theta) \right] R_A(x - \Delta\theta'), \quad (4)$$

где I_0 — интенсивность излучения, которое падает на монохроматор, R_M и R_A — коэффициенты отражения соответственно монохроматора и анализатора, n_M — кратность отражения на монохроматоре, b_M и b_S — параметры асимметрии монохроматора и исследуемого кристалла, $\mathbf{k} = k_x \mathbf{e}_x + k_z \mathbf{e}_z$, $\mathbf{e}_x$ и $\mathbf{e}_z$ — орты в плоскости рассеяния. Функция r_{diff} в выражении (3) является проинтегрированной по вертикальной расходимости ϕ диффузной компонентой дифференциального коэффициента отражения исследуемого кристалла, а R_{coh} для образца в случае Лауэ-геометрии в зависимости от того проходящие или дифрагированные лучи регистрируются детектором ТОД принимает значение или T (5), или R (6), которые имеют вид [46, 47]:

$$T = \exp \left[-(\mu_0 + M_{\text{DS}}) t \right] \frac{1}{4|y^2 + 1|^2} \left\{ \left| y + \sqrt{y^2 + 1} \right|^2 \exp(-Ktw_1) + \right.$$

$$+ \left| y - \sqrt{y^2 + 1} \right|^2 \exp(Ktw_i) - 2 \operatorname{Re} \left[\left(y + \sqrt{y^2 + 1} \right) \times \right. \\ \left. \times \left(y - \sqrt{y^2 + 1} \right)^* \exp(iKtw_r) \right] \Bigg\}, \quad (5)$$

$$R = \frac{\exp \left[-(\mu_0 + M_{\text{DS}}) t \right]}{4 \left| y^2 + 1 \right|^2} |\zeta|^2 \left\{ \exp(Ktw_i) + \exp(-Ktw_i) - 2 \cos(Ktw_r) \right\}, \quad (6)$$

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

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

$K = 2\pi/\lambda$ — модуль волнового вектора падающей волны, λ — длина волны в вакууме, Λ — длина экстинкции, t — толщина плоскопараллельной кристаллической пластинки, y — угловая функция, C — поляризационный множитель, $\Delta\chi_{\text{GG'}}$ — дисперсионные поправки к волновым векторам «сильных» брэгговских волн, обусловленные диффузным рассеянием (ДР) ($\mathbf{G}, \mathbf{G}' = \mathbf{0}, \mathbf{H}$), $\mu_0 = -K\chi_{i0}(1/\gamma_0 + 1/\gamma_{\text{H}})/2$ — нормальный коэффициент фотоэлектрического поглощения, γ_0 и γ_{H} — направляющие косинусы соответственно падающей и дифрагированной волн, χ_{G} и $\chi_{i\text{G}}$ — усредненная по ансамблю дефектов Фурье-компонента комплексной поляризуемости кристалла $\chi(\mathbf{r}) = \chi_{\text{r}}(\mathbf{r}) + \chi_{\text{i}}(\mathbf{r})$ и Фурье-компонента ее мнимой части ($\mathbf{G} = \mathbf{0}, \mathbf{H}$), $E = \exp(-L_{\text{H}})$ — статический фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера, а $M_{\text{DS}} = -K \operatorname{Im}(\Delta\chi_{00}/\gamma_0 + \Delta\chi_{\text{HH}}/\gamma_{\text{H}})/2$ — нормальный коэффициент поглощения, который обусловлен мнимой частью дисперсионных поправок вследствие ДР на дефектах к волновым векторам «сильных» брэгговских волн в случае дифракции по Лауэ.

Как уже отмечалось, в отличие от кинематической теории при динамическом рассмотрении диффузная составляющая дифференциального коэффициента отражения для определенного рефлекса уже не является неизменным при произвольных условиях дифракции единым Фурье-изображением полей смещений от дефектов $\mathbf{u}_{\text{q}}$, а сложным образом изменяется при изменении этих условий, например, толщины кристалла t . Так, для Лауэ-дифракции диффузную составляющую можно представить в виде [46, 47]:

$$R_{\text{D}}(\mathbf{k}) = \frac{c(1-c)v_{\text{c}}t}{\gamma_0 \left| y^2 + 1 \right| \left| y'^2 + 1 \right|} \left(\frac{CEK^2}{4\pi} \right)^2 \left| \frac{CE\chi_{\text{H}} + \Delta\chi_{\text{H0}}}{CE\chi_{-\text{H}} + \Delta\chi_{\text{0H}}} \right| \times \\ \times \sum_{\delta\tau\lambda\sigma} (-1)^{\delta+\tau+\lambda+\sigma} X_{\delta\tau} \sqrt{\zeta'_{\delta}} \left(X_{\lambda\sigma} \sqrt{\zeta'_{\lambda}} \right)^* \Pi_{\delta\zeta\lambda\sigma} (\mathbf{H} \cdot \mathbf{u}_{\text{q}\delta\tau}) (\mathbf{H} \cdot \mathbf{u}_{\text{q}\lambda\sigma})^*, \quad (7)$$

$$X_{\delta\tau} = \frac{\chi_{\text{H}} c'^{(\tau)}}{c^{(\delta)} \zeta'_{\delta}} - \chi_{-\text{H}}, \quad (8)$$

тут c — концентрация дефектов, v_c — объем элементарной ячейки кристаллической решетки, а множитель

$$\Pi_{\delta\tau\lambda\sigma} = \frac{\exp[-iKt(\Delta_{\delta} - \Delta_{\lambda}^*)] - \exp[-iKt(\Delta'_{\tau} - \Delta'_{\sigma}^*)]}{iKt(\Delta'_{\tau} - \Delta'_{\sigma}^* - \Delta_{\delta} + \Delta_{\lambda}^*)} \quad (9)$$

описывает интерференционное поглощение, в частности, эффект Бормана для диффузного рассеяния, Δ_{δ} и Δ'_{τ} — аккомодации волновых векторов когерентных и диффузно рассеянных волн, соответственно.

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

$$\begin{aligned} T &= \\ &= \frac{4|y^2 - 1| e^{-(\mu_0 + M_{\text{DS}})t}}{|y + \sqrt{y^2 - 1}| e^{Ktw_i} + |y - \sqrt{y^2 - 1}| e^{-Ktw_i} - 2 \operatorname{Re} \left\{ \left(y + \sqrt{y^2 - 1} \right)^* \left(y - \sqrt{y^2 - 1} \right) e^{iKtw_r} \right\}}, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} R &= \\ &= \frac{|\zeta| (e^{Ktw_i} + e^{-Ktw_i} - 2 \cos Ktw_r)}{|y + \sqrt{y^2 - 1}| e^{Ktw_i} + |y - \sqrt{y^2 - 1}| e^{-Ktw_i} - 2 \operatorname{Re} \left\{ \left(y + \sqrt{y^2 - 1} \right)^* \left(y - \sqrt{y^2 - 1} \right) e^{iKtw_r} \right\}}, \end{aligned} \quad (11)$$

где $\mu_0 = -K\chi_{i0} (1/\gamma_0 - 1/|\gamma_{\text{H}}|)/2$, $M_{\text{DS}} = -K \operatorname{Im} (\Delta\chi_{00}/\gamma_0 - \Delta\chi_{\text{HH}}/|\gamma_{\text{H}}|)/2$.

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

$$\begin{aligned} R_{\text{D}}(\mathbf{k}) &= \frac{c(1-c)v_c t}{\gamma_0} \left(\frac{CEK^2}{4\pi} \right)^2 \frac{1}{|U|^2 |U'|^2} \times \\ &\times \sum_{\delta\tau\lambda\sigma} (-1)^{\delta+\tau+\lambda+\sigma} X_{\delta\tau} X_{\lambda\sigma}^* \Pi_{\delta\tau\lambda\sigma} (\mathbf{H} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{q}_{\delta\tau}}) (\mathbf{H} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{q}_{\lambda\sigma}})^*, \end{aligned} \quad (12)$$

$$X_{\delta\tau} = \frac{c'^{(\tau)}}{c^{(\delta)}} \chi_{\text{H}} - \zeta' \chi_{-\text{H}}, \quad \Pi_{\delta\tau\lambda\sigma} = \frac{\exp[iKt(\Delta_{\delta} - \Delta_{\lambda}^* - \Delta'_{\tau} + \Delta'_{\sigma}^*)] - 1}{iKt(\Delta_{\delta} - \Delta_{\lambda}^* - \Delta'_{\tau} + \Delta'_{\sigma}^*)}, \quad (13)$$

$$\begin{aligned}
|U|^2 &= \left| y + \sqrt{y^2 - 1} \right| e^{Ktw_i} + \left| y - \sqrt{y^2 - 1} \right| e^{-Ktw_i} - \\
&- 2 \operatorname{Re} \left\{ \left(y + \sqrt{y^2 - 1} \right)^* \left(y - \sqrt{y^2 - 1} \right) e^{iKtw_r} \right\}, \\
|U'|^2 &= \left| y' + \sqrt{y'^2 - 1} \right| e^{Ktw'_i} + \left| y' - \sqrt{y'^2 - 1} \right| e^{-Ktw'_i} - \\
&- 2 \operatorname{Re} \left\{ \left(y' + \sqrt{y'^2 - 1} \right)^* \left(y' - \sqrt{y'^2 - 1} \right) e^{iKtw'_r} \right\},
\end{aligned}$$

где $w' = w'_r + iw'_i = \lambda \Lambda'^{-1} \sqrt{y'^2 + 1}$, $\zeta' = (CE\chi_{\text{H}} + \Delta\chi'_{\text{H}0}) (CE\chi_{-\text{H}} + \Delta\chi'_{0\text{H}})^{-1}$, Λ' — длина экстинкции для диффузно рассеянных волн, $\Delta\chi'_{\text{GG}'}$ — 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 показано выше, в динамической теории влияние дефектов на когерентную и диффузную составляющие картины рассеяния определяется не только статическим фактором Кривоглаза–Дебая–Валлера, а и дисперсионными поправками к волновым векторам «сильных» брэгговских и диффузных волн (фактически параметрами экстинкции за счет ДР), которые обусловлены ДР на дефектах и имеют большей частью более весомое влияние, чем статический фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера. Выражения для дисперсионных поправок и для самой интенсивности ДР [1–7, 15, 50] приведено с учетом многократности рассеяния и областей рассеяния как Хуаня–Кривоглаза, так и Стокса–Вильсона, а также анизотропии полей смещений атомов кристалла, обусловленной выделенными дискретными ориентациями несферически 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 за счет их рассеяния на дефектах и перехода в диффузный фон:

$$\begin{aligned}
\Delta\chi_{\text{GG}'} &= P_{\text{GG}'} - i\mu_{\text{GG}'} / K, \quad \mu_{00}(\Delta\theta) \approx b \frac{C^2 V}{4\lambda^2} \int dk' S(\mathbf{q}), \\
S(\mathbf{q}) &= \operatorname{Re} \langle \delta\chi_{\mathbf{q}+\mathbf{H}} \delta\chi_{-\mathbf{q}-\mathbf{H}} \rangle, \quad \delta\chi_{\mathbf{H}+\mathbf{q}} \approx iE\chi_{\text{H}} \sum_{\alpha} (\mathbf{H} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{q}\alpha}) c_{\mathbf{q}\alpha}, \quad (14) \\
\mu_{\text{HH}}(\Delta\theta) &\approx b^{-1} \mu_{00}(\Delta\theta), \quad \mu_{0\text{H}}(\Delta\theta) \approx \mu_{\text{H}0}(\Delta\theta) \approx 0.
\end{aligned}$$

Действительные части дисперсионных поправок связаны с мнимыми частями посредством известных дисперсионных соотноше-

ний Крамерса–Кронига.

При условии выполнения принципа суперпозиции полей смещений атомов матрицы вокруг дефектов разного типа 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–Кривоглаза (Н) и Стокса–Вильсона (SW), граница между которыми определяется эффективным радиусом R_{eff}^{α} дефекта типа α ,

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

Зная фурье-компоненты полей смещений $\mathbf{u}_{\mathbf{q}}$ для разных типов дефектов [13], например, призматических (несферически симметричных) дислокационных петель с вектором Бюргерса $\mathbf{b}$ и радиусом R_0 ,

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

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

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

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 равняется (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 счет ДР вводится следующим образом:

$$\mu_{\text{ds}}(k_0) = \mu_{\text{нн}}(\Delta\theta), \quad k_0 = K\Delta\theta \sin 2\theta_B. \quad (15)$$

С учетом выражений (14) формула (15) принимает вид:

$$\mu_{\text{ds}}(k_0) = cC^2 E^2 \tilde{m}_0 A_0 J(k_0), \quad \tilde{m}_0 = (|\chi_{\text{нн}}|/\lambda)^2 v_c/4, \quad (16)$$

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

где μ_i — 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 учете дискретной ориентации дислокационных петель $M=4$) [46, 47, 49, 51].

4. ВЛИЯНИЕ ИНТЕГРИРОВАНИЯ ПО ВЕРТИКАЛЬНОЙ РАСХОДИМОСТИ НА КАРТИНЫ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ДИФФУЗНОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ ДИФРАГИРОВАННОЙ ИНТЕНСИВНОСТИ

Ни один реальный эксперимент не позволяет фиксировать исходное дифференциальное распределение дифрагированной интенсивности из-за наложения разного рода инструментальных факторов. Так простейший одноосевой дифрактометр выполняет аппаратное интегрирование интенсивности по всем угловым переменным. Высокора разрешающий 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 распре-

делений определять, например, тип (петли, кластеры) и ориентацию дефектов в кристалле. Во-вторых, положительный аспект, который состоит в увеличении (благодаря этому же интегрированию в широком угловом диапазоне) относительного вклада ДР, что позволяет более надежно 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 трехосевой дифрактометр, который позволяет строить карты распределения когерентной и диффузной составляющих картины рассеяния в плоскости дифракции. Однако и трехосевой дифрактометр выполняет аппаратное интегрирование по угловой расходимости падающего пучка лучей в направлении, перпендикулярном плоскости дифракции (по вертикальной расходимости пучка). Таким образом, при разработке методов трехосевой дифрактометрии для корректного выделения изменения картины рассеяния за счет искажений кристаллической решетки обязательным является учет изменений благодаря влиянию инструментальных факторов, в частности, интегрирование по вертикальной расходимости.

Интегрирование выражений (7) и (12) по вертикальной расходимости пучка рентгеновских лучей в ТОД, т.е. по компоненте переданного импульса k_y , сводится к отысканию интегралов от выражений типа

$$\begin{aligned} \left\langle (\mathbf{H} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{q}_1}) (\mathbf{H} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{q}_2})^* \right\rangle = & \frac{4C_{n_1}^2}{3} \left(\frac{\pi |\mathbf{b}| R_0^2}{v_c (1-v) n_1} \right)^2 \left\{ \frac{(\mathbf{H} \cdot \mathbf{q}_1)(\mathbf{H} \cdot \mathbf{q}_2^*)}{4q_1^2 q_2^{*2}} \left[(9 - 4\eta n_1) v^2 + \right. \right. \\ & + 2(\eta n_1 - 6)v + 5 + 2 \frac{(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{q}_2^*)^2}{q_1^2 q_2^{*2}} \left. \right] + (1-v) \frac{(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{q}_2^*)}{q_1^2 q_2^{*2}} \left[(1-v) H^2 - \right. \\ & - \frac{(\mathbf{H} \cdot \mathbf{q}_1)^2}{q_1^2} - \frac{(\mathbf{H} \cdot \mathbf{q}_2^*)^2}{q_2^{*2}} \left. \right] + \frac{(\eta - 3)}{q_1^2 q_2^{*2}} \left[(1-v)^2 S(\mathbf{H}, \mathbf{H}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2^*) - \right. \\ & - \frac{1-v}{2} \left(\frac{(\mathbf{H} \cdot \mathbf{q}_1) S(\mathbf{H}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2^*)}{q_1^2} + \frac{(\mathbf{H} \cdot \mathbf{q}_2^*) S(\mathbf{H}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2^*, \mathbf{q}_2^*)}{q_2^{*2}} \right) + \\ & \left. \left. + \frac{(\mathbf{H} \cdot \mathbf{q}_1)(\mathbf{H} \cdot \mathbf{q}_2^*) S(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2^*, \mathbf{q}_2^*)}{4q_1^2 q_2^{*2}} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (17)$$

и его удобно выполнить, если разложить (17) на сумму элементарных дробей:

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

если $\delta\tau \neq \lambda\sigma$,

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

если $\delta\tau = \lambda\sigma$,

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 индексов, которые не совпадают, а вектор $\mathbf{p} = \mathbf{p}_{\delta\tau}$ для совпадающих пар индексов. Константы Σ_n и $\tilde{\Sigma}_n$ в выражениях (18) и (19) находятся методом неопределенных коэффициентов. Так константа Σ_0 имеет 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 найдены в [47].

Следствием учета инструментальных факторов ТОД является интегрирование выражения для дифференциального распределения интенсивности ДР по вертикальной расходимости рентгеновских лучей.

Результат интегрирования для случая Лауэ-дифракции можно записать в следующем виде:

$$r_{\text{diff}}(\mathbf{p}) = \left(\frac{CEK^2}{16\pi\gamma_H} \right)^2 \left| \frac{CE\chi_H + \Delta\chi_{H0}}{CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}} \right| \frac{v_c t c (1-c) \Sigma_0}{|y^2 + 1| |y'^2 + 1|} \times$$

$$\times \sum_{\delta\tau\lambda\sigma} (-1)^{\delta+\tau+\lambda+\sigma} X_{\delta\tau} \sqrt{\zeta'_\delta} \left(X_{\lambda\sigma} \sqrt{\zeta'_\lambda} \right)^* \Pi_{\delta\tau\lambda\sigma} I_{SW}^\infty,$$

если область рассеяния Хуаня–Кривоглаза не попадает в пределы интегрирования, или

$$r_{\text{diff}}(\mathbf{p}) = \left(\frac{CEK^2}{16\pi\gamma_H} \right)^2 \left| \frac{CE\chi_H + \Delta\chi_{H0}}{CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}} \right| \frac{v_c t c (1-c) \Sigma_0}{|y^2 + 1| |y'^2 + 1|} \times$$

$$\times \sum_{\delta\tau\lambda\sigma} (-1)^{\delta+\tau+\lambda+\sigma} X_{\delta\tau} \sqrt{\zeta'_\delta} \left(X_{\lambda\sigma} \sqrt{\zeta'_\lambda} \right)^* \Pi_{\delta\tau\lambda\sigma} \left(I_{SW}^\infty - I_{SW}^A + I_H^A \right),$$

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

Результат интегрирования дифференциального распределения интенсивности ДР по вертикальной расходимости рентгеновских лучей для случая Брэгг-дифракции имеет вид:

$$r_{\text{diff}}(\mathbf{p}) = \left(\frac{CEK^2}{16\pi\gamma_H} \right)^2 \frac{v_c tc(1-c)\Sigma_0}{|U|^2 |U'|^2} \sum_{\delta\tau\lambda\sigma} (-1)^{\delta+\tau+\lambda+\sigma} X_{\delta\tau} X_{\lambda\sigma}^* \Pi_{\delta\tau\lambda\sigma} I_{\text{SW}}^\infty, \quad (22)$$

если область рассеяния Хуаня–Кривоглаза не попадает в пределы интегрирования, и

$$r_{\text{diff}}(\mathbf{p}) = \left(\frac{CEK^2}{16\pi\gamma_H} \right)^2 \frac{v_c tc(1-c)\Sigma_0}{|U|^2 |U'|^2} \sum_{\delta\tau\lambda\sigma} (-1)^{\delta+\tau+\lambda+\sigma} X_{\delta\tau} X_{\lambda\sigma}^* \Pi_{\delta\tau\lambda\sigma} (I_{\text{SW}}^\infty - I_{\text{SW}}^A + I_H^A), \quad (23)$$

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

Функция I_{SW}^∞ равняется значению интеграла от (18) или (19) по области Стокса–Вильсона такой, которая занимает все обратное пространство, а функции I_H^A и I_{SW}^A равняются интегралам по областям Хуаня–Кривоглаза и Стокса–Вильсона, ограниченным по переменной k_y отрезком $[-A, A]$.

В случае, когда $\delta\tau \neq \lambda\sigma$, предельное значение $A = \sqrt{k_m^2 - p_a^2}$, а интегралы в формулах (20)–(23) описываются выражениями:

$$I_{\text{SW}}^\infty = \frac{2k_m^2\pi}{K\Delta p^2} \left[\frac{1}{p_a} \left(\Sigma_3 - \Sigma_4 + \frac{2(\Sigma_1 + \Sigma_2)}{\Delta p^2} \right) - \frac{1}{p_1} \left(\Sigma_3 + \Sigma_1 \left(\frac{1}{2p_1^2} + \frac{2}{\Delta p^2} \right) \right) + \right. \\ \left. + \frac{1}{p_2} \left(\Sigma_4 + \Sigma_2 \left(\frac{1}{2p_2^2} - \frac{2}{\Delta p^2} \right) \right) \right], \quad (24)$$

$$I_{\text{SW}}^A = \frac{4k_m^2}{K\Delta p^2} \left[\left(\Sigma_3 - \Sigma_4 + \frac{2(\Sigma_1 + \Sigma_2)}{\Delta p^2} \right) \frac{\arctan(A/p_a)}{p_a} - (\Sigma_3 + \right. \\ \left. + \Sigma_1 \left(\frac{1}{2p_1^2} + \frac{2}{\Delta p^2} \right) \right) \frac{\arctan(A/p_1)}{p_1} + \left(\Sigma_4 + \Sigma_2 \left(\frac{1}{2p_2^2} - \frac{2}{\Delta p^2} \right) \right) \times \\ \times \frac{\arctan(A/p_2)}{p_2} - \frac{\Sigma_1 A}{2p_1^2(A^2 + p_1^2)} + \frac{\Sigma_2 A}{2p_2^2(A^2 + p_2^2)} \right], \quad (25)$$

$$I_H^A = \frac{1}{K} \left\{ \left(2\Sigma_3 + \frac{\Sigma_1}{p_1^2} \right) \frac{\arctan(A/p_1)}{p_1} + \left(2\Sigma_4 + \frac{\Sigma_2}{p_2^2} \right) \frac{\arctan(A/p_2)}{p_2} + \right.$$

$$\left. + \frac{\Sigma_1 A}{p_1^2 (A^2 + p_1^2)} + \frac{\Sigma_2 A}{p_2^2 (A^2 + p_2^2)} \right\}. \quad (26)$$

В случае, когда $\delta\tau = \lambda\sigma$, предельное значение $A = \sqrt{k_m^2 - p^2}$, и интегралы в выражениях (20)–(23) имеют вид:

$$I_{\text{SW}}^\infty = \frac{k_m^2 \pi}{2Kp^3} \left\{ \tilde{\Sigma}_1 + \frac{3}{4p^2} \left[\tilde{\Sigma}_2 + \frac{5}{6p^2} \left(\tilde{\Sigma}_3 + \frac{7\tilde{\Sigma}_4}{8p^2} \right) \right] \right\}, \quad (27)$$

$$I_{\text{SW}}^A = \frac{1}{K} \left\{ \left(\tilde{\Sigma}_1 + \frac{3}{4p^2} \left[\tilde{\Sigma}_2 + \frac{5}{6p^2} \left(\tilde{\Sigma}_3 + \frac{7\tilde{\Sigma}_4}{8p^2} \right) \right] \right) \left(\frac{k_m^2 \arctan(A/p)}{p^3} + \right. \right. \quad (28)$$

$$\left. \left. + \frac{A}{p^2} \right) + \frac{A}{2p^2 k_m^2} \left[\tilde{\Sigma}_2 + \frac{3}{4p^2} \left(\tilde{\Sigma}_3 + \frac{5\tilde{\Sigma}_4}{6p^2} \right) \right] + \frac{A}{3p^2 k_m^4} \left(\tilde{\Sigma}_3 + \frac{5\tilde{\Sigma}_4}{6p^2} \right) + \frac{A\tilde{\Sigma}_4}{4p^2 k_m^6} \right\},$$

$$I_{\text{H}}^A = \frac{1}{K} \left\{ \left(2\tilde{\Sigma}_1 + \frac{1}{p^2} \left[\tilde{\Sigma}_2 + \frac{3}{4p^2} \left(\tilde{\Sigma}_3 + \frac{5\tilde{\Sigma}_4}{6p^2} \right) \right] \right) \frac{\arctan(A/p)}{p} + \right. \quad (29)$$

$$\left. + \frac{A}{p^2 k_m^2} \left[\tilde{\Sigma}_2 + \frac{3}{4p^2} \left(\tilde{\Sigma}_3 + \frac{5\tilde{\Sigma}_4}{6p^2} \right) \right] + \frac{A}{2p^2 k_m^4} \left(\tilde{\Sigma}_3 + \frac{5\tilde{\Sigma}_4}{6p^2} \right) + \frac{A\tilde{\Sigma}_4}{3p^2 k_m^6} \right\}.$$

5. МНОГООБРАЗНОСТЬ ДИНАМИЧЕСКОЙ КАРТИНЫ РАССЕЯНИЯ И ЕЕ ФИЗИЧЕСКАЯ ПРИРОДА

Рисунки 3–8, полученные с использованием теоретической модели (1)–(29), наглядно демонстрируют обнаруженную многообразность динамической картины рассеяния от кристалла с фиксированной дефектной структурой для различных условий дифракции.

На рисунке 4 виден, по сравнению с рис. 3, эффект аномального роста вклада диффузной составляющей и результирующее изменение вида картины рассеяния с изменением толщины кристалла.

Видоизменение вышеприведенных картин рассеяния для геометрии Лауэ обусловлено эффектами Бормана для брэгговской и диффузной составляющих и экстинкции за счет диффузного рассеяния и связано с различиями проявления этих эффектов для брэгговской и для диффузной составляющих.

Рисунок 6 иллюстрирует изменение картины динамического рассеяния за счёт изменения геометрии дифракции, т.е. при переходе от геометрии Лауэ (дифракции на просвет) к геометрии Брэгга (дифракции на отражение).

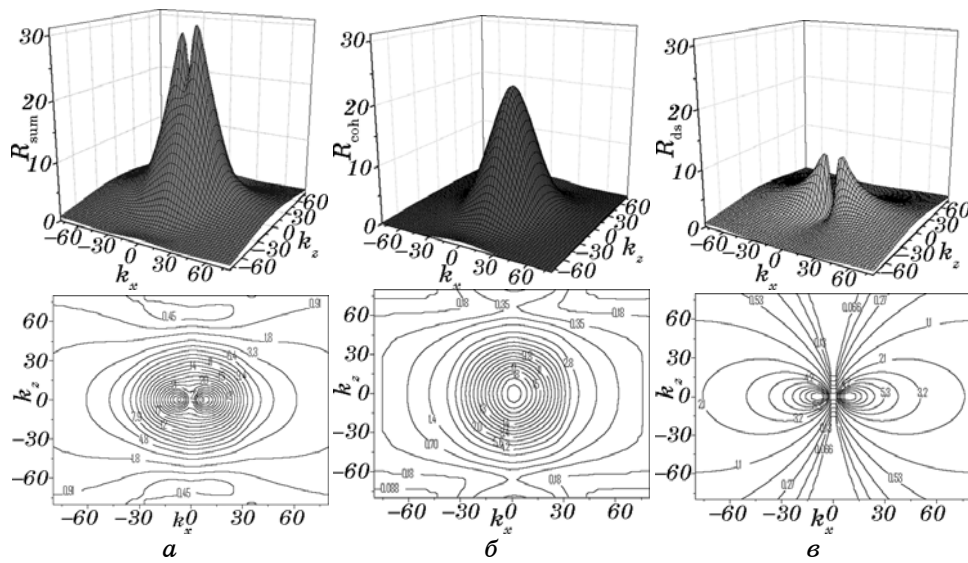


Рис. 3. Двумерные распределения в плоскости дифракции и изолинии для полной интенсивности дифракции (а) и ее брэгговской (б) и диффузной (в) составляющих. Случай Лауэ $\text{CuK}\alpha$ 220 (кластеры), $t = \Lambda/10$, Λ — длина экстинкции.

Проследить изменение вида картины динамического рассеяния (ее многообразность) при переходе к различным условиям дифрак-

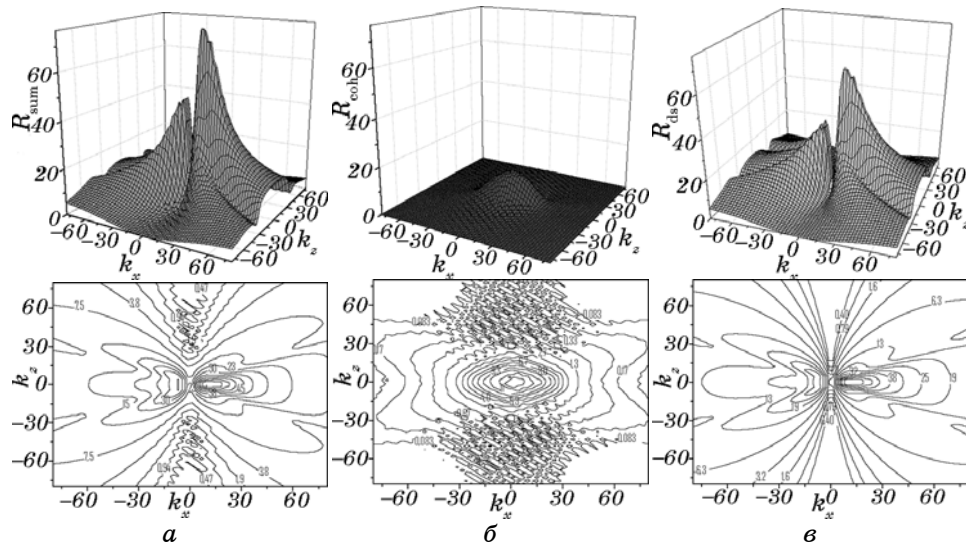


Рис. 4. То же, что и на рис. 3, но при $t = 100$ мкм.

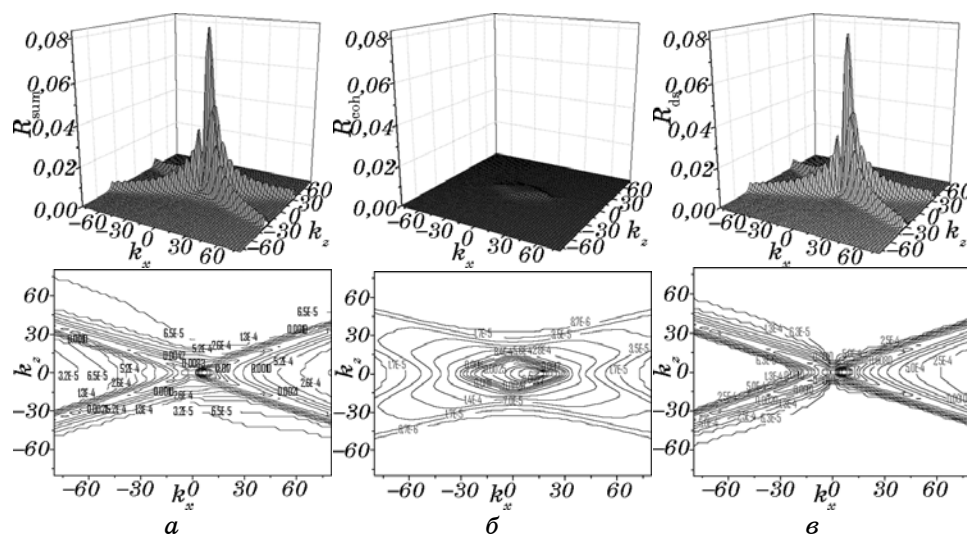


Рис. 5. То же, что и на рис. 3, но при $t = 1000$ мкм.

ции удобно по рис. 7; на нем сведены суммарные (брэгговская + диффузная компоненты) распределения дифрагированной интенсивности для рассмотренных выше условий дифракции при наличии в кристалле кремния сферических преципитатов кислорода (кластеров) с фиксированными радиусами и концентрациями.

Следует отметить, что характер многообразности (зависимости от условий дифракции) динамической картины рассеяния будет принципиально разным для дефектов разных типов (см. рис. 8). Это позволяет однозначно решать многопараметрическую обратную задачу рассеяния — находить по необходимому набору динамических картин дифракции, полученных в различных дифракционных условиях, параметры нескольких типов дефектов, одновременно присутствующих в исследуемом кристалле.

Таким образом, продемонстрированная на рис. 3–8 динамика картины рассеяния и характера влияния на нее дефектов различного типа при изменении условий дифракции, показанная здесь на примере зависимости от толщины и геометрии дифракции и при этом различная для дефектов разного типа, оказывается обусловленной конкуренцией совместного влияния всех механизмов эффектов многократности рассеяния, установленных ранее и описанных выше в этой работе. При этом для тонких кристаллов ($\mu_0 t \approx 1$) главную роль играют процессы, связанные с различием влияния эффектов многократности на брэгговскую и диффузную составляющие отражательной способности, а для толстых ($\mu_0 t \gg 1$) — с различием влияния на поглощательные способности этих составляющих.

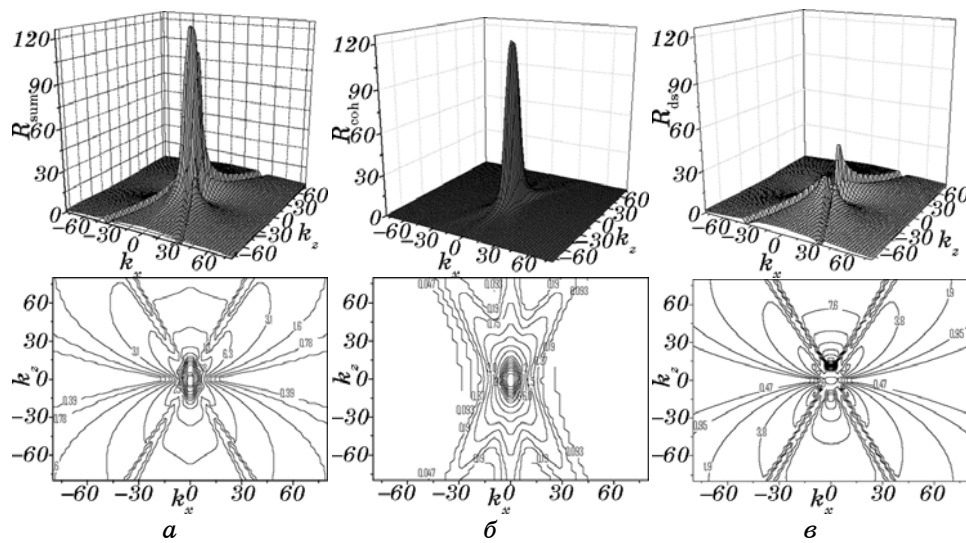


Рис. 6. То же, что и на рис. 3, но для случая Брэгга при $t = 1000$ мкм.

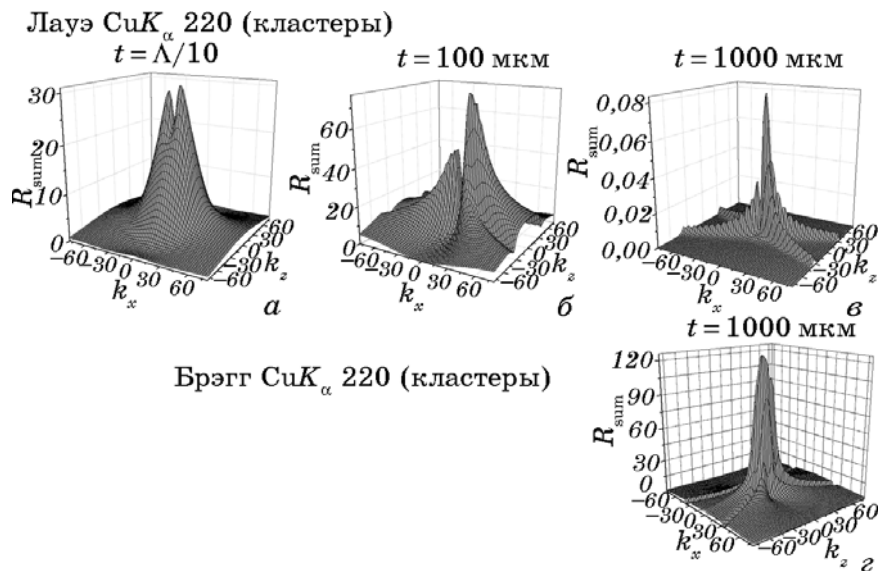


Рис. 7. Иллюстрируется многообразие динамической картины рассеяния в целом при изменении условий дифракции.

В тонких кристаллах основную роль играет эффект аномального роста с толщиной вклада диффузной составляющей, обусловленный различием на порядки величин эффектов экстинкции за счет брэгговского и за счет диффузного рассеяний (см. рис. 3–8). В толстых кри-

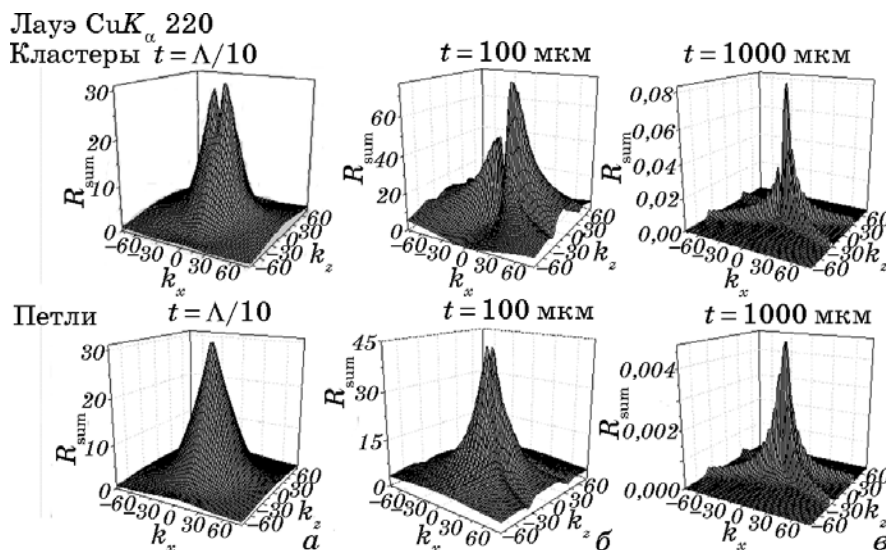


Рис. 8. Демонстрируется изменение характера многообразности с изменением типа дефектов. Случай Лауэ $\text{CuK}_\alpha 220$.

сталлах главную роль играет различие между брэгговской и диффузной составляющими в характерах проявления для них эффектов Бормана и эффектов экстинкции за счет диффузного рассеяния.

Таким образом, с толщиной (условиями дифракции) меняются определяющие механизмы эффектов многократности, и это изменяет характер (и даже знак) влияния дефектов на динамическую картину рассеяния, то есть дефекты могут как уменьшать, так и увеличивать интенсивность рассеяния в любой точке пространства обратной решетки в сравнении с таковой в идеальном кристалле. Различия зависимостей всех перечисленных здесь эффектов многократности рассеяния от характеристик дефектов разного типа также, как и от условий дифракции, а главное, взаимосвязанность этих зависимостей, обеспечивают уникальную многообразность динамической картины, связанную с зависимостью от условий дифракции характера результирующего влияния дефектов на картину рассеяния, и обуславливают качественно новые функциональные возможности информативности диагностики и, в частности, возможность многопараметрической дифрактометрии.

6. МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ ДИФФУЗНОДИНАМИЧЕСКАЯ КОМБИНИРОВАННАЯ ДИФРАКТОМЕТРИЯ КРИСТАЛЛОВ С НЕСКОЛЬКИМИ ТИПАМИ ДЕФЕКТОВ

Для иллюстрации преимуществ многопараметрической диагности-

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

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

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

Таким образом, именно обнаруженное явление многообразности динамической картины рассеяния породило многопараметрическую кристаллографию. Зависимости от условий дифракции вкла-

дов диффузной составляющей и удельных вкладов дефектов каждого типа в картину рассеяния и существенные отличия этих зависимостей друг от друга создают основу для разработки принципов решения проблемы однозначной многопараметрической диагностики. В результате, применение методов диффузодинамической многопараметрической дифрактометрии позволяет однозначно восстанавливать параметры сложных дефектных структур.

В данном разделе приведены также результаты выполненной с использованием явления многообразности путем комбинирования

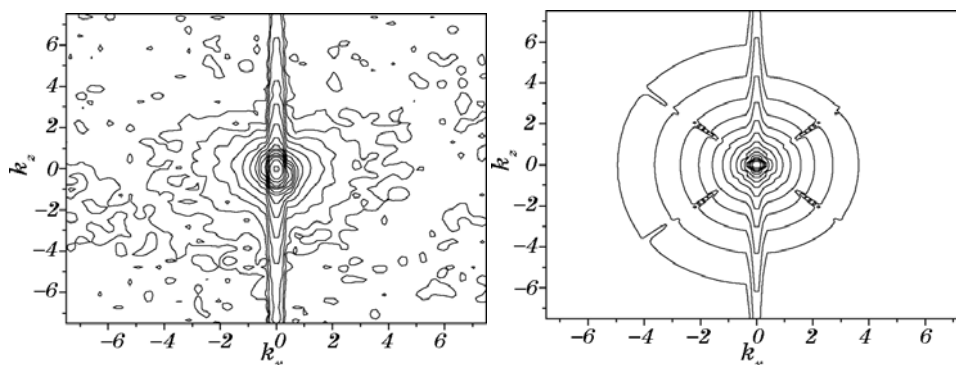


Рис. 9. Экспериментальная (слева) и рассчитанная (справа) карты обратного пространства образца Cz-Si, геометрия Брэгга, рефлекс 333, $\text{CuK}_{\alpha 1}$ -излучение (k_x и k_z измеряются в $\text{r.l.u.} \times 10^{-4}$).

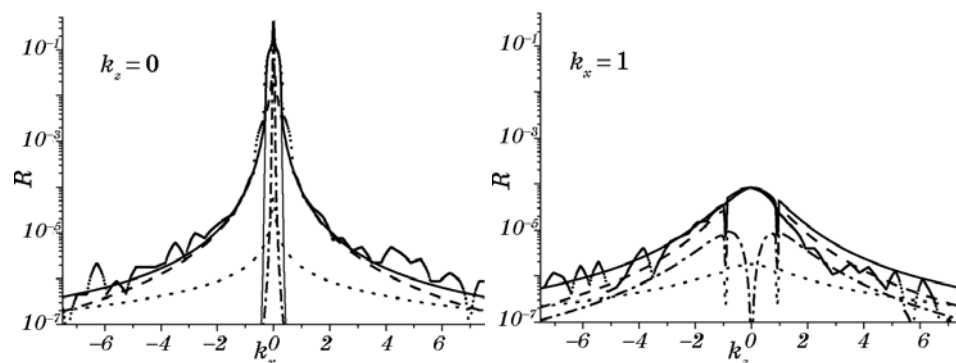


Рис. 10. Поперечное (слева) и продольное (справа) сечения карты обратного пространства, измеренной на ТОД (см. рис. 9). Измеренный и рассчитанный профили представлены соответственно маркерами и толстой сплошной линией, последний содержит когерентную компоненту и вклады в ДР от крупных и мелких дислокационных петель и сферических преципитатов кислорода (тонкая сплошная, штрихпунктирная, пунктирная и штриховая линии соответственно).

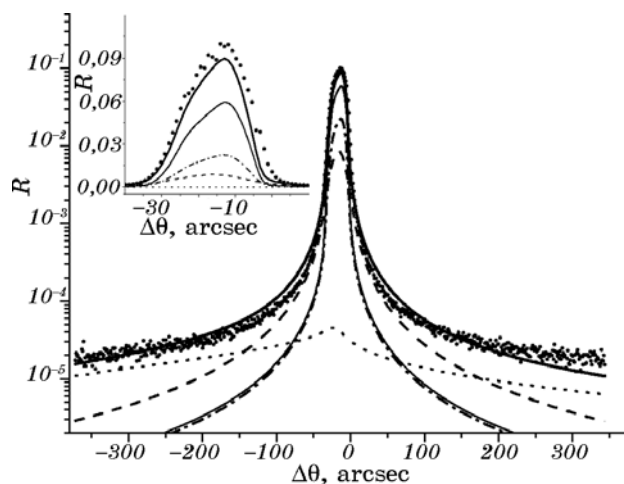


Рис. 11. Экспериментальные и теоретические кривые отражения (соответственно маркеры и толстые линии) образца Cz-Si, рефлекс 333, излучение $\text{CuK}_{\alpha 1}$. Остальные линии такие же, как на рис. 10. На вставках показаны центральные части КДО.

высокоразрешающих рентгеновских дифракционных методов количественной диагностики сложных дефектных структур в кристаллах кремния, выращенных методом Чохральского (Cz-Si). Концентрации и средние радиусы дислокационных петель и преципитатов кислорода определены с использованием комбинированной обработки карт обратного пространства (рис. 9 и 10) и кривых дифракционного отражения (рис. 11), основанной на аналитических формулах статистической динамической теории дифракции рентгеновских лучей неидеальными кристаллами со случайно распределенными дефектами нескольких типов (1)–(31). Результаты комбинированной диагностики представлены в табл. 2.

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

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

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

по Брэггу запишем в приближении полубесконечного кристалла [52]:

$$R_{\text{diff}}(\Delta\theta) \approx F_{\text{dyn}}(\Delta\theta)\mu_{\text{HH}}(\Delta\theta) / (2\gamma_0\mu_i). \quad (30)$$

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

Дисперсионная поправка вследствие ДР μ_{HH} (см. (14)) в выражении (30) является суммой коэффициентов поглощения из-за ДР для каждого дефекта типа α с i -м размером $\mu_{\text{ds}}^{\alpha i}$:

$$\mu_{\text{HH}}(\Delta\theta) = \mu_{\text{ds}}(k_0) = \sum_{\alpha} \sum_i \mu_{\text{ds}}^{\alpha i}(k_0), \quad (31)$$

где $k_0 = K\Delta\theta \sin(2\theta_B)$, θ_B — угол Брэгга. Выражения (30) и (31) описывают вклады от дефектов нескольких типов в интенсивность ДР на измеряемых дифракционных профилях и поглощение когерентной компоненты рассеяния из-за ДР соответственно (см. рис. 11).

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

При анализе измеренных дифракционных профилей и карт обратного пространства пренебрегали вкладом теплового ДР как малой величиной в рассматриваемой области обратного пространства [52]. Влияние инструментальной функции учитывалось только при обработке КДО. Приближенный учет инструментальных факторов при обработке карт обратного пространства и их сечений объясняет расхождения между теорией и экспериментом вдоль когерентного пика от образца, а также экстинкционные провалы на расчетных картах вдоль направлений в обратном пространстве, для которых выполняется условие Брэгга для волновых векторов падающей и дифрагированной диффузно рассеянных волн (см. рис. 9, 10). С другой стороны, благодаря этому упрощению было достигнуто существенное уменьшение времени расчета.

Для определения качества подгонки КДО используются факторы надежности — обычный R и взвешенный R_w :

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

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

Для выполнения детальной количественной диагностики исследуемых кристаллов Cz-Si необходимо выбрать подходящую модель дефектной структуры. Как правило, можно предположить одно-временное присутствие двух типов случайно распределенных микродефектов (без корреляции в их расположении), а именно, преципитатов кислорода и междоузельных дислокационных петель [53].

Одной из основных проблем рентгеновской дифракционной диагностики подобных сложных дефектных структур, которые ожидаются в исследуемых образцах, является сложность в идентификации двух типов дефектов со схожими (кулоновского типа) асимптотическими полями статических смещений и, как следствие, схожими дифракционными картинками.

Еще в большей степени эта проблема проявляется, когда распределение интенсивности ДР проинтегрировано по сфере Эвальда и, таким образом, индивидуальные особенности распределений от кластеров и дислокационных петель сглаживаются. Именно такой случай имеет место, когда КДО измеряются на ТОД без кристалла анализатора. В частности, в нашем рассмотрении имеется возможность промоделировать экспериментальные КДО практически с одинаково хорошим качеством, используя только преципитаты кислорода двух существенно различных радиусов или только дислокационных петель также двух радиусов.

По этой причине важна роль измеряемых карт обратного пространства, заключающаяся в однозначном установлении доминирующего типа микродефектов, дающих основной вклад в измеряемые дифференциальные распределения интенсивности ДР и определении приблизительных характеристик дефектов. Действительно, как можно видеть из рис. 9, для образца Cz-Si форма линий равной интенсивности на картах характерна для круговых дислокационных петель с ориентацией вектора Бюргерса $\langle 111 \rangle$ (сравн. с [51]). Их радиусы R_L оценены с использованием измеренных карт обратного пространства и их сечений (рис. 9, 10) и равны приблизительно 0,1 мкм.

Следует подчеркнуть, что фитирование экспериментальных карт обратного пространства и их сечений выполнялось при взаимном согласовании с результатами подгонки КДО, т.е. выполнялась комбинированная обработка карт и КДО. КДО, благодаря интегрированию интенсивности ДР по сфере Эвальда, имеют большую чувствительность к дефектам малых размеров по сравнению с картами, на которых их вклад практически незаметен.

В частности, в нашем рассмотрении малые дислокационные петли

с радиусами в несколько нанометров дают существенный вклад на далеких хвостах КДО, в то время как на дифракционных профилях ТОД их вклад пренебрежимо мал (сравн. рис. 10 и 11). Поэтому следует еще раз подчеркнуть особенно важную роль совместной обработки карт и КДО для достоверного количественного определения характеристик микродефектов с широким разбросом их размеров.

Полученные в этом разделе результаты демонстрируют возможность количественной диагностики многопараметрической дефектной структуры в монокристаллах кремния при комбинированной обработке экспериментальных данных по высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии с использованием аналитических формул статистической динамической теории дифракции рентгеновских лучей в несовершенных кристаллах. При этом различные экспериментальные методы дифрактометрии могут рассматриваться как частный случай разных условий динамической дифракции, обеспечивающий многообразность картины рассеяния и, соответственно, необходимый набор независимых экспериментальных данных.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье изложены теоретические основы динамической трехосевой и двухосевой дифрактометрии кристаллов с дефектами нескольких типов. С использованием построенной теоретической модели 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, которые различным образом проявляются для разных составляющих рассеяния и для вкладов от дефектов разного типа. В результате появляются различия в зависимостях от условий дифракции для этих составляющих, а главное, различия зависимостей для вкладов от дефектов разного типа, которые и обуславливают указанную многообразность. Использование обнаруженной многообразности динамической картины рассеяния позволяет в случаях наличия дефектов нескольких типов в кристаллах решить проблему однозначной многопараметрической диагностики таких систем.

Работа выполнена при финансовой поддержке Государственного агентства по вопросам науки, инноваций и информатизации Украины (договор № М/218–2011).

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. V. B. Molodkin, M. V. Kovalchuk, A. P. Shpak et al., *Diffuse Scattering and the*

- Fundamental Properties of Materials* (Eds. R. I. Barabash, G. E. Ice, and P. E. A. Turchi) (New Jersey: Momentum Press: 2009).
2. А. П. Шпак, М. В. Ковальчук, В. Б. Молодкін та ін., *Спосіб багатопараметричної структурної діагностики монокристалів з декількома типами дефектів*, Патент України № 36075 (Зареєстровано в Державному реєстрі патентів України на винаходи 10.10.2008).
 3. А. П. Шпак, М. В. Ковальчук, И. М. Карнаухов и др., *Успехи физ. мет.*, **9**, № 3: 305 (2008).
 4. А. П. Шпак, М. В. Ковальчук, В. Л. Носик и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **31**, № 5: 615 (2009).
 5. А. П. Шпак, М. В. Ковальчук, В. Б. Молодкин и др., *Успехи физ. мет.*, **10**, № 3: 229 (2009).
 6. А. П. Шпак, М. В. Ковальчук, В. Б. Молодкін та ін., *Спосіб багатопараметричної структурної діагностики монокристалів з декількома типами дефектів*, Патент України № 89594 (Зареєстровано в Державному реєстрі патентів України на винаходи 10.02.2010).
 7. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, М. В. Ковальчук и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **31**, № 7: 927 (2009).
 8. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, М. В. Ковальчук и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **31**, № 8: 1041 (2009).
 9. W. C. Röntgen, *Nobel Lectures. Physics 1901–1921* (Amsterdam: Elsevier Publishing Co.: 1967).
 10. M. Von Laue, *Rontgenstrahlinterferenzen* (Leipzig: Akademische Verlagsges: 1948).
 11. C. Hammond, *The Basics of Crystallography and Diffraction*. 2nd ed. (London: Oxford University Press: 2001).
 12. R. W. James, *Solid State Phys.*, **15**: 55 (1963).
 13. B. W. Batterman and H. Cole, *Rev. Mod. Phys.*, **36**: 681 (1964).
 14. А. И. Ахиезер, И. Я. Померанчук, *Некоторые вопросы теории ядра* (ОГИЗ: 1948).
 15. М. А. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin: Springer: 1996).
 16. В. Б. Молодкин, Е. А. Тихонова, *ФММ*, **24**, № 3: 385 (1967).
 17. В. Б. Молодкин, *ФММ*, **25**, № 3: 410 (1968).
 18. В. Б. Молодкин, *ФММ*, **27**, № 4: 582 (1969).
 19. В. Б. Молодкин, *Металлофизика*, **2**, № 1: 3 (1980).
 20. V. B. Molodkin, *Phys. Metals*, **3**: 615 (1981).
 21. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, and M. E. Osinovskii, *Phys. Metals*, **5**: 1 (1984).
 22. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, and M. E. Osinovskii, *Phys. Metals*, **5**: 847 (1985).
 23. V. V. Kochelab, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, and M. E. Osinovskii, *Phys. Status Solidi A*, **108**, No. 1: 67 (1988).
 24. Л. И. Даценко, В. Б. Молодкин, М. Е. Осиновский, *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами* (Киев: Наукова думка: 1988).
 25. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii et al., *Phys. Status Solidi B*, **227**, No. 2: 429 (2001).
 26. S. I. Olikhovskii, V. B. Molodkin, E. N. Kislovskii et al., *Phys. Status Solidi B*, **231**, No. 1: 199 (2002).
 27. С. И. Олиховский, В. Б. Молодкин, О. С. Кононенко и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 7: 887 (2007).

28. С. И. Олиховский, В. Б. Молодкин, О. С. Кононенко и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 9: 1225 (2007).
29. С. И. Олиховский, В. Б. Молодкин, А. И. Низкова и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 10: 1333 (2007).
30. В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, А. П. Шпак и др., *Дифрактометрия наноразмерных дефектов и гетерослоев кристаллов* (Киев: Академперіодика: 2005).
31. А. Н. Багов, Ю. А. Динаев, А. А. Дышеков и др., *Рентгенодифракционная диагностика упруго-напряженного состояния наногетероструктур* (Нальчик: Каб.-Балк. ун-т: 2008).
32. A. P. Shpak, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii et al., *Phys. Status Solidi A*, **204**, No. 8: 2651 (2007).
33. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii et al., *Phys. Status Solidi A*, **204**, No. 8: 2606 (2007).
34. В. Б. Молодкин, Г. И. Гудзенко, С. И. Олиховский, М. Е. Осиновский, *Металлофизика*, **5**, № 3: 10 (1983).
35. В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, М. Е. Осиновский и др., *Металлофизика*, **6**, № 2: 18 (1984).
36. В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, М. Е. Осиновский и др., *Металлофизика*, **6**, № 3: 105 (1984).
37. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, M. E. Osinovskii et al., *Phys. Status Solidi A*, **87**, No. 2: 597 (1985).
38. V. V. Nemoshkalenko, V. B. Molodkin, E. N. Kislovskii, and M. T. Kogut, *Металлофизика*, **16**, № 2: 48 (1994).
39. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, *Успехи физ. мет.*, **5**, № 1: 51 (2004).
40. А. И. Низкова, В. Б. Молодкин, И. А. Московка, *Металлофиз. новейшие технол.*, **26**, № 6: 783 (2004).
41. В. Б. Молодкин, В. В. Немешкаленко, А. И. Низкова и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **22**, № 3: 3 (2000).
42. В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, С. В. Дмитриев и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **27**, № 12: 1659 (2005).
43. J. E. Thomas, T. O. Baldwin, and P. H. Dederichs, *Phys. Rev. B*, **3**: 1167 (1971).
44. В. В. Ратников, Л. М. Сорокин, *ФТТ*, **26**: 3445 (1985).
45. W. L. Bond, *Acta Crystallogr.*, **13**: 814 (1960).
46. В. Б. Молодкін, С. Й. Оліховський, Б. В. Шелудченко та ін., *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*, **6**, вип. 3: 785 (2008).
47. В. Б. Молодкін, С. Й. Оліховський, Б. В. Шелудченко та ін., *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*, **6**, вип. 3: 807 (2008).
48. Є. М. Кисловський, О. В. Решетник, Т. П. Владімірова та ін., *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 5: 701 (2007).
49. В. Б. Молодкін, С. Й. Оліховський, Б. В. Шелудченко та ін., *Металлофиз. новейшие технол.*, **30**, № 9: 1173 (2008).
50. В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, Е. Н. Кисловский и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **19**, № 12: 25 (1997).
51. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. G. Len et al., *Phys. Status Solidi A*, **206**, No. 8: 1761 (2009).
52. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii et al., *Phys. Rev. B*, **78**: 224109 (2008).
53. A. Borghesi, B. Pivac, A. Sassella, and A. Stella, *J. Appl. Phys.*, **77**: 4169 (1995).