

PACS numbers: 07.85.Jy, 61.05.cc, 61.05.cf, 61.05.cp, 61.72.Dd, 61.72.J-, 61.72.Lk

**Анізотропний модель динамічної трикристальної  
Ляве-дифрактометрії структурної досконалости кристалічних  
виробів нанотехнологій. I. Когерентна складова динамічної  
картини розсіяння**

В. Б. Молодкін, С. Й. Оліховський, Б. В. Шелудченко, Є. Г. Лень,  
М. Т. Когут

*Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,  
бульв. Акад. Вернадського, 36,  
03680, МСП, Київ-142, Україна*

В рамках динамічної теорії розсіяння Рентгенових променів у недосконалих кристалах розглянуто випадок геометрії дифракції за Ляве без обмежень на розміри дефектів. Одержано аналітичні вирази для когерентних компонент коефіцієнтів проходження і відбиття для кристалів з однорідно розподіленими дефектами різних типів. З урахуванням анізотропії полів зміщень атомів кристалу навколо дефектів одержано аналітичні вирази для дисперсійних поправок до хвильових векторів «сильних» Бреггових хвиль, які виникають внаслідок дифузного розсіяння. Враховано інструментальні фактори трикристального дифрактометра у режимі картографування оберненого простору.

В рамках динамической теории рассеяния рентгеновских лучей в несовершенных кристаллах рассмотрен случай геометрии дифракции по Лауэ без ограничений на размеры дефектов. Получены аналитические выражения для когерентных компонент коэффициентов прохождения и отражения для кристалла с однородно распределёнными дефектами разных типов. С учетом анизотропии полей смещений атомов кристалла вокруг дефектов получены аналитические выражения для дисперсионных поправок к волновым векторам «сильных» брегговских волн, возникающих вследствие диффузного рассеяния. Учтены инструментальные факторы трехкристального дифрактометра в режиме картографирования обратного пространства.

Within the dynamical theory of x-ray scattering by imperfect crystal without defect-size restrictions, the case of Laue-diffraction geometry is considered. Analytical expressions for the coherent components of transmission and reflection coefficients for the crystal containing homogeneously distributed defects of various types are obtained. Taking into account anisotropy of atomic-

displacement fields about crystal defects, the analytical expressions for the dispersion corrections to the wave vectors of 'strong' Bragg waves appeared due to the diffuse scattering are derived. The instrumental factors of the three-crystal diffractometer in a mode of mapping of reciprocal space are considered.

**Ключові слова:** Ляве-дифракція, трикристальна дифрактометрія, динамічна теорія дифракції, дефекти Кульонового типу, когерентне і дифузне розсіяння, анізотропія поля пружної деформації, дисперсійні поправки внаслідок дифузного розсіяння.

*(Отримано 1 вересня 2008 р.)*

## 1. ВСТУП

Розсіяння Рентгенових променів (а також нейтронів та заряджених частинок) є однією з найважливіших неруйнівних метод дослідження недосконалостей кристалічної структури твердих тіл [1, 2]. Останнім часом в наукових дослідженнях і на практиці усе більше використовуються майже досконалі кристалічні системи з цілеспрямовано створеною дефектною структурою, які є основою сучасних і майбутніх нанотехнологій. Відповідно стає актуальною задача дослідження їх структурної досконалості адекватними динамічними рентгенодифракційними методами [3–5]. Найбільш інформативними серед них є підходи, що базуються на трикристальній Рентгеновій дифрактометрії, яка надає змогу картографувати у просторі оберненої ґратниці розподіл дифрагованої у зразку інтенсивності [4, 6–12].

Узагальнення статистичної динамічної теорії дифракції Рентгенових променів у кристалах з однорідно розподіленими дефектами, яке враховує багатократність Бреґгового і дифузного розсіяння як на середній (періодичній), так і на флюктуаційній частинах поляризованості кристалу, було виконано в роботах [13, 14]. Для випадку геометрії дифракції за Бреґгом в них одержано аналітичні вирази для когерентної і дифузної компонент коефіцієнта відбиття, які описують процеси розсіяння Рентгенового випромінення кристалом з дефектами як малих, так і великих розмірів.

Випадок дифракції за Ляве було розглянуто в рамках тієї ж узагальненої динамічної теорії Рентгенових променів у монокристалах з дефектами довільних розмірів у роботі [15], де були головним чином одержані вирази для Бреґгової та дифузної складових інтегральної інтенсивності. Однак розв'язання задачі трикристального картографування дифрагованої інтенсивності в просторі оберненої ґратниці вимагає диференційного (неінтегрального) розгляду картини розсіяння. Детальне дослідження при Ляве-дифракції розподілів в оберненому просторі інтенсивності динамічного дифузного

розсіяння (ДР) для дефектів різних типів в залежності від товщини кристалу проведено в роботі [16]. При розгляді ДР від кластерів було враховано анізотропію кристалічної ґратниці, а від дисльокаційних петель — асиметрію полів зміщень атомів навколо них. Однак в цій роботі ще не було зроблено узагальнення на важливий випадок наявності в кристалі дефектів великих розмірів, сумірних з довжиною екстинкції, а також не розглядалася когерентна складова картини розсіяння, яка в динамічному підході є не менш чутливою до параметрів дефектів, а ніж ДР [13, 14], зокрема, завдяки ефектам екстинкції за рахунок ДР. При цьому вирази для інтенсивності ДР було одержано в [16] без врахування внеску області розсіяння Стокса–Вільсона та інструментальних факторів, у тому числі й апаратного інтегрування трикристальним дифрактометром (ТКД) інтенсивності Рентгенового пучка по вертикальній розбіжності. Крім того, в згаданих вище роботах не приймалося до уваги, що сферично несиметричні дефекти можуть мати в кристалі лише дискретний набір рівноцінних орієнтацій, тобто, не проводилося аналітичне усереднення інтенсивності ДР, наприклад, від дисльокаційних петель з врахуванням дискретної орієнтації їх Бюргерсових векторів (в роботі [17] вплив ефектів анізотропії полів зміщень атомів кристалу навколо цих дефектів на картину розсіяння проводився шляхом числового розрахунку).

В першій частині даної роботи, що виходить окремою статтею, спираючись на узагальнену динамічну теорію розсіяння (розд. 2), для випадку геометрії дифракції за Ляве одержано аналітичні вирази для когерентних компонент коефіцієнтів проходження і відбиття кристалу з однорідно розподіленими дефектами довільних розмірів (розд. 3). З урахуванням ефектів анізотропії полів зміщень атомів кристалу навколо дефектів одержано аналітичні вирази для дисперсійних поправок до хвильових векторів когерентних хвиль, що виникають внаслідок ДР (розд. 4). Враховано інструментальні фактори ТКД, що забезпечило можливість аналізувати експериментальні розподіли в просторі оберненої ґратниці когерентної і дифузної складових дифрагованої інтенсивності (розд. 5). У другій частині роботи, яка друкується окремо, буде розглянуто дифузну складову динамічної картини розсіяння Рентгенових променів від недосконалих кристалів, яка реєструється на ТКД у режимі картографування оберненого простору.

## 2. ОСНОВНІ РІВНЯННЯ

Хвильове поле електричної індукції  $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ , що збуджується в кристалі падаючою з вакууму гармонічною пласкою хвилею з електричною напруженістю  $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 \exp(-i\mathbf{K}\mathbf{r} + it\omega / c)$  ( $\mathbf{r}$  — просторова координата,  $t$  — час,  $\omega$  і  $c$  — відповідно частота і швидкість

світла,  $K = 2\pi / \lambda$  — модуль хвильового вектора,  $\lambda$  — довжина хвилі), описується хвильовим рівнянням

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

яке одержується з рівнянь Максвелла за умови  $|\chi| \ll 1$ , де  $\chi(\mathbf{r})$  — поляризованість кристалу, помножена на  $4\pi$  [3].

На відміну від досконалого кристалу, де поляризованість  $\chi(\mathbf{r})$  можна розглядати як періодичну функцію і розвинути в ряд Фур'є по векторах оберненої ґратниці, в недосконалому кристалі цю функцію, як і поле електричної індукції  $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ , слід представляти у вигляді інтеграла Фур'є [5]:

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

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

де інтегрування проводиться по всьому імпульсному просторі, а  $\mathbf{q}$  в сумах (2) і (3) пробігає  $N$  дискретних значень в першій Бріллюєновій зоні;  $v_c$  — об'єм елементарної комірки. Підстановка (2) та (3) в (1) дає систему основних рівнянь для недосконалого кристалу:

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

Ця нескінченна система містить в собі амплітуди сильних і слабких Бреґгових хвиль  $\mathbf{D}_{\mathbf{G}}$  ( $\mathbf{G} = \mathbf{0}, \pm \mathbf{H}, \dots$ ), а також амплітуди дифузно розсіяних хвиль  $\mathbf{D}_{\mathbf{G}+\mathbf{k}}$  ( $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$ ).

Для розв'язання системи (1) Фур'є-компоненту  $\chi_{\mathbf{G}+\mathbf{g}}$  поляризованості кристалу зручно подати у вигляді суми усередненої за ансамблем дефектів та флюктуаційної ( $\delta\chi_{\mathbf{G}+\mathbf{g}}$ ) складових:

$$\chi_{\mathbf{G}+\mathbf{q}} = \langle \chi_{\mathbf{G}+\mathbf{q}} \rangle + \delta\chi_{\mathbf{G}+\mathbf{q}}, \quad (5)$$

причому флюктуаційна складова  $\delta\chi_{\mathbf{G}+\mathbf{q}} = \chi_{\mathbf{G}} - \langle \chi_{\mathbf{G}} \rangle$  при  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  і  $\delta\chi_{\mathbf{G}+\mathbf{q}} = \chi_{\mathbf{G}+\mathbf{q}}$  при  $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$ . Аналогічно хвильове поле вектора електричної індукції можна представити у вигляді суми усередненого за ансамблем дефектів і флюктуаційного доданків, які відповідають когерентно й дифузно розсіяним хвильовим полям:

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{D}(\mathbf{r}) \rangle + \delta\mathbf{D}(\mathbf{r}), \quad (6)$$

$$\langle \mathbf{D}(\mathbf{r}) \rangle = e^{-i\mathbf{K}_0\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{D}_{\mathbf{G}} e^{-i\mathbf{G}\mathbf{r}}, \quad (7)$$

$$\delta \mathbf{D}(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{K}_0 \mathbf{r}} \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \mathbf{D}_{\mathbf{G}+\mathbf{q}} e^{-i(\mathbf{G}+\mathbf{q})\mathbf{r}}, \quad (8)$$

де  $\mathbf{K}_0$  — хвильовий вектор прохідної когерентної плоскої хвилі в кристалі, а кутові дужки означають усереднення по статистичному ансамблю дефектів.

У двоххвильовому випадку дифракції всередині кристалу зберігаються тільки дві так звані «сильні» Бреггові (когерентні) хвилі. Тоді у рівняннях (4), так само, як і у виразах (7) і (8), залишаються тільки дві амплітуди когерентних хвиль  $\mathbf{D}_{\mathbf{G}}$  ( $\mathbf{G} = \mathbf{0}, \mathbf{H}$ ) і відповідні їм  $2N$  амплітуд дифузно розсіяних хвиль  $\mathbf{D}_{\mathbf{G}+\mathbf{q}}$  ( $N$  — число векторів оберненого простору, що перебувають у межах першої Бріллюєнової зони та задовольняють умовам циклічності). Рештою Бреггових (слабких) й дифузно розсіяних хвиль (з  $\mathbf{G} \neq \mathbf{0}, \mathbf{H}$ ) можна знехтувати. Тоді нескінченну систему (4) можна представити у вигляді двох зв'язаних систем рівнянь, а саме, однієї для двох амплітуд заломленої ( $\mathbf{D}_0$ ) і дифрагованої ( $\mathbf{D}_{\mathbf{H}}$ ) когерентних плоских хвиль із хвильовими векторами  $\mathbf{k} = \mathbf{K}_0$  і  $\mathbf{k} = \mathbf{K}_{\mathbf{H}} = \mathbf{K}_0 + \mathbf{H}$ :

$$\begin{cases} (-2\varepsilon_0 + \chi_0) D_0 + CE\chi_{-\mathbf{H}} D_{\mathbf{H}} = -\sum_{\mathbf{q}} (\delta\chi_{\mathbf{q}} D_{-\mathbf{q}} + C\delta\chi_{-\mathbf{H}+\mathbf{q}} D_{\mathbf{H}-\mathbf{q}}), \\ CE\chi_{\mathbf{H}} D_0 + (-2\varepsilon_{\mathbf{H}} + \chi_0) D_{\mathbf{H}} = -\sum_{\mathbf{q}} (C\delta\chi_{\mathbf{H}+\mathbf{q}} D_{-\mathbf{q}} + \delta\chi_{\mathbf{q}} D_{\mathbf{H}-\mathbf{q}}), \end{cases} \quad (9)$$

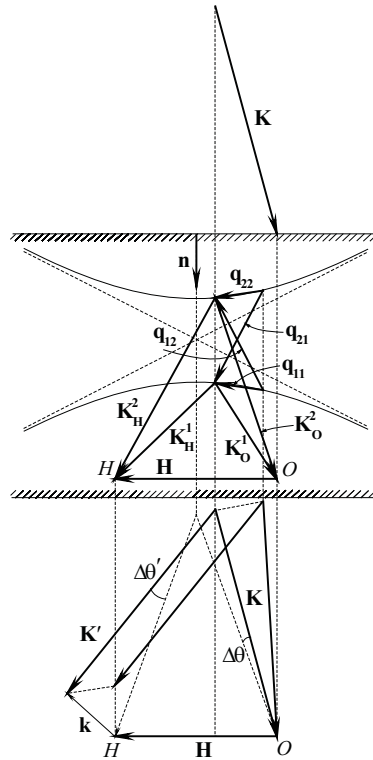
і другої для  $2N$  амплітуд заломлених ( $\mathbf{D}_{\mathbf{q}}$ ) і дифрагованих ( $\mathbf{D}_{\mathbf{H}+\mathbf{q}}$ ) дифузно розсіяних плоских хвиль із хвильовими векторами  $\mathbf{k} = \mathbf{K}_{0\mathbf{q}} = \mathbf{K}_0 + \mathbf{q}$  і  $\mathbf{k} = \mathbf{K}_{\mathbf{H}\mathbf{q}} = \mathbf{K}_{\mathbf{H}} + \mathbf{q}$ :

$$\begin{cases} (-2\varepsilon_{0\mathbf{q}} + \chi_0) D_{\mathbf{q}} + CE\chi_{-\mathbf{H}} D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}} = \\ = -(\delta\chi_{\mathbf{q}} D_0 + C\delta\chi_{-\mathbf{H}+\mathbf{q}} D_{\mathbf{H}}) - \sum_{\mathbf{q}' \neq \mathbf{q}} (\delta\chi_{\mathbf{q}'} D_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'} + C\delta\chi_{-\mathbf{H}+\mathbf{q}'} D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'}), \\ CE\chi_{\mathbf{H}} D_{\mathbf{q}} + (-2\varepsilon_{\mathbf{H}\mathbf{q}} + \chi_0) D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}} = \\ = -(C\delta\chi_{\mathbf{H}+\mathbf{q}} D_0 + \delta\chi_{\mathbf{q}} D_{\mathbf{H}}) - \sum_{\mathbf{q}' \neq \mathbf{q}} (C\delta\chi_{\mathbf{H}+\mathbf{q}'} D_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'} + \delta\chi_{\mathbf{q}'} D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'}), \end{cases} \quad (10)$$

де поляризаційний множник  $C = 1$  або  $C = 2\theta_B$  відповідно для  $\sigma$ - й  $\pi$ -поляризацій вектора  $\mathbf{D}$ ,  $E = \exp(-L_{\mathbf{H}})$  — статичний фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера [1];  $\theta_B$  — Бреггів кут. Похибки збудження для сильних Бреггових хвиль у рівняннях (9) і для дифузно розсіяних хвиль у рівняннях (10) відповідно означені як:

$$\varepsilon_{\mathbf{G}} = \frac{K_{\mathbf{G}} - K}{K} \approx \frac{K_{\mathbf{G}}^2 - K^2}{2K^2}, \quad \varepsilon_{\mathbf{G}\mathbf{q}} = \frac{K_{\mathbf{G}\mathbf{q}} - K}{K} \approx \frac{K_{\mathbf{G}\mathbf{q}}^2 - K^2}{2K^2}, \quad (11)$$

де  $\mathbf{G} = \mathbf{0}$  і  $\mathbf{H}$ .



**Рис. 1.** Співвідношення між хвильовими векторами когерентних ( $\mathbf{K}_0^\delta, \mathbf{K}_H^\delta$ ) та дифузно розсіяних ( $\mathbf{K}_0^\delta + \mathbf{q}_{\delta\tau}, \mathbf{K}_H^\delta + \mathbf{q}_{\delta\tau}$ ) плоских хвиль і відповідними переданими імпульсами ( $\mathbf{q}_{\delta\tau}$ ) всередині кристалу для симетричного випадку дифракції за Ляве ( $\mathbf{H}$  — вектор оберненої ґратниці). Хвильові вектори падаючої ( $\mathbf{K}$ ) та дифузно розсіяної ( $\mathbf{K}'$ ) плоских хвиль у вакуумі показано у відповідності до межових умов;  $\mathbf{n}$  — внутрішня нормаль до вхідної поверхні кристалу,  $\Delta\theta$  та  $\Delta\theta'$  — кутові відхилення відповідно векторів  $\mathbf{K}$  та  $\mathbf{K}'$  від їх точних Бреггових напрямків в площині  $(\mathbf{K}, \mathbf{H})$ ;  $\mathbf{k}$  — переданий імпульс у вакуумі. Гілки гіперболи є перетинами листів дисперсійної поверхні з площиною когерентного розсіяння  $(\mathbf{K}, \mathbf{H})$ , вектори  $\mathbf{q}_{\delta\tau}, \mathbf{k}$  та  $\mathbf{K}'$  мають компоненти, перпендикулярні до цієї площини.

Нескінченна система рівнянь (10) може бути розв'язана методом ітерацій. Відповідний розв'язок має вигляд [13, 14]:

$$D_{\mathbf{q}} = \frac{1}{d(\mathbf{q})} \left\{ [CE\chi_{-H} + \Delta\chi'_{0H}(\mathbf{q})] A'_H(\mathbf{q}) - [-2\varepsilon_{Hq} + \chi_0 + \Delta\chi'_{HH}(\mathbf{q})] A'_0(\mathbf{q}) \right\}, \quad (12)$$

$$D_{H+\mathbf{q}} = \frac{1}{d(\mathbf{q})} \left\{ [CE\chi_H + \Delta\chi'_{H0}(\mathbf{q})] A'_0(\mathbf{q}) - [-2\varepsilon_{0q} + \chi_0 + \Delta\chi'_{00}(\mathbf{q})] A'_H(\mathbf{q}) \right\},$$

де позначено:

$$A'_0(\mathbf{q}) = \delta\chi_q D_0 + C\delta\chi_{-H+q} D_H, \quad A'_H(\mathbf{q}) = C\delta\chi_{H+q} D_0 + \delta\chi_q D_H,$$

$$\Delta\chi'_{GG'}(\mathbf{q}) = sC^2 \sum_{\mathbf{q}' \neq \mathbf{q}} \frac{a_{GG'}(\mathbf{q}' - \mathbf{q}) + \Delta\chi'_{GG'}(\mathbf{q}' - \mathbf{q})}{d(\mathbf{q}' - \mathbf{q})} S_{GG'}(\mathbf{q}'), \quad (13)$$

$$d(\mathbf{q}) = [-2\varepsilon_{0q} + \chi_0 + \Delta\chi'_{00}(\mathbf{q})] \times$$

$$\times [-2\varepsilon_{Hq} + \chi_0 + \Delta\chi'_{HH}(\mathbf{q})] - [CE\chi_{-H} + \Delta\chi'_{0H}(\mathbf{q})][CE\chi_H + \Delta\chi'_{H0}(\mathbf{q})]. \quad (14)$$

Вираз (13) представляє дисперсійні поправки до хвильових векторів дифузно розсіяних хвиль, а рівняння  $d(\mathbf{q}) = 0$  описує дисперсійну поверхню для цих векторів і при врахуванні межових умов дає змогу знайти передані імпульси  $\mathbf{q}_{\delta\tau}$  ( $\delta, \tau = 1, 2$ ) від хвильових векторів сильних Бреґгових хвиль до хвильових векторів дифузно розсіяних хвиль (див. рис. 1).

У формулах (13) та (14) використано позначення  $s = 1$  при  $\mathbf{G}' \neq \mathbf{G}$  і  $s = -1$  при  $\mathbf{G}' = \mathbf{G}$ ,  $a_{GG}(\mathbf{q}) = -2\varepsilon_{Gq} + \chi_0$ ,  $a_{GG'}(\mathbf{q}) = CE\chi_{G'-G}$  при  $\mathbf{G}' \neq \mathbf{G}$ . Кореляційна функція в (13) визначається як середнє по ансамблю дефектів:

$$S_{GG'}(\mathbf{q}) = \langle \delta\chi_{\mathbf{q}-\mathbf{H}+2\mathbf{G}} \delta\chi_{-\mathbf{q}+\mathbf{H}-2\mathbf{G}'} \rangle, \quad (15)$$

де  $\mathbf{G}$  й  $\mathbf{G}' = \mathbf{0}$  або  $\mathbf{H}$ , і була введена замість відповідних добутків флюктуаційних компонент Фур'є поляризованості кристалу. Така заміна можлива, якщо можна знехтувати відхиленням добутків флюктуаційних компонент від їхнього усередненого добутку, що буде мати місце, якщо об'єм кристалу і концентрація дефектів досить великі, і розподіл дефектів можна вважати однорідним. При одержанні рівнянь (13) припускалось, що виконано нерівності:

$$\langle \delta\chi_q \delta\chi_{-q} \rangle \ll \langle \delta\chi_q \delta\chi_{-q \pm H} \rangle \ll \langle \delta\chi_{q \pm H} \delta\chi_{-q \pm H} \rangle, \quad (16)$$

які справедливі в області  $q \ll H$ , оскільки  $\delta\chi_{H+q} \propto |H+q|$  [4].

Щоб описати ослаблення когерентних хвиль внаслідок ДР, потрібно підставити амплітуди дифузних хвиль (12) у праву частину рівнянь (9). Враховуючи нерівності (16) і нехтуючи доданками більш високого порядку малости, одержимо систему рівнянь для визначення амплітуд сильних Бреґгових хвиль:

$$\begin{cases} (-2\varepsilon_0 + \chi_0 + \Delta\chi_{00}) D_0 + (CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}) D_H = 0, \\ (CE\chi_H + \Delta\chi_{H0}) D_0 + (-2\varepsilon_H + \chi_0 + \Delta\chi_{HH}) D_H = 0, \end{cases} \quad (17)$$

де дисперсійні поправки до хвильових векторів «сильних» Бреґ-

гових хвиль, що обумовлені ДР, визначаються за допомогою наступних рівнянь [13, 14]:

$$\Delta\chi_{GG'}(\mathbf{q}) = sC^2 \sum_{\mathbf{q}} \frac{a_{GG'} + \Delta\chi_{GG'}(\mathbf{q})}{d(\mathbf{q})} S_{GG'}(-\mathbf{q}). \quad (18)$$

Одержані із застосуванням теорії збурень рівняння для амплітуд хвиль (17) і дисперсійних поправок (18) справедливі, якщо виконується нерівність

$$|\Delta\chi_{GG'}(\mathbf{q})| \ll E|\chi_{\pm\mathbf{H}}|, \quad (19)$$

де  $\mathbf{G}, \mathbf{G}' = \mathbf{0}, \mathbf{H}$  й врахована нерівність  $|\chi_{\pm\mathbf{H}}| < |\chi_0|$ .

### 3. КОГЕРЕНТНІ КОМПОНЕНТИ КОЕФІЦІЄНТІВ ПРОХОДЖЕННЯ ТА ВІДБИТТЯ

Однорідна система рівнянь (17) може мати відмінні від нуля розв'язки тільки за умови рівності нулю її детермінанта:

$$(-2\varepsilon_0 + \chi_0 + \Delta\chi_{00})(-2\varepsilon_{\mathbf{H}} + \chi_0 + \Delta\chi_{\mathbf{H}\mathbf{H}}) - (CE\chi_{-\mathbf{H}} + \Delta\chi_{0\mathbf{H}})(CE\chi_{\mathbf{H}} + \Delta\chi_{\mathbf{H}0}) = 0. \quad (20)$$

Корені дисперсійного рівняння (20) можна визначити, скориставшись зв'язком між величинами похибок збудження  $\varepsilon_0$  і  $\varepsilon_{\mathbf{H}}$  (11) для хвильових векторів прохідної та дифрагованої плоских хвиль  $\mathbf{K}_0 = \mathbf{K} + (\varepsilon_0 / \gamma_0) \mathbf{n}$ ,  $\mathbf{K}_{\mathbf{H}} = \mathbf{K} + (\varepsilon_{\mathbf{H}} / \gamma_{\mathbf{H}}) \mathbf{n}$ , що записані з врахуванням межових умов для них:

$$\varepsilon_{\mathbf{H}} = \varepsilon_0 \gamma_{\mathbf{H}} / \gamma_0 + \tilde{\alpha}, \quad \tilde{\alpha} = -\Delta\theta \sin 2\theta_B, \quad (21)$$

де  $\mathbf{n}$  — внутрішня нормаль до вхідної поверхні плоскопаралельної кристалічної пластинки,  $\Delta\theta \cong |\mathbf{K} - \mathbf{K}_B| / K$  — відхилення хвильового вектора  $\mathbf{K}$  падаючої хвилі від точного Бреґґового напрямку  $\mathbf{K}_B$ . Оскільки квадратне рівняння (20) має два корені, то ми одержуємо два різних листи дисперсійної поверхні, а відтак, і по два хвильових вектори для прохідної  $\mathbf{K}_0^\delta$  та дифрагованої  $\mathbf{K}_{\mathbf{H}}^\delta$  «сильних» Бреґґових хвиль ( $\delta = 1, 2$ ). Підставляючи (21) в (20), одержимо акомодатції  $\Delta_\delta = \varepsilon_0^\delta / \gamma_0$  хвильового вектора падаючої плоскої хвилі в кристалі  $\mathbf{K}_0^\delta = \mathbf{K} + K\Delta_\delta \mathbf{n}$ :

$$\Delta_\delta = \frac{1}{2\gamma_0} (\chi_0 + \Delta\chi_{00}) + \frac{\lambda}{2\Lambda} \left( y + (-1)^\delta \sqrt{y^2 + 1} \right), \quad (22)$$



$$y = \frac{\tilde{\alpha} - \alpha_0}{\sigma} \sqrt{b}, \quad 2\alpha_0 = \chi_0 + \Delta\chi_{\text{HH}} - \frac{1}{b}(\chi_0 + \Delta\chi_{00}),$$

$$\Lambda = \frac{\lambda\gamma_{\text{H}}\sqrt{b}}{\sigma}, \quad \sigma^2 = (CE\chi_{-\text{H}} + \Delta\chi_{0\text{H}})(CE\chi_{\text{H}} + \Delta\chi_{\text{H}0}),$$

де  $b = \gamma_0 / \gamma_{\text{H}}$  — параметер асиметрії дифракції;  $\gamma_0$  і  $\gamma_{\text{H}}$  — напрямні косинуси відповідно прохідної та дифрагованої хвиль,  $\delta = 1, 2$ .

Відповідно всередині кристалу утворюються дві плоскі хвилі заломленого випромінювання із хвильовими векторами  $\mathbf{K}_0^{(\delta)} = \mathbf{K} + K\Delta_{\delta}\mathbf{n}$  й амплітудами  $D_0^{(\delta)}$ , що формують прохідну хвилю:

$$D_{\text{T}}(\mathbf{r}) = \sum_{\delta} D_0^{(\delta)} \exp(-i\mathbf{K}_0^{(\delta)}\mathbf{r}), \quad (23)$$

й відповідні їм дві плоскі хвилі дифрагованого випромінювання із хвильовими векторами  $\mathbf{K}_{\text{H}}^{(\delta)} = \mathbf{K} + \mathbf{H} + K\Delta_{\delta}\mathbf{n}$  й амплітудами  $D_{\text{H}}^{(\delta)}$ :

$$D_{\text{S}}(\mathbf{r}) = \sum_{\delta} D_{\text{H}}^{(\delta)} \exp(-i\mathbf{K}_{\text{H}}^{(\delta)}\mathbf{r}), \quad (24)$$

де  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  — координата всередині кристалу. Таким чином, сумарне когерентне хвильове поле в кристалі складається із чотирьох плоских хвиль:

$$\tilde{D}(\mathbf{r}) = D_{\text{T}}(\mathbf{r}) + D_{\text{S}}(\mathbf{r}). \quad (25)$$

Для визначення амплітуд  $D_0^{(\delta)}$  і  $D_{\text{H}}^{(\delta)}$  потрібно скористатися умовами неперервності хвильового поля на межі переходу з вакууму в кристал. На вхідній поверхні кристалу межові умови мають вигляд:

$$D_{\text{T}}(\mathbf{r}) = E_0 \exp(-i\mathbf{K}\mathbf{r})|_{z=0}, \quad D_{\text{S}}(\mathbf{r}) = 0|_{z=0}, \quad (26)$$

де  $E_0$  — амплітуда падаючої плоскої хвилі. Враховуючи зв'язок між амплітудами  $D_0^{(\delta)}$  й  $D_{\text{H}}^{(\delta)}$  згідно (17):

$$D_{\text{H}}^{(\delta)} = c^{(\delta)} D_0^{(\delta)}, \quad c^{(\delta)} = -\frac{-2\gamma_0\Delta_{\delta} + \chi_0 + \Delta\chi_{00}}{CE\chi_{-\text{H}} + \Delta\chi_{0\text{H}}}, \quad (27)$$

одержимо з умов (26) значення амплітуд:

$$D_0^{(\delta)} = -(-1)^{\delta} \frac{c^{(\delta)} E_0}{c^{(2)} - c^{(1)}}, \quad \delta \neq \delta'. \quad (28)$$

Після проходження випромінювання через кристал у вакуумі утворюються дві плоскі хвилі: одна, з амплітудою  $E_{\text{T}}$  і хвильовим вектором  $\mathbf{K}'_0$ , що відповідає прохідній хвилі, і друга з амплітудою  $E_{\text{S}}$  — дифрагованій. Із закону збереження енергії й неперервності тангенціальних компонент хвильових векторів на поверхнях кристалу ви-

пливає, що хвильовий вектор  $\mathbf{K}'_0$  прохідної хвилі у вакуумі дорівнює хвильовому вектору  $\mathbf{K}$  падаючої на кристал пласкої хвилі. Аналогічно, хвильовий вектор  $\mathbf{K}'_H$  дифрагованої хвилі у вакуумі може бути знайдений з умови  $K'_H = K$  та рівності тангенційних компонент векторів  $\mathbf{K}'_H$  та  $\mathbf{K}^\delta_H$ :  $\mathbf{K}^\delta_H = \mathbf{K}'_H + (\varepsilon_H^\delta / \gamma_H) \mathbf{n}$ .

З використанням умов неперервності хвильового поля на вихідній поверхні кристалу ( $z=t$ ,  $t$  — товщина кристалу) можна одержати з рівнянь (23) амплітуди  $E_T$  і  $E_S$ :

$$D_T(\mathbf{r}) = E_T \exp(-i\mathbf{K}'_0 \mathbf{r})|_{z=t}, \quad D_S(\mathbf{r}) = E_S \exp(-i\mathbf{K}'_H \mathbf{r})|_{z=t}. \quad (29)$$

Розв'язок цієї системи з урахуванням рівностей (26) визначає амплітуди  $E_T$  й  $E_S$  через  $E_0$ :

$$E_T = \frac{E_0}{c^{(2)} - c^{(1)}} \left[ c^{(2)} \exp(-iK\Delta_1 t) - c^{(1)} \exp(-iK\Delta_2 t) \right], \quad (30)$$

$$E_S = \frac{E_0 c^{(1)} c^{(2)}}{c^{(2)} - c^{(1)}} \left[ \exp(-iK\Delta_1 t) - \exp(-iK\Delta_2 t) \right] \exp(-iKt\tilde{\alpha}). \quad (31)$$

У виразі (22) можна виділити два доданки:  $\beta$  — загальний для акомодаций  $\Delta_1$  і  $\Delta_2$ , та доданок пропорційний  $W$ , який входить з протилежними знаками:

$$\beta = \frac{1}{2\gamma_0} (\chi_0 + \Delta\chi_{00}) + \frac{\sigma\sqrt{b}}{2\gamma} y, \quad W = \frac{\sigma}{\sqrt{b}} \sqrt{y^2 + 1}. \quad (32)$$

З урахуванням (32) можна переписати (30) та (31) у більш зручному для аналізу вигляді:

$$E_T = E_0 \frac{\exp(-iKt\beta)}{2\sqrt{y^2 + 1}} \times \left[ \left( y + \sqrt{y^2 + 1} \right) \exp\left(-i \frac{KtW}{2\gamma_H}\right) - \left( y - \sqrt{y^2 + 1} \right) \exp\left(i \frac{KtW}{2\gamma_H}\right) \right], \quad (33)$$

$$E_S = \frac{E_0 \sigma \sqrt{b}}{CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}} \frac{\exp(-iKt\beta)}{2\sqrt{y^2 + 1}} \times \left[ \exp\left(-i \frac{KtW}{2\gamma_H}\right) - \exp\left(i \frac{KtW}{2\gamma_H}\right) \right] \exp(-iKt\tilde{\alpha}). \quad (34)$$

Коефіцієнти проходження  $T$  і відбиття  $R$  за означенням дорівнюють квадрату модуля відношень амплітуд відповідно прохідної та дифрагованої хвиль до амплітуди падаючої хвилі:

$$T = \left| \frac{E_T}{E_0} \right|^2, \quad R = \frac{\gamma_H}{\gamma_0} \left| \frac{E_S}{E_0} \right|^2. \quad (35)$$

Уявну частину величини  $\beta$ , що входить у показник експонент в (33)–(34) та визначає коефіцієнт поглинання, можна записати у вигляді двох доданків:

$$\text{Im } \beta = \frac{1}{K} (\mu_0 + M_{DS}), \quad (36)$$

де  $\mu_0$  — нормальний коефіцієнт фотоелектричного поглинання

$$\mu_0 = -\frac{K\chi_{i0}}{2} \left( \frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_H} \right), \quad (37)$$

а  $M_{DS}$  — нормальний коефіцієнт поглинання, що обумовлений уявною частиною дисперсійних поправок внаслідок ДР на дефектах до хвильових векторів «сильних» Брегг'ових хвиль у випадку дифракції за Ляве:

$$M_{DS} = -\frac{K}{2} \text{Im} \left( \frac{\Delta\chi_{00}}{\gamma_0} + \frac{\Delta\chi_{HH}}{\gamma_H} \right). \quad (38)$$

У виразі (37)  $\chi_{iG}$  ( $\mathbf{G} = \mathbf{0}, \mathbf{H}$ ) представляє відповідну Фур'є-компоненту уявної частини комплексної поляризованості кристалу  $\chi(\mathbf{r}) = \chi_r(\mathbf{r}) + \chi_i(\mathbf{r})$ .

Тоді для коефіцієнтів проходження й відбиття (35) одержимо вирази:

$$\begin{aligned} T = & \exp[-(\mu_0 + M_{DS})t] \frac{1}{4|y^2 + 1|^2} \times \\ & \times \left\{ \left| y + \sqrt{y^2 + 1} \right|^2 \exp(-Ktw_i) + \left| y - \sqrt{y^2 + 1} \right|^2 \exp(Ktw_i) - \right. \\ & \left. - 2 \text{Re} \left[ \left( y + \sqrt{y^2 + 1} \right) \left( y - \sqrt{y^2 + 1} \right)^* \exp(iKtw_r) \right] \right\}, \quad (39) \end{aligned}$$

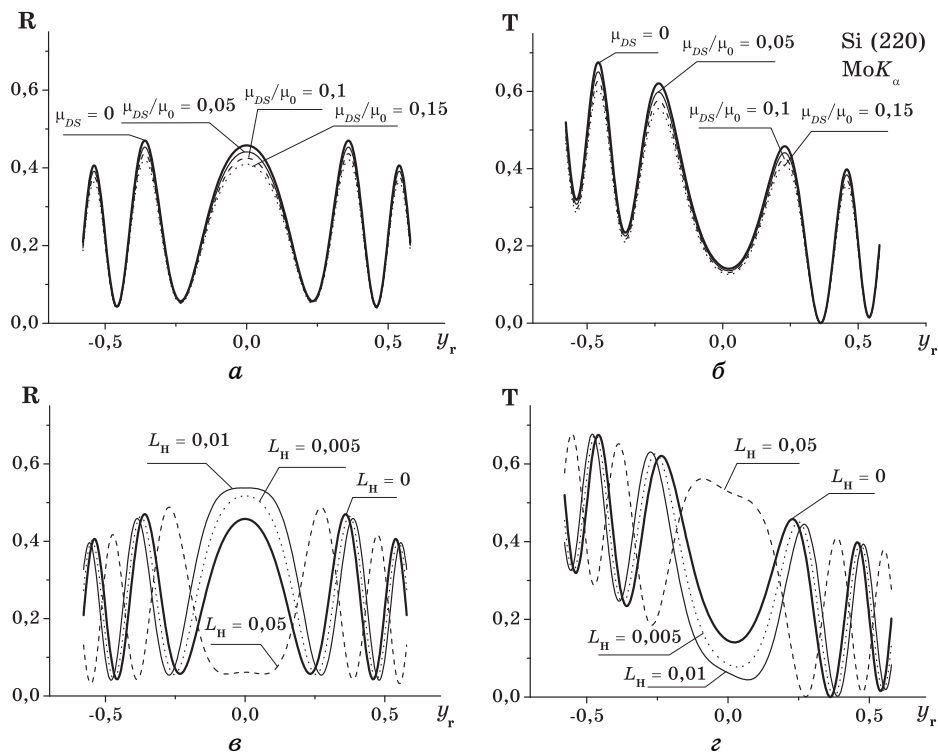
$R =$

$$= \frac{\exp[-(\mu_0 + M_{DS})t]}{4|y^2 + 1|^2} |\zeta|^2 \left\{ \exp(Ktw_i) + \exp(-Ktw_i) - 2 \cos(Ktw_r) \right\}, \quad (40)$$

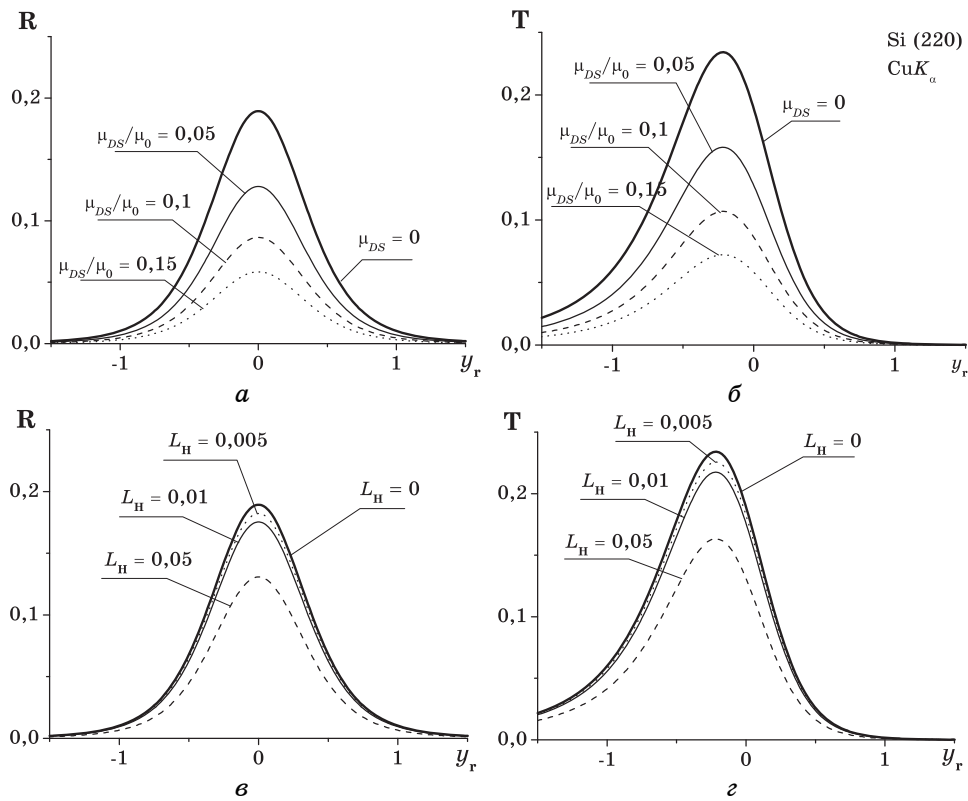
де  $w_r = \text{Re}w$ ,  $w_i = \text{Im}w$ ,  $w = W/\gamma_H$ ,  $\zeta = \left[ (CE\chi_H + \Delta\chi_{H0})(CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H})^{-1} \right]^{1/2}$ .

На рисунках 2 і 3 представлено кутові залежності коефіцієнтів відбиття і проходження монокристалічної пластинки кремнію товщиною 500 мкм з однорідно розподіленими дефектами в геометрії дифракції за Ляве відповідно для асимптотичних випадків тонкого (випромінення  $\text{MoK}_\alpha$ ) і товстого (випромінення  $\text{CuK}_\alpha$ ) кристалів. Для порівняння на рисунках наведено також коефіцієнти відбиття і проходження досконалого кристалу (товста суцільна лінія).

У випадку тонкого кристалу (рис. 2, а, б) зі збільшенням величини коефіцієнта поглинання внаслідок ДР максимуми центрального і бокових піків коефіцієнтів відбиття і проходження знижуються, але в незначній мірі. У випадку товстого кристалу, як видно з рис. 3, а і б, вплив екстинкції внаслідок ДР значно зростає порівняно з попереднім випадком, що обумовлено збільшенням коефіцієнта аномального проходження ( $\mu_{AT} = \mu_0 - \mu_H \text{CE}$ , де  $\mu_H = K|\chi_{iH}|$ ) за рахунок додавання до нього коефіцієнта поглинання внаслідок ДР  $\mu_{ds}$  (див. (68)).



**Рис. 2.** Криві дифракційного відбиття (а і в) і проходження (б і г) кристалу кремнію товщиною 500 мкм у випадку симетричної геометрії дифракції за Ляве (рефлекс  $\text{Si}(220)$ , випромінення  $\text{MoK}_\alpha$ , що відповідає наближенню тонкого кристалу,  $|\Lambda| \approx 41$  мкм) при різних значеннях коефіцієнта поглинання внаслідок ДР (а і б) і показника статичного фактора Дебая–Валлера (в і г).



**Рис. 3.** Криві дифракційного відбиття і проходження кристалу кремнію у наближенні товстого кристалу (випромінення  $\text{CuK}_{\alpha}$ ,  $|\Lambda| \approx 17$  мкм). Решта даних наведена у підпису до рис. 2.

Збільшення величини показника  $L_H$  статичного фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера  $E$  у випадку товстого кристалу призводить до його зменшення і, відповідно, до збільшення коефіцієнта аномального проходження  $\mu_{AT}$  (рис. 3, в, г), що подібно до впливу коефіцієнта поглинання внаслідок ДР. У той же час, у випадку тонкого кристалу збільшення величини показника статичного фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера призводить до зміни фаз хвильових полів у недосконалім кристалі. При цьому спостерігається не тільки зниження висоти піків, як у товстому кристалі (рис. 3, в, г), а і зміна їх тонкої структури, зокрема, змінюється форма центральної частини кутових залежностей  $T$  і  $R$  та збільшується період їх бокових осциляцій (рис. 2, в, г). Для деяких значень показника  $L_H$  ефект зміни фазових співвідношень є настільки сильним, що спостерігається обернення контрасту коефіцієнтів проходження і відбиття, тобто, центральні пік і провал у цих коефіцієнтах міняються місцями (див. криві для  $L_H = 0,05$  на рис. 2, в і г).

#### 4. ДИСПЕРСІЙНІ ПОПРАВКИ ВНАСЛІДОК ДР

Дисперсійні поправки внаслідок ДР можна представити у вигляді суми дійсної та уявної частин:

$$\Delta\chi_{GG'} = P_{GG'}^\delta - i\mu_{GG'}^\delta / K. \quad (41)$$

В першій наближенні теорії збурень можна обчислити коефіцієнти поглинання внаслідок ДР за виразом [13]

$$\mu_{GG'}^\delta(\Delta\theta) = C^2 K^2 \frac{V}{8\pi^2} \sum_{\tau=1,2} (-1)^\tau \operatorname{Re} \int_{K'=K_{0q}^{\delta\tau}} dS_{K'} f_{GG'}(\mathbf{q}_{\delta\tau}) S_{GG'}(-\mathbf{q}_{\delta\tau}), \quad (42)$$

де при незмінній  $\delta$  обчислюються інтеграли для обох листів дисперсійної поверхні хвильових векторів  $\mathbf{K}_{0q}^{\delta\tau}$  дифузно розсіяних плоских хвиль і введено позначення:

$$f_{GG'}(\mathbf{q}_{\delta\tau}) = \mathbf{a}_{GG'}^\tau \left[ 4\gamma_H (\Delta_\tau'^0 - \Delta_1'^0) \right]^{-1}, \quad (43)$$

$$\mathbf{a}_{GG'}^\tau = -2\varepsilon_{Gq}^{0\tau} + \chi_0, \quad \mathbf{a}_{0H}^\tau = CE\chi_H, \quad \mathbf{a}_{H0}^\tau = CE\chi_{-H},$$

$$\mathbf{K}_{0q}^{\delta\tau} = \mathbf{K}_0^\delta + \mathbf{q}_{\delta\tau}, \quad (44)$$

$$\mathbf{q}_{\delta\tau} = \mathbf{k} + K(\Delta_\tau'^0 - \Delta_\delta^0) \mathbf{n}, \quad (45)$$

$$\varepsilon_{Hq}^{0\tau} = \varepsilon_{0q}^{0\tau} \gamma_H / \gamma_0 + \tilde{\alpha}', \quad \varepsilon_{0q}^{0\tau} = \gamma_0 \Delta_\tau'^0, \quad \tilde{\alpha}' = -\Delta\theta' \sin(2\theta_B), \quad (46)$$

$$\Delta_\tau'^0 = \frac{\chi_0}{2\gamma_0} + \frac{\lambda}{2\Lambda_0} \left[ y_0' + (-1)^\tau \sqrt{y_0'^2 + 1} \right], \quad (47)$$

$$y_0' = (\tilde{\alpha}' - \alpha_0^0) \sqrt{b} / \sigma_0, \quad \alpha_0^0 = \chi_0 (1 - b^{-1}) / 2, \quad \sigma_0 = C^2 E^2 \chi_H \chi_{-H}. \quad (48)$$

Кореляційні функції  $S_{GG'}(\mathbf{q})$  в рівнянні (42) задаються виразом (15), де комплексний імпульс  $\mathbf{q}$  має вигляд (45).

Оскільки поведінка кореляційної функції  $S_{GG'}(\mathbf{q})$  майже не змінюється при різних значеннях індексів  $\delta$  і  $\tau$ , то можна покласти:

$$S_{GG'}(\mathbf{q}_{\delta\tau}) \approx S(\mathbf{q}) = \operatorname{Re} \langle \delta\chi_{q+H} \delta\chi_{-q-H} \rangle, \quad (49)$$

де  $\mathbf{q} = \mathbf{k} + i\mu\mathbf{n}$ , а  $\mu$  дорівнює граничному значенню інтерференційного коефіцієнта поглинання  $\mu_i^{\delta\tau} = K \operatorname{Im}(\Delta_\tau'^0 - \Delta_\delta^0)$  при  $|\Delta\theta|$  та  $|\Delta\theta'| \rightarrow \infty$ . Тепер ми можемо наближено підсумувати вираз (42) використовуючи співвідношення (44)–(47) та замінюючи інтегрування по листах дисперсійної поверхні на інтегрування по площині, дотичній до Евальдової сфери поблизу розглядуваної точки оберненої ґратниці:

$$\mu_{00}(\Delta\theta) \approx b \frac{C^2 V}{4\lambda^2} \int d\mathbf{k}' S(\mathbf{q}), \quad (50)$$

$$\mu_{\text{HH}}(\Delta\theta) \approx b^{-1}\mu_{00}(\Delta\theta), \quad (51)$$

$$\mu_{0\text{H}}(\Delta\theta) \approx \mu_{\text{H}0}(\Delta\theta) \approx 0. \quad (52)$$

Для обчислення функції (49) скористаємось методом флюктуаційних хвиль концентрацій дефектів [1], і при  $c_\alpha \ll 1$  та  $q \ll k_{m\alpha} = 1/R_{\text{eff}}^\alpha$  ( $\alpha$  — тип дефекту, а  $R_{\text{eff}}^\alpha$  — його ефективний радіус [18]) одержимо наближений вираз для флюктуаційної складової поляризованості кристалу  $\delta\chi_{\text{G}+\text{q}}$ :

$$\delta\chi_{\text{H}+\text{q}} \approx iE\chi_{\text{H}} \sum_{\alpha} (\mathbf{H}\mathbf{u}_{\text{q}\alpha}) c_{\text{q}\alpha}, \quad (53)$$

$$\mathbf{u}_{\text{q}\alpha} = \frac{1}{v_c} \int d\mathbf{r} \mathbf{U}_{\alpha}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad c_{\text{q}\alpha} = \frac{1}{N} \sum_t (c_{t\alpha} - c_{\alpha}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_t}, \quad (54)$$

де  $\mathbf{u}_{\text{q}\alpha}$  — Фур'є-компоненти полів статичних зміщень ( $\mathbf{U}_{\alpha}(\mathbf{r})$ ) від дефектів типу  $\alpha$ ;  $c_{\text{q}\alpha}$  — Фур'є-компоненти флюктуацій концентрації дефектів;  $N$  — кількість елементарних комірок в кристалі. Якщо у розташуванні дефектів у кристалі існують тільки парні кореляції, то виконується рівність [1]:

$$\langle c_{\text{q}\alpha} c_{\text{q}\alpha'}^* \rangle = \frac{1}{N} \left[ \delta_{\alpha\alpha'} c_{\alpha} (1 - c_{\alpha}) + \sum_{\rho \neq 0} \varepsilon_{\alpha\alpha'}(\rho) e^{i\mathbf{q}\rho} \right], \quad (55)$$

де  $\delta_{\alpha\alpha'}$  — Кронекерів символ та  $\varepsilon_{\alpha\alpha'}(\rho)$  — параметри парної кореляції. Тоді для кореляційної функції (49) ми одержуємо:

$$S(\mathbf{q}) = \sum_{\alpha} S_{\alpha}(\mathbf{q}) + \sum_{\alpha\alpha'} S_{\alpha\alpha'}(\mathbf{q}), \quad (56)$$

$$S_{\alpha}(\mathbf{q}) = \frac{c_{\alpha}}{N} E^2 \chi_{\text{H}} \chi_{-\text{H}} F_{\alpha}^{\text{H}}(\mathbf{q}), \quad F_{\alpha}^{\text{H}}(\mathbf{q}) = (\mathbf{H}\mathbf{u}_{\text{q}\alpha})(\mathbf{H}\mathbf{u}_{-\text{q}\alpha}), \quad (57)$$

$$S_{\alpha\alpha'}(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} E^2 \chi_{\text{H}} \chi_{-\text{H}} \sum_{\rho \neq 0} \varepsilon_{\alpha\alpha'}(\rho) F_{\alpha\alpha'}^{\text{H,H}}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\rho}, \quad F_{\alpha\alpha'}^{\text{H,H}}(\mathbf{q}) = (\mathbf{H}\mathbf{u}_{\text{q}\alpha})(\mathbf{H}\mathbf{u}_{-\text{q}\alpha'}). \quad (58)$$

Друга сума в рівнанні (56) враховує вплив парних кореляцій у розподілі дефектів, верхній індекс в рівняннях (57) та (58) використаний для позначення того, що ці рівняння справедливі тільки в області розсіяння Хуаня–Кривоглаза, тобто при  $q < k_{m\alpha}$ . В області розсіяння Стокса–Вільсона (тобто при  $q \gg k_{m\alpha}$ ) кожний доданок у виразі (53) потрібно помножити на  $k_{m\alpha}/q$  (див. [14] та [18]) і, відповідно, замінити функції  $F_{\alpha}^{\text{H}}(\mathbf{q})$  та  $F_{\alpha\alpha'}^{\text{H,H}}(\mathbf{q})$  в рівняннях (57)–(58) на

$$F_{\alpha}^{\text{SW}}(\mathbf{q}) = F_{\alpha}^{\text{H}}(\mathbf{q}) k_{m\alpha}^2 / q^2, \quad (59)$$

та

$$F_{\alpha\alpha'}^{SW}(\mathbf{q}) = F_{\alpha\alpha'}^H(\mathbf{q}) k_{m\alpha} k_{m\alpha'} / q^2, \quad (60)$$

якщо  $q > k_{m\alpha}$  та  $q > k_{m\alpha'}$ , або на

$$F_{\alpha\alpha'}^{H,SW}(\mathbf{q}) = F_{\alpha\alpha'}^H(\mathbf{q}) k_{m\alpha} / q \text{ чи } F_{\alpha\alpha'}^{H,SW}(\mathbf{q}) = F_{\alpha\alpha'}^H(\mathbf{q}) k_{m\alpha'} / q, \quad (61)$$

якщо  $q > k_{m\alpha}$  та  $q < k_{m\alpha'}$  чи  $q < k_{m\alpha}$  та  $q > k_{m\alpha'}$ .

Як вже зазначалося, сферично несиметричні дефекти можуть мати в кристалі лише дискретний набір рівноцінних орієнтацій вздовж певних кристалографічних напрямків. Далі, на прикладі призматичних дисльокаційних петель з дискретною орієнтацією Бюргерсових векторів, проведено врахування впливу ефектів анізотропії полів зміщень атомів кристалу навколо цих дефектів на спричинені ДР дисперсійні поправки до хвильових векторів «сильних» Бреґґових хвиль. Анізотропія полів зміщень навколо дефектів розглядається в наближенні пружньоізотропного середовища і пов'язується з симетрією кристалічної ґратниці за рахунок врахування певної дискретної орієнтації дефектів у кристалі. При цьому, вищезазначені ефекти анізотропії будуть визначатись взаємною орієнтацією дефектів і вектора дифракції  $\mathbf{H}$ . Для кристалу кубічної симетрії, який містить однорідно розподілені дисльокаційні петлі з Бюргерсовими векторами  $(\mathbf{b}) \langle 110 \rangle$  або  $\langle 111 \rangle$ , вираз для  $F(\mathbf{q})$  після усереднення за відповідними дискретними напрямками  $\mathbf{b}$  матиме вигляд:

$$F(\mathbf{q}) = \frac{C_{n_1}^2}{3} \left( \frac{\pi H |\mathbf{b}| R_0^2}{v_c (1-v) n_1 |\mathbf{q}|} \right)^2 \left\{ \left| \frac{\mathbf{H}_0 \mathbf{q}}{q} \right|^2 \left[ (9 - 4\eta n_1) v^2 + 2(\eta n_1 - 6) v + 7 \right] + \right. \\ \left. 4(1-v) \left[ (1-v) - 2 \operatorname{Re} \frac{(\mathbf{H}_0 \mathbf{q})^2}{|\mathbf{q}|^2} \right] + \frac{4(\eta - 3)}{|\mathbf{q}|^2} \left[ (1-v)^2 S(\mathbf{H}_0, \mathbf{H}_0, \mathbf{q}, \mathbf{q}^*) - \right. \right. \\ \left. \left. -(1-v) \operatorname{Re} \left( \frac{(\mathbf{H}_0 \mathbf{q}) S(\mathbf{H}_0, \mathbf{q}, \mathbf{q}, \mathbf{q}^*)}{|\mathbf{q}|^2} \right) + \left| \frac{\mathbf{H}_0 \mathbf{q}}{2q^2} \right|^2 S(\mathbf{q}, \mathbf{q}, \mathbf{q}^*, \mathbf{q}^*) \right] \right\}, \quad (62)$$

де функція  $S(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, \mathbf{a}_4) = a_{1x} a_{2x} a_{3x} a_{4x} + a_{1y} a_{2y} a_{3y} a_{4y} + a_{1z} a_{2z} a_{3z} a_{4z}$  залежить від компонент векторів  $\mathbf{a}_n$ ,  $\eta = C_{n_1}^1 / C_{n_1}^2$ ,  $C_{n_1}^m$  — біноміальні коефіцієнти, а  $n_1$  дорівнює числу одиниць у Бюргерсовім векторі;  $R_0$  — радіус дефекту;  $v$  — Пуассонів коефіцієнт. Пара чисел  $(n_1, \eta)$  визначає тип усереднення і для орієнтацій  $\langle 110 \rangle$  та  $\langle 111 \rangle$  відповідно дорівнює  $(2,2)$  та  $(3,1)$ .

Для обчислення інтеграла (50) розкладемо  $\mathbf{k}$  на суму перпендику-



лярної до поверхні Евальдової сфери ( $\mathbf{k}_0$ ) та тангенційної ( $\mathbf{\kappa}$ ) компонент. Врахуємо й рівності  $k_0 = K\Delta\theta \sin 2\theta_B$  і  $|\mathbf{q}|^2 = \kappa^2 + k_0^2 + \mu_i^2$ . Оскільки інтеграл обчислюється у нескінченних межах, то в  $F(\mathbf{q})$  можна знехтувати непарними степенями складових  $\mathbf{\kappa}$  і замінити інтегрування формули (62) інтегруванням більш простої функції, яка в областях Хуаня–Кривоглаза та Стокса–Вільсона відповідно має вигляд

$$F'^H(\mathbf{\kappa}) = 2A_0 \sum_{n=1}^M \frac{A_n}{(\kappa^2 + k_0^2 + \mu_i^2)^n}, \quad (63)$$

$$F'^{SW}(\mathbf{\kappa}) = 2A_0 \sum_{n=1}^M \frac{A_n k_m^2}{(\kappa^2 + k_0^2 + \mu_i^2)^{n+1}}, \quad (64)$$

де  $A_0 = \pi^3 C_{n_1}^2 (H|\mathbf{b}|R_0^2/n_1 v_c(1-v))^2/3$ , а коефіцієнти  $A_n$  залежать тільки від кута  $\Delta\theta$  повороту зразка (при врахуванні дискретної орієнтації дисльокаційних петель  $M=4$ ):

$$\begin{aligned} A_1 &= A'_1 \left[ (9 - 4\eta n_1) v^2 + 2(\eta n_1 - 2)v + \right. \\ &\quad \left. + (\eta - 3)(4(1-v)(1-v - A'_1) + A'_5) - 1 \right] + 4(1-v)^2, \\ A_2 &= A'_2 \left[ (9 - 4\eta n_1) v^2 + 2(\eta n_1 - 6)v + 4(\eta - 3)(1-v)^2 + 7 \right] - 4(1-v) \times \\ &\quad \times \left[ 2A'_3 + (\eta - 3)(A'_1(A'_2 + A'_3) + A'_4) \right] - (\eta - 3) \left[ (k_0^2 + \mu_i^2) A'_5 - A'_1 A'_6 - A'_9 \right], \quad (65) \\ A_3 &= (\eta - 3) \left[ (k_0^2 + \mu_i^2)^2 A'_1 + (k_0^2 + \mu_i^2)(4(1-v)A'_4 - A'_1 A'_6 - 2A'_9) + \right. \\ &\quad \left. + A'_1 A'_7 + A'_8 - 4(1-v)A'_2 A'_3 \right], \\ A_4 &= (\eta - 3) \left[ (k_0^2 + \mu_i^2)^2 A'_9 - (k_0^2 + \mu_i^2) A'_8 + A'_2 A'_7 \right], \end{aligned}$$

де введено позначення:

$$\begin{aligned} A'_1 &= \cos^2 \theta_B / 2, \quad A'_2 = \cos^2 \theta_B \left[ (k_0^2 + \mu_i^2)(\operatorname{tg}^2 \theta_B - 1/2) + \mu_i^2 \right], \\ A'_3 &= \cos^2 \theta_B \left[ (k_0^2 - \mu_i^2)(\operatorname{tg}^2 \theta_B - 1/2) - 2\mu_i^2 \right], \\ A'_4 &= k_0^2 \sin^2 \theta_B / 2, \quad A'_5 = 3(1 + \cos^4 \theta_B + \sin^4 \theta_B) / 8, \quad (66) \\ A'_6 &= \mu_i^2 \cos^2 \theta_B + 3A'_4, \quad A'_7 = k_0^2 \cos^4 \theta_B + (k_0^2 \sin^2 \theta_B + \mu_i^2)^2, \\ A'_8 &= A'_2 A'_6 + 2A'_4 (\mu_i^2 - k_0^2 \cos 2\theta_B), \quad A'_9 = A'_2 A'_5 + 3A'_4 \cos^2 \theta_B / 2. \end{aligned}$$

Тоді після інтегрування (63) та (64) одержимо:

$$\mu_{00}(\Delta\theta) = \mu_{ds}(k_0)(1 - \exp(-2\mu_1 t))/2\mu_1 t, \quad (67)$$

$$\mu_{ds}(k_0) = cC^2 E^2 \tilde{m}_0 A_0 J(k_0), \quad \tilde{m}_0 = \frac{\pi v_c}{4} (|\chi_{\Gamma\mathbf{H}}|/\lambda)^2, \quad (68)$$

$$J(k_0) = \begin{cases} A_1 \ln e \frac{k_m^2}{k_0^2 + \mu_1^2} + \sum_{n=2}^M \frac{A_n}{n-1} \left( \frac{1}{(k_0^2 + \mu_1^2)^{n-1}} - \frac{1}{nk_m^{2n-2}} \right), & k_0^2 + \mu_1^2 \leq k_m^2; \\ k_m^2 \sum_{n=1}^M \frac{A_n}{n(k_0^2 + \mu_1^2)^n}, & k_0^2 + \mu_1^2 > k_m^2; \end{cases} \quad (69)$$

тут  $e$  — основа натурального логарифму, а  $\chi_{\Gamma\mathbf{G}}(\mathbf{G} = \mathbf{0}, \mathbf{H})$  — Фур'є-компоненти дійсної частини поляризованості кристалу.

Неважко помітити, що випадки сферично симетричних кластерів і сферично усереднених дисльокаційних петель є частинними випадками (62), і тому розклади (63) та (64) і результат інтегрування по Евальдовій сфері будуть також справедливі і для них. При цьому константи  $A_0$  та  $A_n$  для сферично симетричних кластерів [14] з потужністю  $A_{cl} = \Gamma \varepsilon R_0^3 (\Gamma = (1 + \nu) / (3 - 3\nu))$  ( $\varepsilon$  — деформація на межі кластера) дорівнюватимуть ( $M = 2$ ):

$$A_0 = \pi^3 (4A_{cl}H/v_c)^2, \quad (70)$$

$$A_1 = \cos^2 \theta_B / 2, \quad A_2 = \cos^2 \theta_B \left[ (k_0^2 + \mu_1^2) (\operatorname{tg}^2 \theta_B - 1/2) + \mu_1^2 \right],$$

а для сферично усереднених дисльокаційних петель (також  $M = 2$ )

$$A_0 = \pi^3 (H|\mathbf{b}|R_0^2/v_c(1-\nu))^2/15,$$

$$A_1 = \cos^2 \theta_B (3\nu^2 + 6\nu - 1)/2 + 4(1-\nu)^2, \quad (71)$$

$$A_2 = \cos^2 \theta_B \left[ (3\nu^2 + 6\nu - 1) (\operatorname{tg}^2 \theta_B - 1/2) k_0^2 + \right. \\ \left. + ((3\nu^2 + 6\nu - 1) (\operatorname{tg}^2 \theta_B - 1/2) + 3\nu^2 - 18\nu + 23) \mu_1^2 \right].$$

Одержаний вираз для коефіцієнта поглинання внаслідок ДР (68) надає змогу при використанні співвідношень (51), (52) та (67) для уявних частин дисперсійних поправок проводити розрахунки кутових залежностей ефектів поглинання когерентних хвиль в монокристалах зі сферично несиметричними дефектами довільних розмірів. При цьому дійсні частини дисперсійних поправок (41) можуть бути знайдені через їх уявні частини (50) і (51) з використанням відомих дисперсійних співвідношень [19].

Слід звернути увагу на те, що результати проведеного розгляду коефіцієнту поглинання внаслідок ДР від дискретно орієнтованих дис-

льокаційних петель можуть бути безпосередньо перенесені на випадок дископодібних кластерів, що залягають в еквівалентних площинах кристалічної ґратниці. Для цього достатньо вектором  $\mathbf{b}$  позначити нормаль до площини залягання дископодібного кластера, а «потужність» петлі ( $\pi |\mathbf{b}| R_0^2$ ) замінити на потужність цього кластера  $A_{cl}$  [18].

### 5. ІНСТРУМЕНТАЛЬНІ ФАКТОРИ ТКД

Інтенсивність дифрагованого випромінення, що реєструється ТКД, залежить від двох кутів  $\Delta\theta$  і  $\Delta\theta'$ , які задають відхилення кристалів зразка і аналізатора від їх точних відбиваючих положень. У випадку, коли досліджуваний кристал містить хаотично розподілені дефекти, ця інтенсивність може бути представлена у вигляді суми когерентної ( $I_{coh}$ ) і дифузної ( $I_{diff}$ ) компонент [20]:

$$I(\Delta\theta, \Delta\theta') = I_{coh}(\Delta\theta, \Delta\theta') + I_{diff}(\Delta\theta, \Delta\theta'). \quad (72)$$

При використанні бездисперсійної схеми ТКД ( $n, -n', n$ ) з геометрією дифракції за Бреггом на всіх кристалах окрім зразка (на якому реалізується геометрія дифракції за Ляве з індексами відбиття  $n'$ ) когерентну і дифузну компоненти вимірюваної інтенсивності можна записати у вигляді [20–22]:

$$I_{coh}(\Delta\theta, \Delta\theta') = I_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx R_M^{n_M} \left\{ b_M^{-1} \left[ -b_S^{-1} (x - \Delta\theta) - \Delta\theta \right] \right\} R_{coh} \left[ -b_S^{-1} (x - \Delta\theta) \right] R_A(x - \Delta\theta'), \quad (73)$$

$$I_{diff}(\Delta\theta, \Delta\theta') = I_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx R_M^{n_M}(x) \int_{-\infty}^{\infty} dx' r_{diff}(\mathbf{k}) R_A(x' - \Delta\theta') \quad (74)$$

де  $I_0$  — інтенсивність випромінення, що падає на монохроматор;  $R_M$  і  $R_A$  — коефіцієнти відбиття відповідно монохроматора і аналізатора;  $n_M$  — кратність відбиття на монохроматорі;  $b_M$  і  $b_S$  — параметри асиметрії монохроматора і досліджуваного кристалу,  $\mathbf{k} = k_x \mathbf{e}_x + k_z \mathbf{e}_z$ ,  $\mathbf{e}_x$  і  $\mathbf{e}_z$  — орти в площині розсіяння. Функція  $r_{diff}$  у виразі (74) є проінтегрованою по вертикальній розбіжності  $\phi$  дифузною компонентою диференційного коефіцієнта відбиття досліджуваного кристалу, а  $R_{coh}$  для зразка у випадку Ляве-геометрії набуває значення або  $T$  (39), або  $R$  (40) в залежності від того, прохідні чи дифраговані промені реєструються детектором ТКД.

Якщо структурні дефекти містяться в кристалах монохроматора і аналізатора, то їх коефіцієнти відбиття також складаються з когерентної і дифузної компонент [13, 14]:

$$R_M(\mathbf{k}) = R_B^M(\mathbf{k}) + R_D^M(\mathbf{k}), \quad R_A(\mathbf{k}) = R_B^A(\mathbf{k}) + R_D^A(\mathbf{k}). \quad (75)$$

Врахування впливу дефектів у зазначених кристалах на інтенсивність, що реєструється ТКД, вимагає додаткового інтегрування в формулах (73) і (74) по тілесних кутах  $d\Omega_K$  і  $d\Omega_{K'}$ , що відповідають відхиленням від точного Бреґґового положення хвильових векторів дифузно розсіяних хвиль відповідно в монохроматорі і аналізаторі. Тоді відповідні коефіцієнти відбиття набувають вигляду:

$$R_M(\Delta\theta) = R_{\text{coh}}^M(\Delta\theta) + R_{\text{diff}}^M(\Delta\theta), \quad R_A(\Delta\theta) = R_{\text{coh}}^A(\Delta\theta) + R_{\text{diff}}^A(\Delta\theta), \quad (76)$$

де  $R_{\text{coh}}^{M,A}$  — когерентні складові коефіцієнтів відбиття недосконалих кристалів монохроматора і аналізатора у геометрії дифракції за Бреґґом [13, 14], а відповідні дифузні компоненти описуються виразами:

$$R_{\text{diff}}^M(\Delta\theta) = \int d(\Delta\theta) r_{\text{diff}}^M(k_x, k_z), \quad R_{\text{diff}}^A(\Delta\theta) = \int d(\Delta\theta') r_{\text{diff}}^A(k_x, k_z). \quad (77)$$

У виразах (77) дифузні складові  $r_{\text{diff}}^{M,A}$  диференційних коефіцієнтів відбиття кристалів монохроматора і аналізатора також мають обчислюватись за формулами для випадку Бреґґ-дифракції [13, 14].

Наявність ДР від дефектів в монохроматорі призводить до різкого зростання висоти псевдопіка порівняно з головним [23]. Крім того, спостережувана в багатьох експериментах зміна висоти псевдопіка на профілях ТКД для однакових за величиною, але протилежних за знаком відхилень досліджуваного зразка може бути пояснена тільки наявністю антисиметричної компоненти в інтенсивності ДР від дефектів у монохроматорі [23].

При побудові розподілів дифрагованої інтенсивності на картах оберненого простору без врахування згортки (73), (74) зв'язок величин  $k_x$  та  $k_z$  з кутами  $\Delta\theta$  і  $\Delta\theta'$  для випадку Ляве-дифракції задається системою рівнянь:

$$\begin{cases} k_x = K [2\Delta\theta \sin \theta_B \sin \psi + \Delta\theta' \cos(\theta_B + \psi)] \\ k_z = K [2\Delta\theta \sin \theta_B \cos \psi - \Delta\theta' \sin(\theta_B + \psi)], \end{cases} \quad (78)$$

де  $\psi$  — кут між нормаллю до поверхні кристалу й відбиваючими атомними площинами. При розрахунках з врахуванням згортки (73), (74) зв'язок  $k_x$  та  $k_z$  з кутами  $\Delta\theta$ ,  $x$  і  $x'$  має наступний вигляд:

$$\begin{cases} k_x = K [2(\Delta\theta + x) \sin \theta_B \sin \psi + (x + x') \cos(\theta_B + \psi)] \\ k_z = K [2(\Delta\theta + x) \sin \theta_B \cos \psi - (x + x') \sin(\theta_B + \psi)]. \end{cases} \quad (79)$$

Явний вигляд функції  $r_{\text{diff}}$  з урахуванням впливу ефектів анізотропії полів пружної деформації навколо дефектів, на динамічну картину розсіяння буде розглянуто у другій частині даної роботи, яка друкується окремо.

## 6. РЕЗЮМЕ І ВИСНОВКИ

В рамках динамічної теорії дифракції Рентгенових променів у недосконалих монокристалах у двохвильовому випадку геометрії дифракції за Ляве в кристалічних пластинках довільної товщини, які містять однорідно розподілені дефекти, одержано аналітичні вирази для когерентних компонент диференційних коефіцієнтів проходження та відбиття. Ці вирази залежать від параметрів дефектів через статичний фактор Дебая–Валлера та коефіцієнти поглинання внаслідок ДР. Проаналізовано вплив цих параметрів на кутові залежності когерентних компонент диференційних коефіцієнтів проходження та відбиття.

З урахуванням анізотропії полів зміщень від дефектів одержано вирази для дисперсійних поправок до хвильових векторів сильних Бреггових хвиль (коефіцієнтів поглинання внаслідок ДР), які є справедливими в усьому кутовому діапазоні включно з областю повного відбиття і при довільних радіусах дефектів (включно до довжини екстинкції і більше). Ці вирази дозволяють описувати вплив на коефіцієнти проходження та відбиття, який справляють анізотропні поля зміщень атомів кристалу навколо як призматичних дислокаційних петель, так і дископодібних кластерів.

Враховано інструментальні фактори ТКД, що дозволяє проводити коректний опис когерентної і дифузної складових динамічної картини Ляве-дифракції при аналізі карт оберненого простору для відтворенні за ними характеристик дефектної структури кристалів.

## ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. M. A. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin: Springer: 1996), p. 466.
2. B. C. Larson, *J. Appl. Cryst.*, **8**, No. 1: 150 (1975).
3. З. Г. Пинскер, *Рентгеновская кристаллооптика* (Москва: Наука: 1982), с. 392.
4. А. М. Афанасьев, П. А. Александров, Р. М. Имамов, *Рентгенодифракционная диагностика субмикронных слоев* (Москва: Наука: 1989), с. 152.
5. Л. И. Даценко, В. Б. Молодкин, М. Е. Осинковский, *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами* (Киев: Наукова думка: 1988).
6. B. C. Larson and W. G. Schmatz, *Phys. Rev. B*, **10**, No. 6: 2307 (1974).
7. A. Iida and K. Kohra, *Phys. Stat. Solidi A*, **51**, No. 2: 533 (1979).
8. A. Iida, *Phys. Stat. Solidi A*, **54**, No. 2: 701 (1979).
9. А. М. Афанасьев, М. В. Ковальчук, Э. Ф. Лобанович и др., *Кристаллография*, **26**, вып. 1: 28 (1981).
10. Э. К. Ковьев, В. В. Ратников, Л. М. Сорокин, *ФТТ*, **23**, № 6: 1626 (1981).
11. P. Zaumseil and U. Winter, *Phys. Stat. Solidi A*, **70**, No. 2: 497 (1982).
12. P. Zaumseil and U. Winter, *Phys. Stat. Solidi A*, **73**, No. 2: 455 (1982).
13. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, E. G. Len, and E. V. Pervak, *Phys. Stat. Solidi B*, **227**, No. 2: 429 (2001).
14. S. I. Olikhovskii, V. B. Molodkin, E. N. Kislovskii, E. G. Len, and E. V. Pervak, *Phys. Stat. Solidi B*, **231**, No. 1: 199 (2002).

15. В. Б. Молодкін, С. И. Олиховский, С. В. Дмитриев и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **27**, № 12: 1659 (2005).
16. V. V. Kochelab, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, and M. E. Osinovskii, *Phys. Stat. Solidi A*, **107**, No. 1: 67 (1988).
17. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, M. E. Osinovskii et al., *Phys. Stat. Solidi A*, **87**, No. 2: 597 (1985).
18. С. Й. Оліховський, С. М. Кисловський, В. Б. Молодкін та ін., *Металлофиз. новейшие технол.*, **22**, № 6: 3 (2000).
19. A. N. Kostyuk, V. B. Molodkin, and S. I. Olikhovskii, *Phys. Stat. Solidi B*, **178**, No. 1: 45 (1993).
20. В. Б. Молодкін, С. И. Олиховский, М. Е. Осинковский и др., *Металлофизика*, **6**, № 3: 7 (1984).
21. В. В. Немошкаленко, В. Б. Молодкін, С. И. Олиховский и др., *Металлофизика*, **15**, № 11: 53 (1993).
22. V. B. Molodkin, V. V. Nemoskalenko, S. I. Olikhovskii et al., *Metal Phys. Adv. Technol.*, **20**, № 11: 29 (1998).
23. С. М. Кисловський, О. В. Решетник, Т. П. Владімірова та ін., *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 5: 701 (2007).