

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. II. Дифузна складова динамічної
картини розсіювання**

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 межах узагальненої динамічної теорії розсіювання Рентгенових променів у недосконалих кристалах розглянуто динамічне дифузне розсіювання (ДР) від крупних дефектів у випадку геометрії дифракції за Ляве. Одержано аналітичні вирази для диференційної та проінтегрованої за вертикальною розбіжністю інтенсивностей ДР у кристалі з однорідно розподіленими дефектами, які створюють навколо себе анізотропні поля зміщень атомів матриці. Для дефектів різних типів і розмірів побудовано карти розподілу інтенсивності ДР у просторі оберненої ґратниці й продемонстровано вплив на їх вигляд інтегрування за вертикальною розбіжністю Рентгенових променів.

В рамках обобщённой динамической теории рассеяния рентгеновских лучей в несовершенных кристаллах рассмотрено динамическое диффузное рассеяние (ДР) от крупных дефектов в случае геометрии дифракции по Лауэ. Получены аналитические выражения для дифференциальной и проинтегрированной по вертикальной расходимости интенсивностей ДР в кристалле с однородно распределёнными дефектами, которые создают вокруг себя анизотропные поля смещений атомов матрицы. Для дефектов разных типов и размеров построены карты распределения интенсивности ДР в пространстве обратной решетки и продемонстрировано влияние на их вид интегрирования по вертикальной расходимости рентгеновских лучей.

Within the framework of the generalized dynamical theory of x-ray scattering from imperfect crystals, the dynamical diffuse scattering (DS) by large defects is considered in the case of Laue diffraction geometry. Analytical expressions for DS intensities, which are differential or integrated over the vertical divergence, are obtained for crystals containing homogeneously distributed defects, which create around themselves the anisotropic displacement fields of atoms in a matrix. For defects of various types and sizes, the maps of DS intensity dis-

tributions in the reciprocal lattice space are plotted, and the influence of the integration over vertical divergence of x-rays on their shape is demonstrated.

Ключові слова: нанотехнологія, Ляве-дифракція, трикристальна дифрактометрія, динамічна теорія дифракції, дефекти Кульонового типу, когерентне і дифузне розсіювання, анізотропія поля пружної деформації.

(Отримано 1 вересня 2008 р.)

1. ВСТУП

Інтерпретація диференціальних розподілів інтенсивності дифузного розсіювання (ДР) Рентгенових променів у просторі оберненої ґратниці, які вимірюються за допомогою трикристального дифрактометра (ТКД), ґрунтується, як правило, на кінематичній теорії розсіювання у недосконалих кристалах [1]. Такий підхід не дозволяє одержати у повному обсязі інформацію про статистичні характеристики дефектів, яка міститься в таких розподілах, оскільки він не враховує наявності суперпозиції інтенсивностей ДР і когерентного розсіювання та їх взаємодії, а також впливу динамічних ефектів у ДР.

Найбільш повну і надійну інтерпретацію результатів мірюнь ТКД можна виконати з використанням узагальненої статистичної динамічної теорії [2–4], яка дає самоузгоджений опис динамічного когерентного і дифузного розсіювання Рентгенових променів недосконалими монокристаллами. На основі цієї теорії було розроблено теоретичні основи нових методів ТКД для діагностики дефектів, що хаотично розподілені в монокристалах, при використанні геометрій дифракції як за Бреґгом, так і за Ляве [5–14].

Зокрема, аналітичний вираз для опису повних профілів інтенсивності розсіювання Рентгенових променів, які мірюються за допомогою ТКД в області ДР Хуаня–Кривоглаза від монокристалів з однорідно розподіленими дефектами Кульонового типу, було знайдено в роботі [5]. На основі одержаних результатів було розроблено і апробовано оригінальну методику диференційно-інтегральної трикристальної Рентгенової дифрактометрії [6, 7]. Згідно з цією методикою інформація про характеристики дефектів здобувається шляхом мірюння і аналізу залежностей площ піків інтенсивності ДР на дифракційних профілях ТКД від кута повороту досліджуваного кристалу, які, в свою чергу, відповідають кутовим залежностям «інтегральної» інтенсивності ДР, вимірюваної двокристалним дифрактометром (ДКД) із широко відкритим вікном детектора [15–17].

В роботах [9, 10] було запропоновано два нових способи сепарування за допомогою ТКД когерентної та дифузної компонент повної інтегральної відбивної здатності тонких кристалів з дефектами в умовах геометрії дифракції за Ляве. Їх застосування в Рентгеновій дифрактометричній діагностиці дефектної структури монокриста-

лів істотно розширило можливості звичайної методи нахилу і підвищило точність визначення дифракційних параметрів структурної досконалості досліджуваних монокристалів.

Найбільш повні аналітичні вирази для опису дифракційних профілів, які міряються ТКД в умовах дифракції за Бреггом, з врахуванням наявності ДР не тільки від дефектів в досліджуванім кристалі, але також і в кристалах монохроматора та аналізатора, було одержано в роботах [12, 13]. Зокрема, для опису піків інтенсивності ДР від дефектів різних типів було одержано аналітичні вирази, які ґрунтуються на формулах узагальненої динамічної теорії розсіювання в монокристалах з однорідно розподіленими дефектами і враховують інструментальні особливості ТКД. У знайдених виразах враховано також вплив на відбиті здатності усіх трьох кристалів ТКД наявних в них макроскопічних деформацій у приповерхневих шарах.

Для надійної дифрактометричної характеристики складних дефектних структур у реальних кристалах було запропоновано комбінований метод, який полягає у спільній обробці одно- й двовимірних розподілів дифрагованих інтенсивностей у просторі оберненої ґратниці, які міряються відповідно ДКД з широко відкритим вікном детектора і ТКД [14].

В першій частині роботи, яку представлено окремою попередньою статтею в цьому ж випуску, спираючись на узагальнену динамічну теорію розсіювання [3, 4] для випадку геометрії дифракції за Ляве одержано аналітичні вирази для когерентних компонент коефіцієнтів проходження і відбиття кристалу з однорідно розподіленими дефектами довільних розмірів і різних типів з анізотропними полями зміщень атомів кристалу навколо них. (Посилання на формули першої частини міститимуть римську цифру один, наприклад, (I.15).)

Метою даної роботи є одержання в рамках того ж підходу для випадку Ляве-дифракції явних аналітичних виразів для диференційного розподілу інтенсивності ДР від дефектів, які створюють навколо себе анізотропні поля зміщень атомів матриці. Для опису дифузних піків від дефектів на дифракційних профілях та розподілів інтенсивності ДР на картах оберненого простору, які міряються за допомогою ТКД, виконано інтегрування цих виразів по вертикальній розбіжності Рентгенових променів. Для дефектів різних типів і розмірів буде побудовано карти розподілу інтенсивності ДР в просторі оберненої ґратниці та продемонстровано вплив на їх вигляд інструментальних факторів ТКД.

2. ОСНОВНІ РІВНЯННЯ І АМПЛІТУДА ДИНАМІЧНОГО ДИФУЗНОГО РОЗСІЯННЯ

Дифузно розсіяні хвилі виникають шляхом розсіювання сильних Бре-

гтових хвиль на флюктуаційних полях статичних зміщень атомів кристалу, які створені хаотично розподіленими дефектами. Завдяки процесам багатократного перерозсіяння у достатньо товстих кристалах вони формують динамічне хвильове поле аналогічно сильним Бреґговим хвилям.

У двоххвильовому випадку дифракції амплітуди дифузної розсіяних плоских хвиль D_q та D_{H+q} , які утворюють дифузні квазиболохові хвилі, задовольняють наступній системі неоднорідних рівнянь [4]:

$$\begin{cases} (-2\varepsilon_{0q}^\delta + \chi_0 + \Delta\chi_{00}^\delta) D_q + (CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}^\delta) D_{H+q} = -(\delta\chi_q D_0^\delta + \delta\chi_{-H+q} CD_H^\delta) \\ (CE\chi_H + \Delta\chi_{H0}^\delta) D_q + (-2\chi_{Hq}^\delta + \chi_0 + \Delta\chi_{HH}^\delta) D_{H+q} = -(\delta\chi_{H+q} CD_0^\delta + \delta\chi_q D_H^\delta) \end{cases}, \quad (1)$$

де D_G ($G = 0, H$) — амплітуди сильних Бреґгових хвиль; χ_G і $\delta\chi_{G+q}$ — усереднена і флюктуаційна складові Фур'є-компоненти поляризованості кристалу; C — поляризаційний множник; E — статичний фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера; $\Delta\chi_{GG'}^\delta$ — дисперсійні поправки до хвильових векторів дифузної розсіяних хвиль (див. (I.13)), які відповідають δ -му листу дисперсійної поверхні ($G, G' = 0, H$, $\delta = 1, 2$). Відповідне динамічне дифузне хвильове поле, сформоване в усередненій періодичній кристалічній ґратниці, для кожного стану поляризації складається з прохідної та дифрагованої складових і може бути представлено у вигляді їх суми:

$$D'(\mathbf{r}) = D'_T(\mathbf{r}) + D'_S(\mathbf{r}), \quad D'_T(\mathbf{r}) = \sum_{\delta} \sum_q D_q^\delta e^{-i(\mathbf{K}_0^\delta + \mathbf{q})\mathbf{r}}, \quad (2)$$

$$D'_S(\mathbf{r}) = \sum_{\delta} \sum_q D_{H+q}^\delta e^{-i(\mathbf{K}_H^\delta + \mathbf{q})\mathbf{r}}, \quad (3)$$

де $\mathbf{K}_0^\delta$ і $\mathbf{K}_H^\delta$ — хвильові вектори прохідного і дифрагованого когерентного випромінювання всередині кристалу.

На вхідній поверхні кристалу у випадку геометрії дифракції за Ляве відмінною від нуля повинна бути тільки амплітуда падаючої на кристал плоскої хвилі, тоді як дифузної розсіяні хвилі відсутні. Відповідні межові умови для прохідної та дифрагованої дифузної розсіяних хвиль $D'_T(\mathbf{r})$ та $D'_S(\mathbf{r})$ мають вигляд:

$$D'_T(\mathbf{r}) = 0, \quad D'_S(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{при } z = 0, \quad (4)$$

$$D'_T(\mathbf{r}) = E_T^a(\mathbf{r}), \quad D'_S(\mathbf{r}) = E_S^a(\mathbf{r}) \quad \text{при } z = t, \quad (5)$$

де $E_T^a(\mathbf{r})$ та $E_S^a(\mathbf{r})$ поки що невідомі амплітуди дифузної розсіяних хвиль на вихідній поверхні кристалу; t — товщина плоскопаралельної кристалічної платівки.

Очевидно, що хвильові поля D'_T та D'_S , які складаються з час-

тинного розв'язку нескінченної системи рівнянь (1), не задовольняють цим межовим умовам при довільнім значенні $\mathbf{r}$. З фізичної точки зору дифузні хвильові поля (2) і (3) мають також включати нормальні моди, які є загальними розв'язками відповідної однорідної системи рівнянь:

$$\begin{cases} (-2\varepsilon_{0q}^{\delta} + \chi_0 + \Delta\chi_{00}^{\delta}) D_q + (CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}^{\delta}) D_{H+q} = 0, \\ (CE\chi_H + \Delta\chi_{H0}^{\delta}) D_q + (-2\varepsilon_{Hq}^{\delta} + \chi_0 + \Delta\chi_{HH}^{\delta}) D_{H+q} = 0. \end{cases} \quad (6)$$

Нетривіальні розв'язки цієї системи існують за умови рівності нулю її детермінанта:

$$\begin{aligned} d_{\delta}(\mathbf{q}) = & (-2\varepsilon_{0q}^{\delta} + \chi_0 + \Delta\chi_{00}^{\delta})(-2\varepsilon_{Hq}^{\delta} + \chi_0 + \Delta\chi_{HH}^{\delta}) - \\ & - (CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}^{\delta})(CE\chi_H + \Delta\chi_{H0}^{\delta}) = 0. \end{aligned} \quad (7)$$

З рівняння (7) можна одержати акомодатії хвильових векторів ДР хвиль $\Delta'_{\tau} = \varepsilon_{0q}^{\delta\tau}/\gamma_0$, які відповідають когерентним хвилям δ -го листа дисперсійної поверхні:

$$\begin{aligned} \Delta'_{\tau} = & \frac{1}{2\gamma_0}(\chi_0 + \Delta\chi_{00}^{\delta}) + \frac{\chi}{2\Lambda'}(y' + (-1)^{\tau} \sqrt{y'^2 + 1}), \quad \tau, \delta = 1, 2, \quad (8) \\ y' = & \frac{(\tilde{a}' - a'_0)}{\sigma'} \sqrt{b}, \quad \Lambda' = \frac{\lambda\gamma_H \sqrt{b}}{\sigma'}, \quad 2\alpha'_0 = \chi_0 + \Delta\chi_{HH}^{\delta} - b^{-1}(\chi_0 + \Delta\chi_{00}^{\delta}), \\ \sigma' = & (CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}^{\delta})(CE\chi_H + \Delta\chi_{H0}^{\delta}), \end{aligned}$$

де $\tilde{a}' = -\Delta\theta' \sin(2\theta_B)$ та параметер асиметрії дифракції $b = \gamma_0/\gamma_H$, $\Delta\theta'$ — відхил хвильового вектора дифузно розсіяної хвилі від точного Бреггового напрямку у вакуумі; γ_0 і γ_H — косинуси кутів між напрямками прохідного і дифрагованого випромінення та зовнішньою нормаллю до поверхні кристалу, $K = 2\pi/\lambda$ — модуль хвильового вектора у вакуумі; λ — довжина хвилі у вакуумі.

Додаткове хвильове поле, яке утворене розв'язками системи (6), також можна представити у вигляді суми прохідної і дифрагованої складових:

$$D''(\mathbf{r}) = D_T''(\mathbf{r}) + D_S''(\mathbf{r}), \quad D_T''(\mathbf{r}) = \sum_{\delta} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\tau} D_q^{\delta\tau} e^{-i\mathbf{K}_{0q}^{\delta\tau} \mathbf{r}}, \quad (9)$$

$$D_S''(\mathbf{r}) = \sum_{\delta} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\tau} D_{H+q}^{\delta\tau} e^{-i\mathbf{K}_{Hq}^{\delta\tau} \mathbf{r}}. \quad (10)$$

Невідомі амплітуди $D_q^{\delta\tau}$ та $D_{H+q}^{\delta\tau}$ визначаються за допомогою межової умови (4) підстановкою сумарних прохідного ($\tilde{D}_T = D_T' + D_T''$) і

дифрагованого ($\tilde{D}_S = D'_S + D''_S$) дифузних хвильових полів:

$$\begin{aligned} D_q^{\delta(1)} &= \frac{1}{c'^{(2)} - c'^{(1)}} \left(D_{H+q}^{\delta} - c'^{(2)} D_q^{\delta} \right), \quad D_{H+q}^{\delta(1)} = \frac{c'^{(1)}}{c'^{(2)} - c'^{(1)}} \left(D_{H+q}^{\delta} - c'^{(2)} D_q^{\delta} \right), \\ D_q^{\delta(2)} &= \frac{1}{c'^{(2)} - c'^{(1)}} \left(c'^{(1)} D_q^{\delta} - D_{H+q}^{\delta} \right), \quad D_{H+q}^{\delta(2)} = \frac{c'^{(2)}}{c'^{(2)} - c'^{(1)}} \left(c'^{(1)} D_q^{\delta} - D_{H+q}^{\delta} \right), \end{aligned} \quad (11)$$

$$c'^{(\tau)} = -\frac{-2\gamma_0 \Delta'_\tau + \chi_0 + \Delta \chi'_{00}}{CE\chi_{-H} + \Delta \chi'_{0H}}. \quad (12)$$

Амплітуди дифузного хвильового поля на вихідній поверхні кристалу залежать тільки від координат $\rho(x, y)$ і тому їх можна розкласти у подвійний ряд Фур'є по тангенційних складових $\mathbf{k}$ вектора $\mathbf{q}$:

$$E_T^a(\rho) = \sum_{\mathbf{k}} E_{0\mathbf{k}}^a e^{-i\mathbf{k}\rho}, \quad (13)$$

$$E_S^a(\rho) = \sum_{\mathbf{k}} E_{H\mathbf{k}}^a e^{-i\mathbf{k}\rho}, \quad (14)$$

З іншого боку, згідно з межевою умовою (5), Фур'є-компоненти в сумах (13) і (14) задовольняють рівностям:

$$E_{0\mathbf{k}}^a = \sum_{\delta} \sum_{\xi} \left[D_q^{\delta} e^{-i\xi t - i\frac{K\mathbf{k}}{\gamma_0 K} t - iK\Delta_{\delta} t} + \left(D_q^{\delta(1)} e^{-iK\Delta'_1 t} + D_q^{\delta(2)} e^{-iK\Delta'_2 t} \right) \right], \quad (15)$$

$$\begin{aligned} E_{H\mathbf{k}}^a &= \\ &= \sum_{\delta} \sum_{\xi} \left[D_{H+q}^{\delta} e^{-i\xi t - i\frac{(\mathbf{K}+\mathbf{H})\mathbf{k}}{\gamma_H K} t - i\frac{H(\mathbf{K}+\mathbf{H}/2)}{\gamma_H K} t - iK\Delta_{\delta} t} + \left(D_{H+q}^{\delta(1)} e^{-iK\Delta'_1 t} + D_{H+q}^{\delta(2)} e^{-iK\Delta'_2 t} \right) e^{-i\frac{H(\mathbf{K}'+\mathbf{H}/2)}{\gamma_H K} t} \right], \end{aligned} \quad (16)$$

де підсумовування за ξ можна замінити інтегруванням, якщо знак суми замінити на $t2\pi \int \dots d\xi$.

Неважко помітити, що підінтегральні функції містять резонансний знаменник, який співпадає з детермінантом системи (6). Тоді, скориставшись розв'язками (8) рівняння (7) і застосувавши теорему лишків для обчислення інтегралів, остаточно одержимо:

$$\begin{aligned} E_{G\mathbf{k}}^a &= \frac{iKt}{4\gamma_0\gamma_H} \sum_{\delta} \sum_{\tau} \frac{(-1)^{\tau} e^{-iK\Delta'_{\tau} t}}{\Delta'_2 - \Delta'_1} \left(D_0^{\delta} M_{G0}^{\delta\tau} + D_H^{\delta} M_{GH}^{\delta\tau} \right) \times \\ &\times \left[\left(CE\chi_{-H} + \Delta \chi'_{0H} \right) \delta_{G0} + \left(CE\chi_H + \Delta \chi'_{H0} \right) \delta_{GH} \right], \end{aligned} \quad (17)$$

де $\delta_{GG'}$ — Кронекерів символ, а коефіцієнти $M_{GG'}^{\delta\tau}$ дорівнюють:

$$\begin{aligned}
M_{00}^{\delta\tau} &= \delta\chi_q \frac{\zeta'}{e'^{(\tau)}} + C\delta\chi_{H+q}, & M_{H0}^{\delta\tau} &= \delta\chi_q + C\delta\chi_{H+q} \frac{e'^{(\tau)}}{\zeta'}, \\
M_{0H}^{\delta\tau} &= C\delta\chi_{-H+q} \frac{\zeta'}{e'^{(\tau)}} + \delta\chi_q, & M_{HH}^{\delta\tau} &= C\delta\chi_{-H+q} + \delta\chi_q \frac{e'^{(\tau)}}{\zeta'},
\end{aligned} \tag{18}$$

$$\zeta' = \frac{CE\chi_H + \Delta\chi_{H0}'^{\delta}}{CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}'^{\delta}}. \tag{19}$$

На поверхні кристалу дифузно розсіяні хвилі можна розглядати як джерела сферичних хвиль, амплітуди яких на великій відстані від кристалу мають асимптотичний вигляд:

$$E_G^{\text{inf}}(\mathbf{r}) \approx f_G(\mathbf{K}', \mathbf{K}) \frac{e^{-iK'r}}{r} \left(\mathbf{K}' = K \frac{\mathbf{r}}{r} \right), \quad r \rightarrow \infty. \tag{20}$$

Це дає змогу розрахувати інтенсивність ДР в обранім напрямку $\mathbf{K}'$ на великій відстані від поверхні кристалу. Щоб знайти невідому амплітуду розсіяння $f_G(\mathbf{K}', \mathbf{K})$ потрібно перерахувати одержані амплітуди $E_{G\mathbf{K}}^a$ в амплітуди сферичних хвиль, тобто обчислити інтеграл [4]:

$$E_G(\mathbf{r}) = \frac{S}{(2\pi)^2} \int E_{G\mathbf{K}}^a e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r} - i\sqrt{K^2 - \mathbf{K}^2}z} d\mathbf{K} \tag{21}$$

за умови $K'r \gg 1$. Виконавши асимптотичне інтегрування, одержимо:

$$f_G(\mathbf{K}', \mathbf{K}) = \sum_{\delta} \sum_{\mathbf{G}} D_G^{\delta} F_{G\mathbf{G}'}^{\delta}, \tag{22}$$

$$\begin{aligned}
F_{G\mathbf{G}'}^{\delta} &= \frac{VK^2}{8\pi\gamma_0\gamma_H} \times \\
&\times \sum_{\tau} \frac{(-1)^{\tau+1} e^{-iK\Delta'_1 t}}{\Delta'_2 - \Delta'_1} M_{G\mathbf{G}'}^{\delta\tau} \left[(CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}'^{\delta}) \delta_{G0} + (CE\chi_H + \Delta\chi_{H0}'^{\delta}) \delta_{GH} \right],
\end{aligned}$$

де $V = St$ — об'єм кристалу; S — площа вихідної поверхні.

Далі будемо розглядати розсіяння в кристалах, які містять випадково розподілені дефекти Кульонового типу. В цьому випадку флюктуаційні складові поляризованості кристалу $\delta\chi_{G+q}$ виражаються через Фур'є-компоненти полів статичних зміщень від дефектів ($\mathbf{u}_q$) та флюктуацій концентрації дефектів (c_q):

$$\delta\chi_{G+q} \approx iE\chi_G(\mathbf{G}\mathbf{u}_q)c_q. \tag{23}$$

Узагальнення співвідношення (23) на випадок наявності в кристалі

кількох типів дефектів дається у виразом (І.53). З формули (23) безпосередньо випливає, що з точністю до доданків другого порядку малости виконуються наближені рівності: $\delta\chi_q \approx 0$ і $\delta\chi_{-H+q} = -\delta\chi_{H+q}$. Тоді вирази (18) для парціальних амплітуд розсіяння $M_{H0}^{\delta\tau}$ й $M_{HH}^{\delta\tau}$ спрощуються, і ми можемо переписати амплітуду ДР $f_H(K', K)$ у вигляді:

$$f_H(K', K) = \frac{iCEVK^2}{8\pi\gamma_0\gamma_H} \frac{c^{(1)}c^{(2)}}{c^{(2)} - c^{(1)}} \sum_{\delta\tau} \frac{(-1)^{\delta+\tau+1}}{\Delta'_2 - \Delta'_1} \sqrt{\zeta'_\delta} X_{\delta\tau}(Hu_{q\delta\tau}) c_{q\delta\tau} e^{-iKt\Delta'_\tau}, \quad (24)$$

$$X_{\delta\tau} = \frac{\chi_H c'^{(\tau)}}{c^{(\delta)} \zeta'_\delta} - \chi_{-H}. \quad (25)$$

Диференційна інтенсивність ДР за означенням дорівнює усередненому за випадковим розподілом дефектів квадрату модуля амплітуди ДР, який розділено на інтенсивність падаючого на поверхню кристалу випромінювання:

$$R_D(k) = \frac{\langle |f_H(K', K)|^2 \rangle}{\gamma_0 S |E_0|^2}, \quad (26)$$

де E_0 — амплітуда падаючої пласкої хвилі. Підставивши (24) в (26) і нехтуючи залежністю Δ'_τ від δ , після усереднення одержимо для дифузної компоненти диференційної відбивної здатності кристалу:

$$R_D(k) = \frac{c(1-c)v_c t}{\gamma_0 |y^2 + 1| |y'^2 + 1|} \times \\ \times \left(\frac{CEK^2}{4\pi} \right)^2 \left| \frac{CE\chi_H + \Delta\chi_{H0}}{CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}} \right| \sum_{\delta\tau\lambda\sigma} (-1)^{\delta+\tau+\lambda+\sigma} X_{\delta\tau} \sqrt{\zeta'_\delta} (X_{\lambda\sigma} \sqrt{\zeta'_\lambda})^* \Pi_{\delta\zeta\lambda\sigma} (Hu_{q\delta\tau}) (Hu_{q\lambda\sigma})^*, \quad (27)$$

де v_c — об'єм елементарної комірки кристалу, а множник поглинання має вигляд:

$$\Pi_{\delta\tau\lambda\sigma} = \frac{\exp[-iKt(\Delta_\delta - \Delta_\lambda^*)] - \exp[-iKt(\Delta'_\tau - \Delta'_\sigma^*)]}{iKt(\Delta'_\tau - \Delta'_\sigma^* - \Delta_\delta + \Delta_\lambda^*)}. \quad (28)$$

Множник (28) відіграє ключову роль в описі ефектів аномального поглинання і аномального проходження інтенсивності ДР в товстих кристалах. В наближенні товстого кристалу з 16-ти доданків у виразі (27) суттєво відмінними від нуля залишаються тільки чотири таких, що відповідають квазиблоховим дифузним хвилям з аномально слабким поглинанням (відомий Борманів ефект для дифузних хвиль). Всі інші доданки дають незначний внесок у суму в

зв'язку зі швидким спаданням множника $\Pi_{\delta\tau\lambda\sigma}$, яке обумовлене аномально сильним поглинанням.

3. ДИФЕРЕНЦІЙНИЙ РОЗПОДІЛ ІНТЕНСИВНОСТІ ДИFUЗНОГО РОЗСІЯННЯ

Сферично несиметричні дефекти характеризуються анізотропією полів зміщень атомів кристалу навколо них. При цьому, в кристалі реалізується лише дискретний набір рівноцінних орієнтацій цих дефектів вздовж певних напрямків. Тому, навіть після усереднення за дискретними орієнтаціями дефектів вплив ефектів анізотропії на картину розсіяння випромінювання залишається суттєвим. Якщо обмежитись розглядом анізотропії полів зміщень навколо дефектів у наближенні пружньо-ізотропного середовища, то тоді вона буде пов'язана з симетрією кристалічної ґратниці за рахунок врахування дискретної орієнтації дефектів вздовж певних кристалографічних напрямків, а усі ефекти анізотропії будуть визначатись взаємною орієнтацією дефектів і вектора дифракції $\mathbf{H}$.

На прикладі призматичних дислокаційних петель проведемо врахування впливу зазначених ефектів анізотропії на інтенсивність ДР шляхом усереднення полів деформації навколо петель за дискретною орієнтацією їх Бюргерсових векторів $\mathbf{b}$. Розглянемо кристал кубічної симетрії, який містить однорідно розподілені дислокаційні петлі з Бюргерсовими векторами $\langle 110 \rangle$ або $\langle 111 \rangle$. Фур'є-компонента статичного поля зміщень від призматичної дислокаційної петлі описується виразом [1]:

$$\mathbf{u}_q = \frac{\pi |\mathbf{b}| R_0^2}{v_c (1-v) q^2} \left\{ \frac{2(1-v) \mathbf{b}(\mathbf{b}q)}{|\mathbf{b}|^2} + v\mathbf{q} - \frac{\mathbf{q}(\mathbf{b}q)^2}{q^2 |\mathbf{b}|^2} \right\}, \quad (29)$$

де v — Пуассонів коефіцієнт; R_0 — радіус дефекту. Тоді усереднений скалярний добуток Фур'є-компонент поля зміщень на вектор оберненої ґратниці матиме вигляд:

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

$$\begin{aligned}
& + \frac{(\eta - 3)}{q_1^2 q_2^{*2}} \left[(1 - v)^2 S(\mathbf{H}, \mathbf{H}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2^*) - \frac{1 - v}{2} \times \right. \\
& \times \left(\frac{(\mathbf{H}\mathbf{q}_1) S(\mathbf{H}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2^*)}{q_1^2} + \frac{(\mathbf{H}\mathbf{q}_2^*) S(\mathbf{H}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2^*, \mathbf{q}_2^*)}{q_2^{*2}} \right) + \\
& \left. + \frac{(\mathbf{H}\mathbf{q}_1)(\mathbf{H}\mathbf{q}_2^*) S(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2^*, \mathbf{q}_2^*)}{4q_1^2 q_2^{*2}} \right] \Bigg\}, \quad (30)
\end{aligned}$$

де індекси 1 і 2 відповідають парам індексів $\delta\tau$ та $\lambda\sigma$, $\eta = C_{n_1}^1 / C_{n_1}^2$, $C_{n_1}^m$ — біноміальні коефіцієнти, $S(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, \mathbf{a}_4) = a_{1x}a_{2x}a_{3x}a_{4x} + a_{1y}a_{2y}a_{3y}a_{4y} + a_{1z}a_{2z}a_{3z}a_{4z}$, а n_1 дорівнює числу одиниць у Бюргерсовім векторі. Пара чисел (n_1, η) визначає тип усереднення, і для орієнтацій $\langle 110 \rangle$ та $\langle 111 \rangle$ відповідно дорівнює $(2, 2)$ та $(3, 1)$.

Інтегрування виразу (27) по вертикальній розбіжності Рентгенових променів у ТКД, тобто, за компонентою переданого імпульсу k_y , зводиться до узяття інтегралів від виразів типу (30) і його буде зручно виконати, якщо розкласти (30) на суму елементарних дробів:

$$\left\langle (\mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}_{\delta\tau}})(\mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}_{\lambda\sigma}})^* \right\rangle = \sum_0 \left(\frac{\Sigma_1}{(k_y^2 + p_1^2)^2} + \frac{\Sigma_2}{(k_y^2 + p_2^2)^2} + \frac{\Sigma_3}{k_y^2 + p_1^2} + \frac{\Sigma_4}{k_y^2 + p_2^2} \right), \quad (31)$$

якщо $\delta\tau \neq \lambda\sigma$,

$$\left\langle (\mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}_{\delta\tau}})(\mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}_{\lambda\sigma}})^* \right\rangle = \sum_0 \left(\frac{\tilde{\Sigma}_1}{k_y^2 + p^2} + \frac{\tilde{\Sigma}_2}{(k_y^2 + p^2)^2} + \frac{\tilde{\Sigma}_3}{(k_y^2 + p^2)^3} + \frac{\tilde{\Sigma}_4}{(k_y^2 + p^2)^4} \right), \quad (32)$$

якщо $\delta\tau = \lambda\sigma$,

де $\mathbf{p}_{\delta\tau} = \mathbf{q}_{\delta\tau} - k_y \mathbf{e}_y$, вектори $\mathbf{p}_1$ і $\mathbf{p}_2$ відповідають векторам $\mathbf{p}_{\delta\tau}$ з парами індексів, що не співпадають, а вектор $\mathbf{p} = \mathbf{p}_{\delta\tau}$ для співпадаючих пар індексів. Константи Σ_n та $\tilde{\Sigma}_n$ у виразах (31) і (32) знаходяться методом невизначених коефіцієнтів:

$$\begin{aligned}
\Sigma_0 &= \frac{4C_{n_1}^2}{3} \left(\frac{\pi |\mathbf{b}| R_0^2}{v_c (1 - v) n_1} \right)^2, \quad \Sigma_1 = -\frac{2M_{12}L_{12}^2}{(\Delta p^2)^2} + 4(1 - v) \frac{M_{11}L_{12}}{\Delta p^2} + \frac{(\eta - 3)}{\Delta p^2} \times \\
&\times \left[2(1 - v) (H_y^2 p_1^4 + (\mathbf{H}\mathbf{p}_1) S(\mathbf{H}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2^*)) - \frac{M_{12} (p_1^4 + S(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2^*, \mathbf{p}_2^*))}{\Delta p^2} \right],
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Sigma_2 = & -\frac{2M_{21}L_{21}^2}{(\Delta p^2)^2} - 4(1-\nu)\frac{M_{22}L_{21}}{\Delta p^2} - \frac{(\eta-3)}{\Delta p^2} \times \\
& \times \left[2(1-\nu)\left(H_y^2 p_2^4 + (\mathbf{H}\mathbf{p}_2^*)S(\mathbf{H}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2^*, \mathbf{p}_2^*)\right) + \frac{M_{21}(p_2^4 + S(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2^*, \mathbf{p}_2^*))}{\Delta p^2} \right], \\
\Sigma_3 = & \frac{((9-4\eta n_1)\nu^2 + 2(\eta n_1 - 6)\nu + 5)M_{12}}{\Delta p^2} + \\
& + \frac{4(1-\nu)^2 H^2 L_{12}}{\Delta p^2} + \frac{2L_{12}}{(\Delta p^2)^2} \left(M_{12} - \frac{M_{12}L_{21} + M_{21}L_{12}}{\Delta p^2} \right) - 4(1-\nu) \\
& \times \left[\frac{1}{\Delta p^2} \left(H_y^2 L_{12} - \frac{M_{11}L_{21}}{\Delta p^2} \right) + \frac{L_{12}}{\Delta p^2} \left(H_y^2 + \frac{M_{22}}{\Delta p^2} \right) - (\eta-3)(1-\nu) \frac{H_y^2 p_1^2 - S(\mathbf{H}, \mathbf{H}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2^*)}{\Delta p^2} \right] - \\
& - 2(\eta-3)(1-\nu) \left[H_y^2 - \frac{H_y^2 p_2^4 + (\mathbf{H}\mathbf{p}_1)S(\mathbf{H}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2^*)}{(\Delta p^2)^2} + \frac{H_y^2 p_1^4 + (\mathbf{H}\mathbf{p}_2^*)S(\mathbf{H}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2^*, \mathbf{p}_2^*)}{(\Delta p^2)^2} \right] + \\
& + \frac{\eta-3}{\Delta p^2} \left(M_{12} - \frac{M_{21}(p_1^4 + S(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2^*, \mathbf{p}_2^*))}{(\Delta p^2)^2} \right), \\
\Sigma_4 = & -\frac{((9-4\eta n_1)\nu^2 + 2(\eta n_1 - 6)\nu + 5)M_{21}}{\Delta p^2} - \frac{4(1-\nu)^2 H^2 L_{21}}{\Delta p^2} + \frac{2L_{21}}{(\Delta p^2)^2} \times \\
& \times \left(M_{21} + \frac{M_{12}L_{21} + M_{21}L_{12}}{\Delta p^2} \right) + 4(1-\nu) \left[\frac{1}{\Delta p^2} \left(H_y^2 L_{21} + \frac{M_{22}L_{12}}{\Delta p^2} \right) + \right. \\
& + \frac{L_{21}}{\Delta p^2} \left(H_y^2 - \frac{M_{11}}{\Delta p^2} \right) + (\eta-3)(1-\nu) \frac{S(\mathbf{H}, \mathbf{H}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2^*) - H_y^2 p_2^2}{\Delta p^2} \left. \right] - \\
& - 2(\eta-3)(1-\nu) \times \\
& \times \left[H_y^2 + \frac{H_y^2 p_2^4 + (\mathbf{H}\mathbf{p}_1)S(\mathbf{H}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2^*)}{(\Delta p^2)^2} - \frac{H_y^2 p_1^4 + (\mathbf{H}\mathbf{p}_2^*)S(\mathbf{H}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2^*, \mathbf{p}_2^*)}{(\Delta p^2)^2} \right] \\
& - \frac{\eta-3}{\Delta p^2} \left(M_{21} - \frac{M_{12}(p_2^4 + S(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2^*, \mathbf{p}_2^*))}{(\Delta p^2)^2} \right), \\
\tilde{\Sigma}_1 = & 4(1-\nu)^2 H^2 + \left[(4\eta(1-n_1) - 3)\nu^2 + (2\eta(n_1 - 2) + 8)\nu + \eta - 4 \right] H_y^2,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{\Sigma}_2 &= \left[(9 - 4\eta n_1) v^2 + 2(\eta n_1 - 6) v + \eta + 4 \right] |\mathbf{H}\mathbf{p}|^2 + \\
&+ 4(1 - v) \left[(\eta - 3) \left(2H_y^2 p^2 + (1 - v) S(\mathbf{H}, \mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{p}^*) \right) - 2 \operatorname{Re}(\mathbf{H}\mathbf{p})^2 \right] + \\
&+ \left[(4\eta(n_1 - 1) + 3) v^2 - 2(\eta(n_1 - 4) + 10) v - 7\eta + 22 \right] H_y^2 p^2, \\
\tilde{\Sigma}_3 &= (\eta - 3) \left\{ \left(3p^4 + S(\mathbf{p}, \mathbf{p}, \mathbf{p}^*, \mathbf{p}^*) \right) H_y^2 - 2p^2 |\mathbf{H}\mathbf{p}|^2 - \right. \\
&\left. - 4(1 - v) \left(p^4 + \operatorname{Re} \left[(\mathbf{H}\mathbf{p}) S(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{p}, \mathbf{p}^*) \right] \right) \right\}, \\
\tilde{\Sigma}_4 &= (\eta - 3) \left(|\mathbf{H}\mathbf{p}|^2 - H_y^2 p^2 \right) \left(p^4 + S(\mathbf{p}, \mathbf{p}, \mathbf{p}^*, \mathbf{p}^*) \right),
\end{aligned}$$

де введено позначення $\Delta p^2 = p_1^2 - p_2^2$,

$$\begin{aligned}
M_{11} &= H_y^2 p_1^2 - (\mathbf{H}\mathbf{p}_1)^2, M_{22} = H_y^2 p_2^2 - (\mathbf{H}\mathbf{p}_2^*)^2, L_{12} = p_1^2 - (\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2^*), \\
M_{12} &= H_y^2 p_1^2 - (\mathbf{H}\mathbf{p}_1)(\mathbf{H}\mathbf{p}_2^*), M_{21} = H_y^2 p_2^2 - (\mathbf{H}\mathbf{p}_1)(\mathbf{H}\mathbf{p}_2^*), L_{21} = p_2^2 - (\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2^*).
\end{aligned}$$

При переході до області розсіяння Стокса–Вільсона розклад (31) слід помножити на $k_m^2 / (k_y^2 + p_a^2)$ (тут $p_a^2 = (p_1^2 + p_2^2) / 2$ і умовою переходу є нерівність $k_y > \sqrt{k_m^2 - p_a^2}$), а розклад (32) — на $k_m^2 / (k_y^2 + p^2)$ при виконанні умови $k_y > \sqrt{k_m^2 - p^2}$. Параметер $k_m = 1/R_{\text{eff}}$ визначає радіус межі в імпульсному просторі між областями ДР Хуаня–Кривоглаза і Стокса–Вільсона, де R_{eff} — ефективний радіус дефекту [15].

При розрахунку розподілу дифузної складової на картах оберненого простору зв'язок величин k_x та k_z з кутами $\Delta\theta$ і $\Delta\theta'$ обирався у вигляді, що впливає з (I.78) для симетричної Ляве-дифракції ($\psi = 0$):

$$\begin{cases} k_x = K \Delta\theta' \cos \theta_B, \\ k_z = K [2\Delta\theta - \Delta\theta'] \sin \theta_B. \end{cases}$$

Карти розподілу інтенсивності ДР (нормовані на інтенсивність у максимумі) в площині дифракції (при $k_y = 0$) для призматичних дислокаційних петель з орієнтаціями $\langle 110 \rangle$ та $\langle 111 \rangle$ наведено відповідно на рис. 1 і 2 у випадку симетричної Ляве-дифракції Рентгенових променів у кристалах різної товщини. Ізодифузні лінії (лінії однакової інтенсивності ДР) для обох наборів орієнтацій петель у випадку тонкого кристалу (рис. 1, а і 2, а) мають форму овалів, які витягнуті вздовж вісі k_z . Розподіл інтенсивності ДР від петель з орієнтаціями $\langle 111 \rangle$ вузьчий, ніж від петель $\langle 110 \rangle$, а максимуми виділяються чіткіше. При збільшенні товщини кристалу в обох випадках орієнтації петель (рис. 1, б і в та 2, б і в) ізолінії на мапах ви-

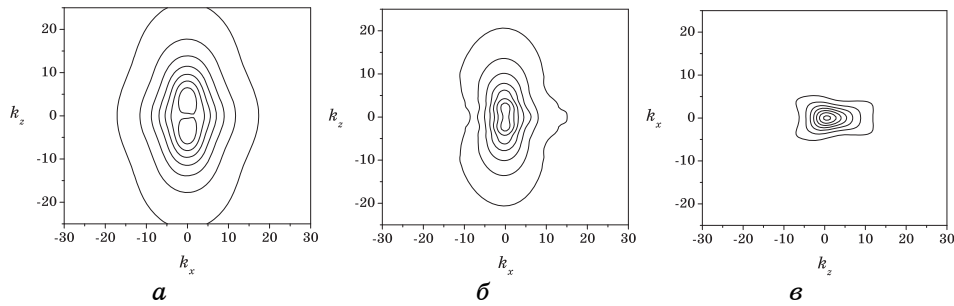


Рис. 1. Карта розподілу інтенсивності ДР в площині дифракції у випадку симетричної Ляве-дифракції характеристичного випромінювання CuK_α для призматичних дислокаційних петель з дискретними орієнтаціями $\langle 110 \rangle$ і радіусом $R = 0,05|\Lambda|$ (Λ — довжина екстинкції «сильних» Бреґгових хвиль) у кристалі Si товщиною 5 мкм (а), 50 мкм (б) і 500 мкм (в). Одиниця мірювання по осях k_x і k_z складає $\pi/|\Lambda|$.

тягуються вздовж напрямків в оберненому просторі, які відповідають точним Бреґговим умовам для хвильових векторів падаючого і дифрагованого променів (Борманів ефект для інтенсивності ДР). Наявність провалу в центрі вказаних розподілів є наслідком екстинкційного ефекту в інтенсивності ДР (ефекту маятникових осциляцій, що є аналогічним маятниковому розв'язку для інтенсивності когерентного розсіювання).

Детальніше цей ефект представлено на рис. 3, де зображено товщинні осциляції висоти піка диференційної інтенсивності ДР у площині дифракції (точніше, його центральної точки $k_x = k_z = 0$) для випадків тонкого (рис. 3, а) і товстого кристалів (рис. 3, в). Як видно, товщинні осциляції ДР мають менший період (за рахунок меншої довжини екстинкції) і швидше затухають (за рахунок більшого коефіцієнта фотоелектричного поглинання) при використанні CuK_α -випромінювання (тов-

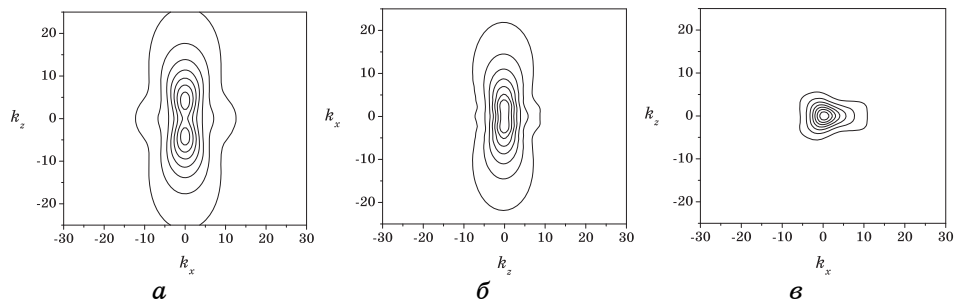


Рис. 2. Карта розподілу інтенсивності ДР для призматичних дислокаційних петель з дискретними орієнтаціями $\langle 111 \rangle$. Решту даних наведено у підпису до рис. 1.

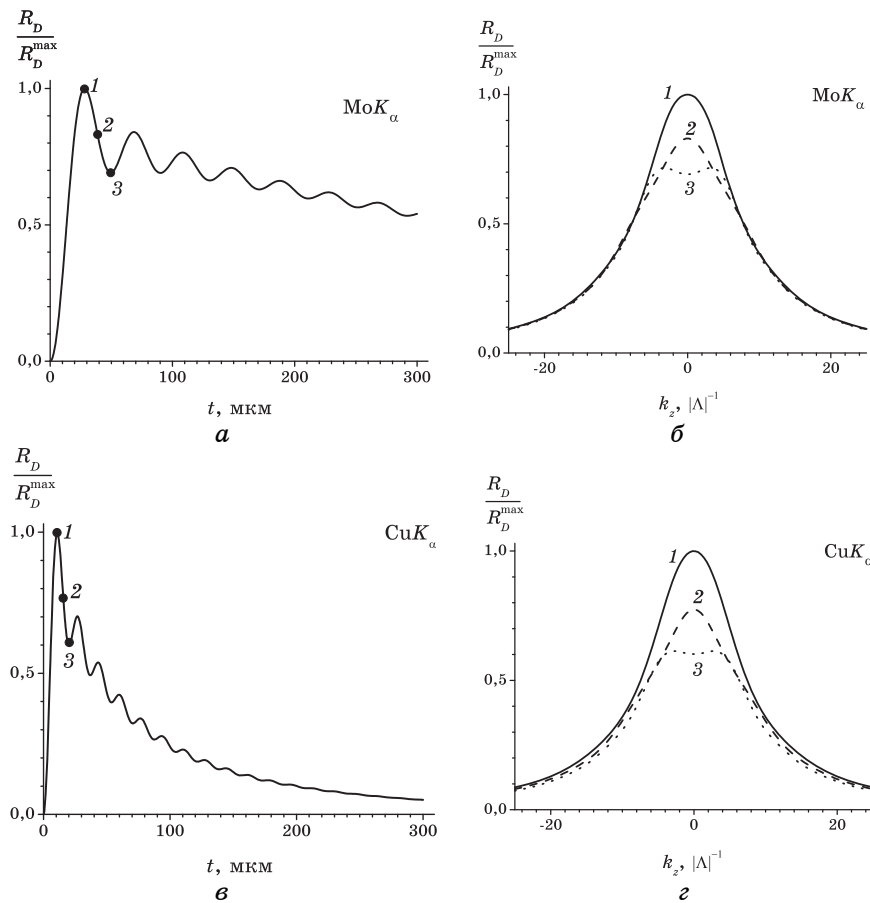


Рис. 3. Товщинні осциляції висоти центральної точки ($k_x = k_z = 0$) піка диференційної інтенсивності ДР в площині дифракції для призматичних дислокаційних петель з дискретними орієнтаціями вектора Бюргерса $\langle 111 \rangle$ (радіус петель $R_L = 0,01$ мкм, їх концентрація $n_L = 10^{12}$ см⁻³) (а) і (в) та профілі вздовж вісі k_z (при $k_x = 0$) цієї інтенсивності (б) і (г) для трьох товщин кристалу Si, що вказані маркерами на рис. (а), (в) і пронумеровані на рисунках цифрами від 1 до 3. Для випадку тонкого кристалу (MoK_α-випромінення, $|\Lambda| = 41$ мкм) $t_1 = 28,1$ мкм, $t_2 = 38,8$ мкм, $t_3 = 49,5$ мкм, а для випадку товстого кристалу (CuK_α-випромінення, $|\Lambda| = 17$ мкм) $t_1 = 10,7$ мкм, $t_2 = 15,5$ мкм, $t_3 = 20,3$ мкм. Усі наведені значення диференційної інтенсивності ДР для різних довжин хвиль нормовано на величину першого максимуму на відповідних товщинних залежностях.

стий кристал), ніж у випадку MoK_α-випромінення (тонкий кристал).

Спостерігається не тільки періодична зміна висоти піка розподілу інтенсивності ДР з товщиною кристалу, а й суттєва зміна кутового розподілу інтенсивності у центрі піка (рис. 3, б, г). На розподілах дифере-

нційної інтенсивності ДР вздовж вісі k_z (при $k_x = k_y = 0$), які ілюструють цю зміну за різних товщин кристалу (в межах напівперіоду першої осциляції товщинної залежності), видно перехід від структури піка з одиночним максимумом до двогорбої форми.

Неважко помітити, що випадки сферично симетричних кластерів і сферично усереднених дислокаційних петель є частинними випадками (30) і тому розклади (31) та (32) і всі одержані далі формули будуть слухними також і для них при відповідному перерахуванні констант A_n та B_n .

Коефіцієнти розкладу раціонального дробу (30) у випадку сферично симетричних кластерів з потужністю $A_{cl} = \Gamma \varepsilon R_0^3$ ($\Gamma = (1 + \nu)/(3 - 3\nu)$) (ε — деформація на межі кластера) мають вигляд:

$$\Sigma_0 = (4\pi A_{cl} H / \nu_c)^2, \quad \Sigma_1 = \Sigma_2 = 0, \quad \Sigma_3 = \frac{H_y^2 p_1^2 - (\mathbf{H}\mathbf{p}_1)(\mathbf{H}\mathbf{p}_2^*)}{\Delta p^2},$$

$$\Sigma_4 = \frac{-H_y^2 p_2^2 + (\mathbf{H}\mathbf{p}_1)(\mathbf{H}\mathbf{p}_2^*)}{\Delta p^2}, \quad \tilde{\Sigma}_1 = H_y^2, \quad \tilde{\Sigma}_2 = |\mathbf{H}\mathbf{p}|^2 - H_y^2 p^2, \quad \tilde{\Sigma}_3 = \tilde{\Sigma}_4 = 0.$$

Аналогічно для випадку сферично усереднених дислокаційних петель:

$$\Sigma_0 = (H\pi|\mathbf{b}|R_0^2 / \nu_c (1 - \nu))^2 / 15, \quad \Sigma_1 = \frac{2L_{12}}{\Delta p^2} \left(2(1 - \nu) M_{11} - \frac{M_{12}L_{12}}{\Delta p^2} \right),$$

$$\Sigma_2 = -\frac{2L_{21}}{\Delta p^2} \left(2(1 - \nu) M_{22} + \frac{M_{21}L_{21}}{\Delta p^2} \right), \quad \Sigma_3 = (3\nu^2 - 2\nu + 7) \frac{M_{12}}{\Delta p^2} -$$

$$-\frac{2(M_{12}L_{21}^2 + M_{21}L_{12}^2)}{(\Delta p^2)^3} + \frac{4(1 - \nu)}{\Delta p^2} \left[L_{12}((1 - \nu)H^2 - 2H_y^2) + \frac{M_{11}L_{21} - M_{22}L_{12}}{\Delta p^2} \right],$$

$$\Sigma_4 = \frac{2(M_{12}L_{21}^2 + M_{21}L_{12}^2)}{(\Delta p^2)^3} - (3\nu^2 - 2\nu + 7) \frac{M_{21}}{\Delta p^2} - \frac{4(1 - \nu)}{\Delta p^2} \times$$

$$\times \left[L_{21}((1 - \nu)H^2 - 2H_y^2) + \frac{M_{11}L_{21} - M_{22}L_{12}}{\Delta p^2} \right],$$

$$\tilde{\Sigma}_1 = 4(1 - \nu)^2 H^2 + (3\nu^2 + 6\nu - 1) H_y^2,$$

$$\tilde{\Sigma}_2 = (3\nu^2 - 2\nu + 7) |\mathbf{H}\mathbf{p}|^2 - (3\nu^2 + 6\nu - 1) H_y^2 p^2 - 8(1 - \nu) \text{Re}(\mathbf{H}\mathbf{p}),$$

$$\tilde{\Sigma}_3 = \tilde{\Sigma}_4 = 0.$$

Карти розподілу інтенсивності ДР в площині дифракції (при $k_y = 0$) для призматичних дислокаційних петель, сферично усеред-

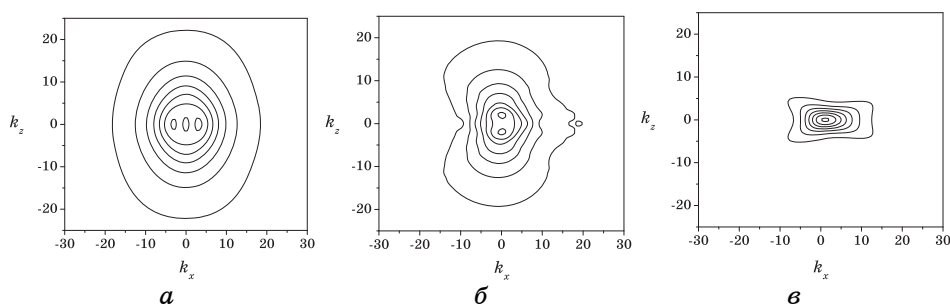


Рис. 4. Карта розподілу інтенсивності ДР для сферично усереднених дислокаційних петель. Решту даних наведено у підпису до рис. 1.

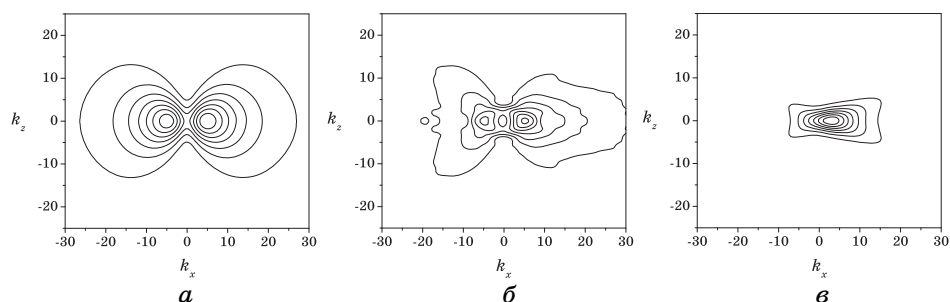


Рис. 5. Карта розподілу інтенсивності ДР для сферично симетричних кластерів. Решту даних наведено у підпису до рис. 1.

нених за орієнтаціями, та сферично симетричних кластерів наведені відповідно на рис. 4 і 5 у випадку симетричної Ляве-дифракції Рентгенових променів у кристалах різної товщини. Порівняно з розподілами інтенсивності ДР від петель з дискретними орієнтаціями $\langle 110 \rangle$ та $\langle 111 \rangle$ ізолінії для моделю сферично усереднених петель є менш витягнутими вздовж вісі k_z і у випадку тонкого кристалу їх форма наближається до кола. При цьому у випадку товстого кристалу через стягування дифузного фону до вузла оберненої ґратниці (завдяки ефектам аномального проходження і загасання дифузних хвиль) зникає тонка структура піків ДР, що особливо помітно на розподілах ДР від сферичних кластерів (рис. 5).

4. ІНСТРУМЕНТАЛЬНІ ФАКТОРИ ТКД

Результат інтегрування (яке є наслідком врахування інструментальних факторів ТКД) виразу для диференційного розподілу інтенсивності ДР (27) по вертикальній розбіжності Рентгенових променів в загальному випадку можна записати у наступному вигляді:

$$r_{\text{diff}}(\mathbf{p}) = \left(\frac{CEK^2}{16\pi\gamma_H} \right)^2 \left| \frac{CE\chi_H + \Delta\chi_{H0}}{CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}} \right| \frac{v_c tc(1-c)\Sigma_0}{|y^2 + 1||y'^2 + 1|} \times$$

$$\times \sum_{\delta\tau\lambda\sigma} (-1)^{\delta+\tau+\lambda+\sigma} X_{\delta\tau} \sqrt{\zeta'_\delta} \left(X_{\lambda\sigma} \sqrt{\zeta'_\lambda} \right)^* \Pi_{\delta\zeta\lambda\sigma} I_{SW}^\infty, \quad (33)$$

якщо область розсіяння Хуаня–Кривоглаза не попадає в проміжок інтегрування, або

$$r_{\text{diff}}(\mathbf{p}) = \left(\frac{CEK^2}{16\pi\gamma_H} \right)^2 \left| \frac{CE\chi_H + \Delta\chi_{H0}}{CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}} \right| \frac{v_c tc(1-c)\Sigma_0}{|y^2 + 1||y'^2 + 1|} \times$$

$$\times \sum_{\delta\tau\lambda\sigma} (-1)^{\delta+\tau+\lambda+\sigma} X_{\delta\tau} \sqrt{\zeta'_\delta} \left(X_{\lambda\sigma} \sqrt{\zeta'_\lambda} \right)^* \Pi_{\delta\zeta\lambda\sigma} (I_{SW}^\infty - I_{SW}^A + I_H^A), \quad (34)$$

якщо проміжок інтегрування містить області розсіяння як Хуаня–Кривоглаза, так і Стокса–Вільсона. Функція I_{SW}^∞ дорівнює значенню інтеграла від (31) або (32) по області Стокса–Вільсона такий, що займає весь обернений простір, а функції I_H^A та I_{SW}^A дорівнюють інтегралам по областях Хуаня–Кривоглаза та Стокса–Вільсона обмежених по змінній k_y відрізком $[-A, A]$.

У випадку, коли $\delta\tau \neq \lambda\sigma$, граничне значення $A = \sqrt{k_m^2 - p_a^2}$ і інтеграли у формулах (33) та (34) описуються виразами:

$$I_{SW}^\infty = \frac{2k_m^2\pi}{\Delta kp^2} \left[\frac{1}{p_a} \left(\Sigma_3 - \Sigma_4 + \frac{2(\Sigma_1 + \Sigma_2)}{\Delta p^2} \right) - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{p_1} \left(\Sigma_3 + \Sigma_1 \left(\frac{1}{2p_1^2} + \frac{2}{\Delta p^2} \right) \right) + \frac{1}{p_2} \left(\Sigma_4 + \Sigma_2 \left(\frac{1}{2p_2^2} - \frac{2}{\Delta p^2} \right) \right) \right], \quad (35)$$

$$I_{SW}^A = \frac{4k_m^2}{\Delta kp^2} \left[\left(\Sigma_3 - \Sigma_4 + \frac{2(\Sigma_1 + \Sigma_2)}{\Delta p^2} \right) \frac{\arctan(A/p_a)}{p_a} - \right.$$

$$\left. - \left(\Sigma_3 + \Sigma_1 \left(\frac{1}{2p_1^2} + \frac{2}{\Delta p^2} \right) \right) \frac{\arctan A/p_1}{p_1} + \right.$$

$$\left. + \left(\Sigma_4 + \Sigma_2 \left(\frac{1}{2p_2^2} - \frac{2}{\Delta p^2} \right) \right) \frac{\arctan A/p_2}{p_2} - \frac{\Sigma_1 A}{2p_1^2(A^2 + p_1^2)} + \frac{\Sigma_2 A}{2p_2^2(A^2 + p_2^2)} \right], \quad (36)$$

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

$$\left. + \left(2\Sigma_4 + \frac{\Sigma_2}{p_2^2} \right) \frac{\arctan A/p_2}{p_2} + \frac{\Sigma_1 A}{p_1^2(A^2 + p_1^2)} + \frac{\Sigma_2 A}{p_2^2(A^2 + p_2^2)} \right\}. \quad (37)$$

У випадку, коли $\delta\tau = \lambda\sigma$, граничне значення $A = \sqrt{k_m^2 - p^2}$ і інтеграли у виразах (33)–(34) мають вигляд:

$$I_{SW}^{\infty} = \frac{k_m^2 \pi}{2kp^3} \left\{ \tilde{\Sigma}_1 + \frac{3}{4p^2} \left[\tilde{\Sigma}_2 + \frac{5}{6p^2} \left(\tilde{\Sigma}_3 + \frac{7\tilde{\Sigma}_4}{8p^2} \right) \right] \right\}, \quad (38)$$

$$I_{SW}^A = \frac{1}{k} \left\{ \left(\tilde{\Sigma}_1 + \frac{3}{4p^2} \left[\tilde{\Sigma}_2 + \frac{5}{6p^2} \left(\tilde{\Sigma}_3 + \frac{7\tilde{\Sigma}_4}{8p^2} \right) \right] \right) \left(\frac{k_m^2 \arctan A/p}{p^3} + \frac{A}{p^2} \right) + \right. \\ \left. + \frac{A}{2p^2 k_m^2} \left[\tilde{\Sigma}_2 + \frac{3}{4p^2} \left(\tilde{\Sigma}_3 + \frac{5\tilde{\Sigma}_4}{6p^2} \right) \right] + \frac{A}{3p^2 k_m^4} \left(\tilde{\Sigma}_3 + \frac{5\tilde{\Sigma}_4}{6p^2} \right) + \frac{A\tilde{\Sigma}_4}{4p^2 k_m^6} \right\}, \quad (39)$$

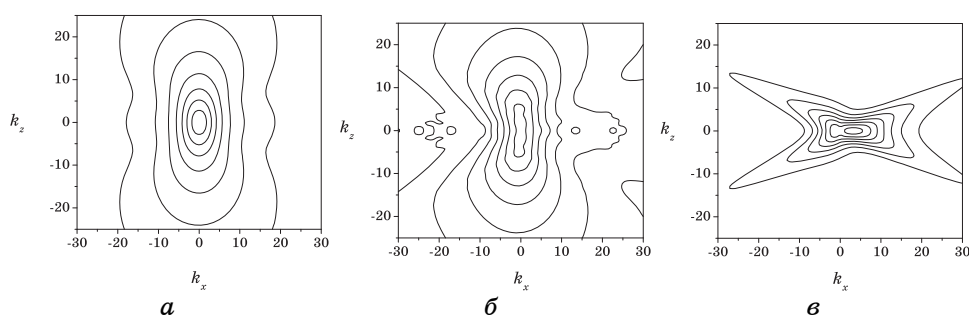


Рис. 6. Карта розподілу інтенсивності ДР в площині дифракції з врахуванням вертикальної розбіжності у випадку симетричної Ляве-дифракції характеристичного випромінення CuK_α для призматичних дисльокаційних петель з дискретними орієнтаціями $\langle 110 \rangle$ і радіусом $R = 0,05|\Lambda|$ у кристалі Si товщиною 5 мкм (а), 50 мкм (б) і 500 мкм (в). Одиниця мірювання по осях k_x і k_z складає $\pi/|\Lambda|$.

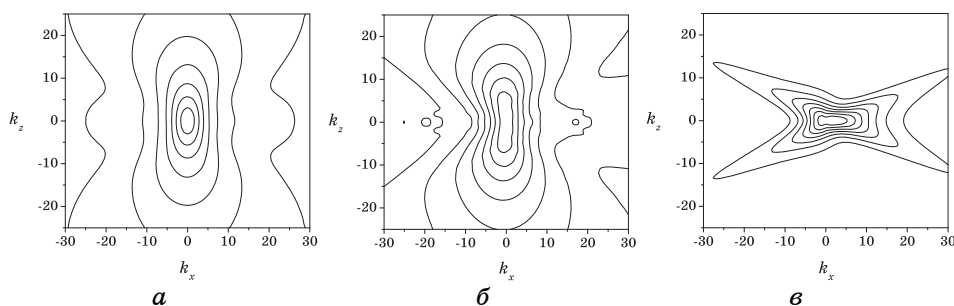


Рис. 7. Карта розподілу інтенсивності ДР для призматичних дисльокаційних петель з дискретними орієнтаціями $\langle 111 \rangle$ з врахуванням вертикальної розбіжності. Решту даних наведено у підпису до рис. 5.

$$I_H^A = \frac{1}{k} \left\{ \left(2\tilde{\Sigma}_1 + \frac{1}{p^2} \left[\tilde{\Sigma}_2 + \frac{3}{4p^2} \left(\tilde{\Sigma}_3 + \frac{5\tilde{\Sigma}_4}{6p^2} \right) \right] \right) \frac{\arctan(A/p)}{p} + \right. \\ \left. + \frac{A}{p^2 k_m^2} \left[\tilde{\Sigma}_2 + \frac{3}{4p^2} \left(\tilde{\Sigma}_3 + \frac{5\tilde{\Sigma}_4}{6p^2} \right) \right] + \frac{A}{2p^2 k_m^4} \left(\tilde{\Sigma}_3 + \frac{5\tilde{\Sigma}_4}{6p^2} \right) + \frac{A\tilde{\Sigma}_4}{3p^2 k_m^6} \right\}. \quad (40)$$

Карти розподілу інтенсивності ДР (нормованої на інтенсивність у максимумі) в площині дифракції для призматичних дисльокаційних петель з дискретними орієнтаціями $\langle 110 \rangle$ і $\langle 111 \rangle$ після інтегрування по вертикальній розбіжності наведено відповідно на рис. 6 і 7 у випадку симетричної Ляве-дифракції Рентгенових променів для кристалів різної товщини. У порівнянні з непроінтегрованими диференціальними розподілами інтенсивності ДР, які представлені на рис. 1 та 2, форма ізоліній стала більш розмитою завдяки повільнішому спаданню інтенсивності ДР після інтегрування. Так само більш розмитими стали й піки інтенсивності ДР.

Для різних товщин кристалу у випадку симетричної Ляве-дифракції Рентгенових променів на рис. 8 і 9 наведено карти розподілу інтенсивності ДР в площині дифракції після інтегрування по вертикальній розбіжності відповідно для призматичних дисльокаційних петель, сферично усереднених за орієнтаціями, та сферично симетричних кластерів. Аналогічно до випадку дискретно орієнтованих петель карти відображають більш плавне спадання інтенсивності ДР після інтегрування за вертикальною розбіжністю.

Варто підкреслити, що результати розгляду впливу дискретно орієнтованих дисльокаційних петель на процеси взаємоузгодженого формування когерентної і дифузної складових динамічної картини розсіяння можуть бути безпосередньо перенесені на випадок дископодібних кластерів, що залягають в еквівалентних площинах кристалічної ґратниці. Для цього достатньо в усіх вищенаведених виразах (включно з виразами першої частини цієї роботи, яка надрукована окремо) під вектором $\mathbf{b}$ розуміти нормаль до площини залягання дископодібного кластера, а «потужність» петлі ($\pi |\mathbf{b}| R_0^2$) замінити на потужність цього кластера $A_{c1} = 3\Gamma \varepsilon V_c / 4\pi$ (V_c — об'єм дископодібного кластера [18]).

5. РЕЗЮМЕ І ВИСНОВКИ

На основі статистичної динамічної теорії розсіяння Рентгенових променів у монокристалах з хаотично розподіленими дефектами розглянуто динамічне ДР у випадку геометрії дифракції за Ляве. Одержано аналітичні вирази для диференційної та проінтегрованої по вертикальній розбіжності інтенсивностей ДР, які враховують анізотропію полів зміщень атомів матриці навколо дефектів, зок-

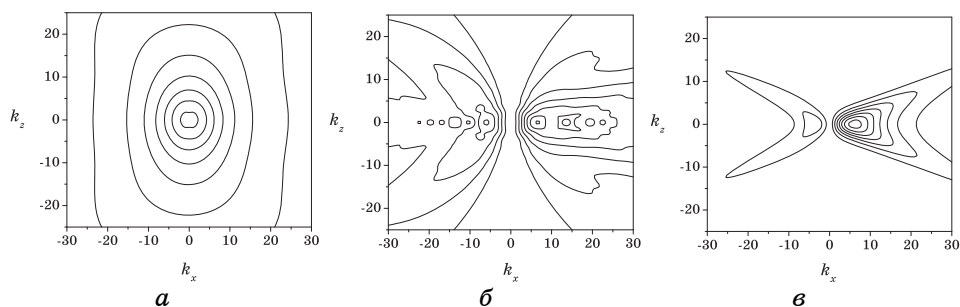


Рис. 8. Карта розподілу інтенсивності ДР для сферично усереднених дислокаційних петель з врахуванням вертикальної розбіжності. Решту даних наведено у підпису до рис. 5.

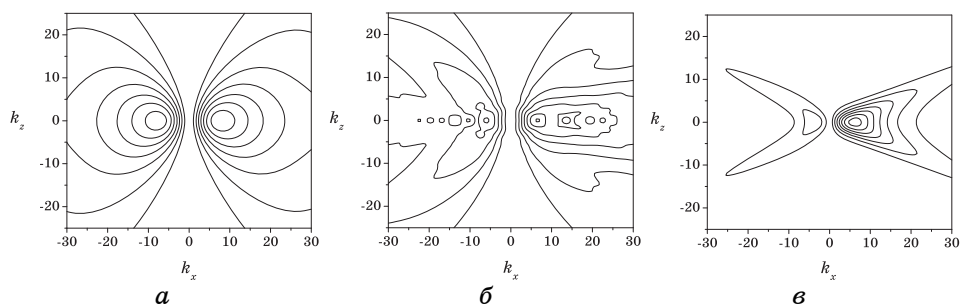


Рис. 9. Карта розподілу інтенсивності ДР для сферично симетричних кластерів з врахуванням вертикальної розбіжності. Решту даних наведено у підпису до рис. 5.

рема, анізотропію, що спричинена однорідно розподіленими призматичними дислокаційними петлями з дискретними орієнтаціями $\langle 110 \rangle$ та $\langle 111 \rangle$, а також дископодібними кластерами з такими ж орієнтаціями. Показано, що одержані формули при відповідному виборі коефіцієнтів описують також випадки сферично усереднених дислокаційних петель і сферично симетричних кластерів.

Для розглянутих варіантів дискретних орієнтацій дислокаційних петель побудовано мапи розподілу інтенсивності ДР в просторі оберненої ґратниці і показано суттєву відмінність їх форми від відповідного розподілу інтенсивності ДР для моделю сферично усереднених дислокаційних петель. Проведено аналізу залежності форми ізоліній ДР від товщини кристалу і продемонстровано ефекти маятникових осциляцій і аномального проходження хвиль, які дифузно розсіяні, у тому числі, на дислокаційних петлях з різними наборами еквівалентних орієнтацій.

Для всіх розглянутих типів дефектів показано вплив інтегруван-

ня за вертикальною розбіжністю на розподілі інтенсивності ДР, які реєструються ТКД у режимі картографування простору оберненої ґратниці. Цей вплив проявляється, здебільшого, в розмитті відповідних дифракційних картин. Як видно з наведених результатів, врахування як анізотропії полів зміщень атомів матриці навколо дефектів, так і вертикальної розбіжності Рентгенових променів у ТКД має важливе значення для коректної кількісної характеристики дефектів з використанням експериментальних карт розподілів в просторі оберненої ґратниці дифрагованої інтенсивності.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. М. А. Кривоглаз, *Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах* (Київ: Наукова думка: 1983).
2. Л. И. Даденко, В. Б. Молодкин, М. Е. Осинковский, *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами* (Київ: Наукова думка: 1988).
3. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, E. G. Len, and E. V. Pervak, *Phys. Status Solidi B*, **227**, No. 2: 429 (2001).
4. S. I. Olikhovskii, V. B. Molodkin, E. N. Kislovskii, E. G. Len, and E. V. Pervak, *Phys. Status Solidi B*, **231**, No. 1: 199 (2002).
5. В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, М. Е. Осинковский и др., *Металлофизика*, **6**, № 3: 7 (1984).
6. В. В. Немошкालенко, В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский и др., *Металлофизика*, **15**, № 11: 53 (1993).
7. V. B. Molodkin, V. V. Nemoshkalenko, S. I. Olikhovskii et al., *Металлофиз. новейшие технол.*, **20**, № 11: 29 (1998).
8. Н. Н. Новиков, С. И. Олиховский, В. Г. Сушко, П. А. Теселько, *Металлофиз. новейшие технол.*, **23**, № 3: 283 (2001).
9. В. Г. Баряхтар, В. В. Немошкаленко, В. Б. Молодкин и др., *Металлофизика*, **15**, № 12: 72 (1993).
10. В. В. Немошкаленко, В. Б. Молодкин, Е. Н. Кисловский и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **22**, № 2: 42 (2000).
11. V. B. Molodkin, M. Ando, E. N. Kislovskii et al., *Металлофиз. новейшие технол.*, **24**, № 4: 541 (2002).
12. С. Й. Оліховський, В. Б. Молодкін, Є. М. Кисловський та ін., *Металлофиз. новейшие технол.*, **27**, № 7: 947 (2005).
13. А. П. Шпак, В. Б. Молодкін, С. Й. Оліховський та ін., *Металлофиз. новейшие технол.*, **27**, № 9: 1223 (2005).
14. A. P. Shpak, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii et al., *Phys. Status Solidi*, **204**, No. 8: 2651 (2007).
15. Є. М. Кисловський, С. Й. Оліховський, В. Б. Молодкін та ін., *Металлофиз. новейшие технол.*, **22**, № 7: 21 (2000).
16. Т. П. Владімірова, Р. Ф. Середенко, В. Б. Молодкін, С. Й. Оліховський, Є. М. Кисловський, *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 6: 711 (2007).
17. Ye. M. Kyslovskyy, T. P. Vladimirova, S. I. Olikhovskii et al., *Phys. Status Solidi A*, **204**, No. 8: 2591 (2007).
18. С. Й. Оліховський, Є. М. Кисловський, В. Б. Молодкін та ін., *Металлофиз. новейшие технол.*, **22**, № 6: 3 (2000).