

## **ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ И ЧАСТИЦ С КОНДЕНСИРОВАННЫМ ВЕЩЕСТВОМ**

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

### **Явление усиления на порядки величины проявления дефектов в картине многократного рассеяния и его дисперсионная природа**

В. В. Лизунов, В. Б. Молодкин, С. В. Лизунова, Н. Г. Толмачёв,  
Е. С. Скакунова, С. В. Дмитриев, Б. В. Шелудченко, С. М. Бровчук,  
Л. Н. Скапа, Р. В. Лехняк, Е. В. Фузик

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

В данной работе обсуждается открытое и количественно обоснованное авторами неизвестное ранее явление усиления на несколько порядков величины проявления дефектов в статистической картине многократного рассеяния. Установлена дисперсионная природа этого явления. Показано, что в отличие от случаев традиционно применяемой статистической кинематической теории (приближение однократного рассеяния), в которой дефекты проявляют своё влияние только на амплитуды рассеянных волн (амплитуды рассеяния), при многократном (динамическом) рассеянии дополнительно «включается» принципиально новый механизм влияния искажений не на амплитуды, а на волновые вектора рассеянных волн. Обнаруженный механизм оказался, во-первых, экспоненциально более существенным, т.к. дефекты влияют непосредственно на показатель экспоненты (на фазу волновой функции), и, во-вторых, характер этого влияния дефектов оказался управляемым условиями дифракции (длина волны, толщина объекта, геометрия и углы дифракции и др.). В результате открытое явление и его дисперсионная природа позволили авторам статьи существенно расширить функциональные возможности диагностики и создать целый ряд методов нового поколения. Они не только на несколько порядков величины повысили чувствительность, но и позволили решить проблему однозначной диагностики многопараметрических систем путём комбинирования измерений картины многократного рассеяния в различных условиях дифракции.

В даній роботі обговорюється відкрите та кількісно обґрунтоване авторами невідоме раніше явище підсилення на кілька порядків величини прояву дефектів у статистичній картині багаторазового розсіяння. Встановлено дисперсійну природу цього явища. Показано, що на відміну від випадків

традиційно застосовної статистичної кінематичної теорії (наближення одноразового розсіяння), в якій дефекти виявляють свій вплив лише на амплітуди розсіяних хвиль (амплітуди розсіяння), при багаторазовому (динамічному) розсіянні додатково «вмикається» принципово новий механізм впливу спотворень не на амплітуди, а на хвильові вектори розсіяних хвиль. Виявлений механізм є, по-перше, експоненційно більш істотним, оскільки дефекти впливають безпосередньо на показник експоненти (на фазу хвильової функції), і, по-друге, характер цього впливу дефектів виявився керованим умовами дифракції (довжина хвилі, товщина об'єкту, геометрія і кути дифракції та ін.). В результаті відкритого явища та його дисперсійна природа уможливили авторам статті істотно розширити функціональні можливості діагностики і створити цілу низку методів нового покоління, які не лише на кілька порядків величини підвищили чутливість, але й уможливили розв'язати проблему однозначної діагностики багатопараметричних систем шляхом комбінування вимірювань картини багаторазового розсіяння за різних умов дифракції.

The phenomenon of intensification (by several orders of magnitude) of defects' manifestation in statistical multiple-scattering pattern is discovered, quantitatively substantiated and discussed. Dispersive nature of this phenomenon is established. As shown, there is a new mechanism of influence of distortions on the wave vectors of scattered waves rather than on amplitudes in case of multiple (dynamical) scattering (as opposed to traditionally used kinematical theory, i.e. within the approximation of single scattering). Firstly, this mechanism is exponentially more essential because of defects' influences on the power exponent directly (i.e. on the wave-function phase), and, secondly, the character of such defect influence is controllable by diffraction conditions (wavelength, object thickness, geometry and angles of diffraction, etc.). As a result, discovered phenomenon and its dispersive nature allow authors to extend essentially functional capabilities of diagnostics and devise a set of new methods, which increase sensitivity of diagnostics and solve the problem of unambiguous diagnostics of multiparameter systems, using the combination of multiple-scattering-pattern measurements in different diffraction cases.

**Ключевые слова:** динамическая дифракция, дисперсионный механизм, микродефекты.

*(Получено 4 июня 2014 г.)*

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В отличие от классической кристаллографии [1–4], которая изучает параметры только идеально периодических кристаллических решеток, кристаллография на диффузном рассеянии [5] изучает отклонения от периодичности, обуславливающие это диффузное рассеяние. Она количественно устанавливает без разрушений характеристики дефектов и параметры искусственно созданных нанотехнологиями сверхструктур, которые и определяют основные физи-

ческие свойства разрабатываемых материалов.

Как показано авторами в самое последнее время в работах [6–9], именно эффекты многократности диффузного и брэгговского рассеяния как рентгеновских лучей, так и нейтронов и других частиц обеспечили возможность повышения на несколько порядков величины чувствительности картины к характеристикам дефектов и появление зависимости от условий дифракции этой чувствительности и самого характера влияния дефектов на картину динамического рассеяния и, следовательно, возможность экспериментальной реализации впервые многопараметрической и при этом существенно более высокочувствительной диагностики.

Как следует из анализа результатов работ по созданию основ динамической многопараметрической кристаллографии [1–35], динамическая теория рассеяния излучений в монокристаллах с однородно распределенными дефектами различного типа предсказывает и описывает достаточно большое количество разнообразных эффектов многократности брэгговского и диффузного рассеяния и механизмов их проявления, которые принципиально отсутствуют при кинематическом рассеянии. К числу таких эффектов могут быть отнесены эффекты экстинкции и аномального прохождения как для брэгговской, так и для диффузной составляющих, обусловленные их интерференционным (стоячим) характером, и эффекты их структурной чувствительности, которые получили количественное описание [10–16], эффект экстинкции за счет диффузного рассеяния на отклонениях от периодичности кристаллов [10], эффект зависящего от условий дифракции аномального роста вклада диффузной составляющей, к примеру, с увеличением толщины кристалла [15, 16], а также описанные в [6–9, 15, 16, 19–21] эффекты появления чувствительности к искажениям интегральной интенсивности и зависимости вклада диффузной составляющей от условий дифракции при переходе от кинематического к динамическому случаю и др. Все эти эффекты и механизмы их проявления устанавливались в разное время и использовались для диагностики на протяжении последних вот уже почти 50 лет. Однако только в последние 2–3 года стала проясняться главная их общая особенность, т.е. их физическая природа, которая позволила радикально изменить облик современной кристаллографии.

Настоящая работа посвящена установлению дисперсионной природы уникальной чувствительности и информативности динамической дифрактометрии несовершенств структуры кристаллов.

## **2. ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ В КРИСТАЛЛАХ С ДЕФЕКТАМИ**

С целью получения в рамках динамического рассмотрения выра-

жений для когерентной и диффузной составляющих дифференциальной отражательной способности необходимо вначале определить исходные выражения для амплитуд брэгговского и диффузного волновых полей индукции в кристалле, которые создаются при падении из вакуума на кристалл плоской гармонической волны  $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r} + i\omega t/c}$ , где  $\mathbf{r}$  — пространственная координата,  $t$  — время,  $\omega$  и  $c$  — соответственно частота и скорость света,  $\mathbf{E}_0$  — амплитуда падающей волны. Такие амплитуды можно найти, решая волновое уравнение:

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

которое можно получить из системы уравнений Максвелла. Здесь  $\mathbf{D}(\mathbf{r})$  — индукция волны,  $K = 2\pi/\lambda$ ,  $\lambda$  — длина волны излучения,  $\chi(\mathbf{r})$  — восприимчивость кристалла, умноженная на  $4\pi$ .

В отличие от восприимчивости идеального кристалла, являющейся периодической функцией пространственной координаты, которую можно разложить в ряд Фурье, в кристалле с дефектами  $\chi(\mathbf{r})$  не будет периодической, но ее можно представить в виде интеграла Фурье:

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

где  $\mathbf{G}$  — вектор обратной решетки, соответствующий периодической «в среднем» составляющей восприимчивости кристалла, умноженный на  $2\pi$ ,  $\mathbf{q}$  — переданный импульс за счет рассеяния на искажениях, вызванных дефектами,  $v_c$  — объем элементарной ячейки кристалла.

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

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

и подставляя (2) и (3) в уравнение (1), для амплитуд волн получим следующую бесконечную систему уравнений [25]:

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

Переходя к важному с точки зрения практического применения двухволновому случаю динамической дифракции, в рамках развитой в [10–18] теории возмущений (ТВ) можно получить две связанные системы уравнений: одну для сильных брэгговских волн с волновыми векторами  $\mathbf{K}_0$  и  $\mathbf{K}_{\mathbf{H}} = \mathbf{K}_0 + \mathbf{H}$  ( $\mathbf{H}$  — вектор обратной решетки)

$$\begin{cases} (-2\varepsilon_0 + \chi_0) D_0 + CE\chi_{-H}D_H = -\sum_q (\delta\chi_q D_{-q} + C\delta\chi_{-H+q}D_{H-q}), \\ CE\chi_H D_0 + (-2\varepsilon_H + \chi_0)D_H = -\sum_q (C\delta\chi_{H+q}D_{-q} + \delta\chi_q D_{H-q}), \end{cases} \quad (5)$$

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

$$\begin{cases} (-2\varepsilon_{0q} + \chi_0)D_q + CE\chi_{-H}D_{H+q} = -(\delta\chi_q D_0 + C\delta\chi_{-H+q}D_H) - \\ \quad - \sum_{q' \neq q} (\delta\chi_{q'} D_{q-q'} + C\delta\chi_{-H+q'}D_{H+q-q'}), \\ CE\chi_H D_q + (-2\varepsilon_{Hq} + \chi_0)D_{H+q} = -(C\delta\chi_{H+q}D_0 + \delta\chi_q D_H) - \\ \quad - \sum_{q' \neq q} (C\delta\chi_{H+q'}D_{q-q'} + \delta\chi_{q'}D_{H+q-q'}), \end{cases} \quad (6)$$

где ошибки возбуждения определены как

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 &= \frac{K_0 - K}{K} \approx \frac{K_0^2 - K^2}{2K^2}, \quad \varepsilon_H = \frac{K_H - K}{K} \approx \frac{K_H^2 - K^2}{2K^2}, \\ \varepsilon_{0q} &= \frac{K_{0q} - K}{K} \approx \frac{K_{0q}^2 - K^2}{2K^2}, \quad \varepsilon_{Hq} = \frac{K_{Hq} - K}{K} \approx \frac{K_{Hq}^2 - K^2}{2K^2}. \end{aligned}$$

Компоненты Фурье флуктуационной части восприимчивости кристалла задаются выражением:

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

где

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

$E = e^{-L_H}$  — фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера,  $\chi_0, \chi_{\pm H}$  — Фурье-компоненты восприимчивости кристалла,  $C$  — поляризационный множитель ( $C = 1$  для  $\sigma$ -поляризации,  $C = \cos 2\theta_B$  для  $\pi$ -поляризации, где  $\theta_B$  — угол Брэгга). Выражение (7), определяющее Фурье-компонент восприимчивости кристалла с дефектами  $\chi_{G+q}$ , который рассматривается как сумма Фурье-компонентов средней восприимчивости  $\chi_G e^{-L_G} \delta_{0,q}$  и флуктуационной части восприимчивости  $\delta\chi_{G+q}$ , позволяет при решении неоднородных систем (5) и (6) воспользоваться методом модифицированной ТВ [11, 12]. При значении фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера  $E = 1$ , т.е. при отсутствии дефектов и, следовательно, при  $\delta\chi = 0$ , правые части систем (5) и (6) обнуляются, и они сводятся к системе, известной для случая идеальных кристаллов. В случае кристаллов с дефектами, подставляя решения системы уравнений (6) в (5) и используя метод модифицированной

теории возмущений, получим следующую основную систему уравнений для сильных брэгговских волн во втором приближении ТВ:

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

Тут дисперсионные поправки к восприимчивости, обусловленные учетом процессов двукратного рассеяния на полях смещений атомов от дефектов, определяются выражениями [10–18]:

$$\begin{aligned} \Delta\chi_{00} &= -\sum_{\mathbf{q}} (-2\varepsilon_{0\mathbf{q}} + \chi_0) V_{00}(\mathbf{q})/d(\mathbf{q}), \\ \Delta\chi_{HH} &= -\sum_{\mathbf{q}} (-2\varepsilon_{H\mathbf{q}} + \chi_0) V_{HH}(\mathbf{q})/d(\mathbf{q}), \\ \Delta\chi_{0H} &= C \sum_{\mathbf{q}} \chi_{-H} V_{0H}(\mathbf{q})/d(\mathbf{q}), \\ \Delta\chi_{H0} &= C \sum_{\mathbf{q}} \chi_H V_{H0}(\mathbf{q})/d(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (9)$$

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

В обобщенном виде для (9) будем иметь:

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

где

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

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

а  $\delta\chi_{-\mathbf{q}-\mathbf{H}+2\mathbf{G}}$ ,  $\delta\chi_{\mathbf{q}+\mathbf{H}-2\mathbf{G}}$  — Фурье-компоненты флуктуационной части восприимчивости.

В работах [6–32] на основе решения систем (5)–(11) получены аналитические формулы, связывающие характеристики дефектов произвольных типов с наблюдаемыми параметрами картины многократного рассеяния с учетом инструментальных факторов в случаях различных методик (интегральных, дифференциально-интегральных и дифференциальных). Результаты этих работ обобщены в монографиях [34, 35] и составляют теоретические основы современной динамической дифрактометрии несовершенств кристаллов. Однако их эффективное использование сдерживается из-за отсутствия ответа на вопрос: «Какие преимущества динамической дифрактометрии и в чем их физическая природа?».

### 3. ДИСПЕРСИОННЫЙ МЕХАНИЗМ ВЛИЯНИЯ ДЕФЕКТОВ НА КАРТИНУ МНОГОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ

Для выяснения природы принципиальных отличий диагностических возможностей динамической и кинематической картин рассеяния следует отметить, что при кинематическом рассмотрении в нулевом приближении ТВ остается отличной от нуля только одна амплитуда  $D_0$ . При этом системы уравнений (5), (6) и (8) преобразуются в формулы (12), (13) для неизвестных амплитуд волн, появляющихся в первом порядке ТВ и выражающихся через известную амплитуду  $D_0$ :

$$(K_H^2 - K^2)D'_H = \chi_H D_0, \quad (12)$$

$$(K_{H+q}^2 - K^2)D'_{H+q} = \chi_{H+q} D_0. \quad (13)$$

Здесь, как видно, амплитуды рассеянных брэгговских  $D'_H$  и диффузных  $D'_{H+q}$  волн определяются матричными элементами соответственно от периодической «в среднем» ( $\chi_H$ ) и флуктуационной ( $\chi_{H+q}$ ) частей восприимчивости кристалла, взятыми между начальным ( $D_0$ ) и конечными (соответственно  $D'_H$  и  $D'_{H+q}$ ) состояниями.

Именно таким образом и реализуется амплитудный механизм влияния несовершенств структуры на кинематическую картину рассеяния. По характеру этого влияния выполнена М. А. Кривоглазов [5] качественная и количественная классификация дефектов, используемая сегодня в большинстве лабораторий мира как теоретическая основа структурной диагностики.

Однако, при динамическом рассмотрении формулы (12) и (13) заменяются системами уравнений (5), (6) и (8). Эти системы вместе с условиями их разрешимости (новый закон дисперсии) и граничными условиями обеспечивают и описывают, как показывает их анализ, новый механизм влияния несовершенств структуры на картину многократного рассеяния. А именно, влияние дефектов оказывается возможным не только на амплитуду рассеяния (амплитудный механизм), а и непосредственно на волновые вектора рассеянных волн через закон дисперсии (дисперсионный механизм). При этом влияние дефектов становится экспоненциально усиленным и управляемым целенаправленным изменением условий дифракции, т.к. влияния дефектов и условий дифракции переплетаются в фазе волны и становятся взаимосвязанными. В результате обнаруживается уникальная чувствительность к характеристикам дефектов оказавшихся существенно усиленными дисперсионным механизмом зависимостей от условий дифракции картин многократного рассеяния. Это и обеспечивает радикальную перестройку диагностических возможностей при использовании динамической дифракции.

#### 4. ИНТЕГРАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ КОМБИНИРОВАННОЙ ДИФФУЗНО-ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ

Наиболее чувствительными и экспрессными являются принципиально новые методы полной интегральной интенсивности (ПИИ) динамической дифракции.

Ниже выполнен сравнительный анализ чувствительности ПИИ к дефектам в кинематической и динамической теориях.

В кинематической теории ПИИ ( $R_i$ ) рассеяния имеет вид:

$$R_i = R_{iB} + R_{iD}, \quad R_{iB} = R_{ip} e^{-2L}, \quad R_{iD} = R_{ip} (1 - e^{-2L}),$$

откуда следуют два закона сохранения кинематической теории:

1)  $R_i = R_{iB} + R_{iD} = R_{ip}$  (независимость ПИИ от характеристик дефектов);

2)  $R_{iD}/R_{iB} = (1 - e^{-2L})/e^{-2L} \approx 2L$  (независимость от условий дифракции вклада диффузной составляющей ПИИ).

Тут  $R_{ip} = C^2 Q t / \gamma_0$ ,  $Q = (\pi |\chi_{Hr}|)^2 / [\lambda \sin(2\theta_B)]$ .

В динамической теории рассеяния ПИИ для геометрии Лауэ, приближение тонкого кристалла ( $\mu_0 l \leq 1$ ,  $l = t/\gamma_0$ ) имеет вид:

$$R_i = R_{iB} + R_{iD} = \exp(-\mu_0 l) R_{ip} [(Cl)^{-1} EI_0 (\mu_H l C E) \exp(-\mu_{0ds} l) + (1 - E^2) \exp(-\mu^* l)],$$

где  $\mu_{0ds}$  — коэффициент экстинкции из-за дефектов когерентного компонента ПИИ,  $\mu^*$  — коэффициент экстинкции из-за дефектов диффузного компонента ПИИ.

Оба закона сохранения кинематической теории, как следует из приведенных выражений, нарушаются при переходе к динамической дифракции. Таким образом, в случае наиболее простой и экспрессной интегральной дифрактометрии, в дополнение к установленному ранее сотрудниками ИМФ НАН Украины закону сохранения (т.е. независимости от характеристик искажений кристаллов) первого параметра кинематической теории интегральных интенсивностей, а именно, полной (брэгговской и диффузной) интегральной интенсивности рассеяния, обнаружен также еще и второй закон сохранения (т.е. независимость от условий дифракции) второго параметра кинематической теории интегральных интенсивностей, а именно, вклада диффузной составляющей в полную интегральную интенсивность. Показано, что эти законы оказываются справедливыми в случае кинематического рассеяния и существенно ограничивают чувствительность и информативность кинематической картины рассеяния. Однако установлено, что обнаруженный дисперсионный механизм влияния дефектов на картину многократного рассеяния приводит к нарушению второго и вслед за ним и первого за-



**ТАБЛИЦА 1.** Характеристики (радиусы  $R$ , высоты  $h$  и концентрации  $c$ ) дефектов, определенные при комбинированной обработке экспериментальных данных, полученных в разных условиях динамической дифракции совместно для толщинных и деформационных зависимостей ПИИ (комбинированная обработка).

Большие петли		Кластеры		Средние петли		Малые петли	
$R$ , мкм	$c \cdot 10^{-3}$ , см <sup>-3</sup>	$R$ , мкм $h$ , мкм	$c \cdot 10^{-7}$ , см <sup>-3</sup>	$R$ , мкм	$c \cdot 10^{-6}$ , см <sup>-3</sup>	$R$ , мкм	$c \cdot 10^{-11}$ , см <sup>-3</sup>
$8 \pm 0,8$	$5 \pm 1$	$0,45 \pm 0,01$ $0,012 \pm 0,01$	$1,12 \pm 0,01$	$0,84 \pm 0,01$	$8,4 \pm 1$	$0,035 \pm 0,001$	$2 \pm 0,1$

конов сохранения при переходе к случаям многократного рассеяния и обеспечивает этим уникальные показатели чувствительности и информативности диагностики на основе измерений полной интегральной интенсивности динамической дифракции и ее диффузной составляющей, а также их зависимостей от дифракционных условий.

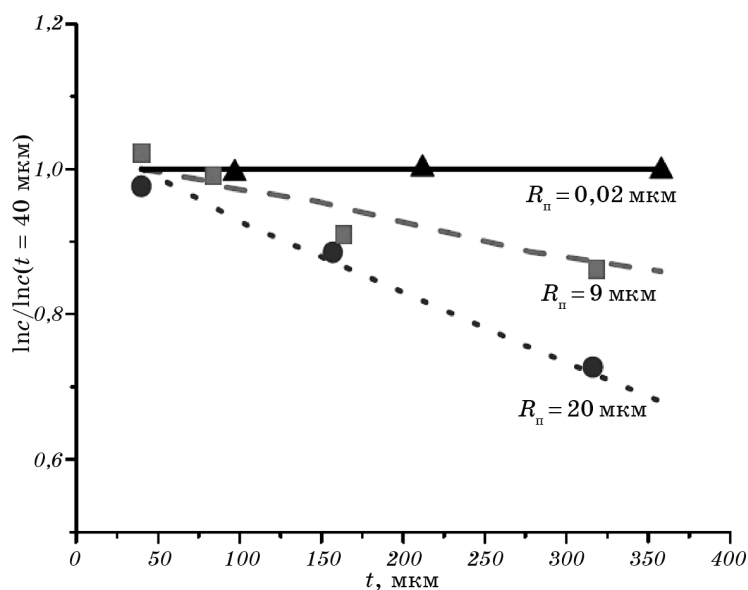
Ниже в качестве примеров представлены результаты экспериментальной апробации многопараметрической диффузно-динамической комбинированной дифрактометрии кристаллов с несколькими типами дефектов.

В таблице 1 представлены результаты комбинированной обработки экспериментальных толщинных и деформационных зависимостей ПИИ, полученных в различных условиях динамической дифракции для кристалла кремния, содержащего дефекты четырех типов. Однозначно и с достаточной точностью были определены параметры всех четырех типов дефектов, одновременно присутствующих в исследуемом образце, что существенно повышает информативность метода интегральной диффузно-динамической комбинированной дифрактометрии, в том числе, по сравнению с другими динамическими подходами. Этими результатами продемонстрированы возможности диагностики рекордно низких концентраций дефектов четырех типов.

В таблице 2 представлены результаты применения метода ПИИ динамической дифракции монокристаллов с нарушенным поверхностным слоем. Таким образом, впервые без разрушения определены параметры нарушенных поверхностных слоев кристаллов кремния для различных видов технологической обработки. Кроме того, получены профили неоднородных распределений дефектов нескольких типов, соответственно толщины и размеры которых могут превышать длину экстинкции. Результаты диагностики представлены на рис. 1.

**ТАБЛИЦА 2.** Параметры толщин сильно нарушенного ( $t_{am}$ ) и кинематически рассеивающего ( $t_{ksl}$ ) слоев для обработанных различным способом поверхностей монокристалла Si. Результаты получены путем обработки методом наименьших квадратов величин ПИИ динамической дифракции для отражений 004  $MoK_{\alpha}$  и 004  $FeK_{\alpha}$ .

Вид технологической обработки	$t_{am}$ , МКМ	$t_{ksl}$ , МКМ
Резка	6,8	8,88
Шлифовка	10,08	8,52
Химическое селективное травление	0	0,32
Полировка химико-механическая	1,05	1,02



**Рис. 1.** Профили распределения по глубине дислокационных петель в объеме исходного (пунктирная линия) облученного электронами с энергией 18 МэВ при дозах облучения 1,8 кГрэй (штриховая линия) и 3,6 кГрэй (сплошная линия) кристалла кремния толщиной  $t = 4000$  мкм, маркеры — эксперимент.

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Авторами открыто имеющее революционное значение для развития принципиально новых функциональных возможностей диагностики явление и установлена его дисперсионная природа. А именно, открыто явление колоссального усиления проявления дефектов в

картине многократного рассеяния, которое управляется условиями дифракции селективно для каждого типа дефектов и наблюдается как уникально структурно чувствительные зависимости от условий дифракции картины рассеяния. Открытое явление и его дисперсионная природа обеспечивают принципиально разный характер влияния дефектов на кинематическую и динамическую картины рассеяния, по которому именно и выполняется диагностика дефектов, и поэтому позволили основать качественно новое поколение диагностики с их использованием.

На основе использования открытого явления и детально аналитически описанного дисперсионного механизма влияния дефектов на динамическую картину и при учете установленных нелинейных эффектов взаимного влияния обоих указанных механизмов при многократности рассеяния созданы теоретические и экспериментальные основы и закреплены патентами целый ряд принципиально новых уникально чувствительных и информативных методов. Они обеспечивают повышение в десятки тысяч раз чувствительность структурной диагностики и возможность характеристики сложных многопараметрических систем, не имеющих аналогов в мире, примеры которых были приведены в статье.

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. M. Von Laue, *Röntgenstrahl-Interferenzen* (Leipzig: Akademische Verlagsgesellschaft: 1948).
2. C. Hammond, *The Basics of Crystallography and Diffraction* (London: Oxford University Press: 2001).
3. R. W. James, *Solid State Physics*, **15**: 55 (1963).
4. B. W. Batterman and H. Cole, *Rev. Mod. Phys.*, **36**: 681 (1964).
5. M. A. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin: Springer: 1996).
6. V. B. Molodkin, M. V. Kovalchuk, A. P. Shpak, S. I. Olikhovskii, Ye. M. Kyslovskyy, A. I. Nizkova, E. G. Len, T. P. Vladimirova, E. S. Skakunova, V. V. Molodkin, G. E. Ice, R. I. Barabash, and I. M. Karnaukhov, *Diffuse Scattering and the Fundamental Properties of Materials* (Eds. R. I. Barabash, G. E. Ice, and P. E. A. Turchi) (New Jersey: Momentum Press: 2009), p. 391.
7. А. П. Шпак, М. В. Ковальчук, В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, И. В. Гинько, С. И. Олиховский, Е. Н. Кисловский, Е. Г. Лень, А. А. Белоцкая, Е. В. Первак, В. В. Молодкин, *Способ многопараметрической структурной диагностики монокристаллов с несколькими типами дефектов*, Патент Украины № 36075 (Опубл. 10 октября 2008 г.).
8. А. П. Шпак, М. В. Ковальчук, В. Б. Молодкин, В. Л. Носик, В. Ю. Сторижко, Л. А. Булавин, И. М. Карнаухов, Р. И. Барабаш, Дж. Е. Айс, А. И. Низкова, И. В. Гинько, С. И. Олиховский, Е. Н. Кисловский, В. А. Татаренко, Е. Г. Лень, А. А. Белоцкая, Е. В. Первак, В. В. Молодкин, *Способ многопараметрической структурной диагностики монокристаллов с несколькими типами дефектов*, Патент Украины № 89594 (Опубл. 10 февраля 2010 г.).

9. V. B. Molodkin, A. P. Shpak, M. V. Kovalchuk, V. F. Machulin, and V. L. Nosik, *Physics–Uspekhi*, **54**: 661 (2011).
10. В. Б. Молодкин, Е. А. Тихонова, *Физ. мет. металловед.*, **24**, № 3: 385 (1967).
11. В. Б. Молодкин, *Металлофизика*, **2**, № 1: 3 (1980).
12. V. B. Molodkin, *Phys. Metals*, **3**: 615 (1981).
13. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, and M. E. Osinovskii, *Phys. Metals*, **5**: 1 (1984).
14. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, and M. E. Osinovskii, *Phys. Metals*, **5**: 847 (1985).
15. V. V. Kochelab, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, and M. E. Osinovskii, *phys. status solidi (a)*, **108**, No. 1: 67 (1988).
16. Л. И. Даценко, В. Б. Молодкин, М. Е. Осиновский, *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами* (Киев: Наукова думка: 1988).
17. 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).
18. 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).
19. A. P. Shpak, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, Ye. M. Kyslovskyy, O. V. Reshetnyk, T. P. Vladimirova, E. G. Len, A. I. Nizkova, V. M. Venger, and S. V. Dmitriev, *phys. status solidi (a)*, **204**, No. 8: 2651 (2007).
20. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii et al., *phys. status solidi (a)*, **204**, No. 8: 2606 (2007).
21. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, M. E. Osinovskii et al., *phys. status solidi (a)*, **87**, No. 2: 597 (1985).
22. J. E. Thomas, T. O. Baldwin, and P. H. Dederichs, *Phys. Rev. B*, **3**: 1167 (1971).
23. W. L. Bond, *Acta Crystallogr.*, **13**: 814 (1960).
24. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. G. Len, E. N. Kislovskii, V. P. Kladko, O. V. Reshetnyk, T. P. Vladimirova, and B. V. Sheludchenko, *phys. status solidi (a)*, **206**, No. 8: 1761 (2009).
25. Е. А. Тихонова, *Физика твёрдого тела*, **9**, № 2: 516 (1967).
26. P. H. Dederichs, *Phys. Rev. B*, **1**, No. 4: 1306 (1970).
27. V. V. Nemoshkalenko, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii et al., *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A*, **308**, No. 1: 294 (1991).
28. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii et al., *Phys. Rev. B*, **78**: 224109 (2008).
29. В. А. Бушуев, *Кристаллография*, **39**, № 6: 983 (1994).
30. K. M. Pavlov and V. I. Punegov, *Acta Crystallogr. A*, **56**, Iss. 3: 227 (2000).
31. V. Holy and K. T. Gabrielyan, *phys. status solidi (b)*, **140**: 39 (1987).
32. А. М. Поляков, Ф. Н. Чуховский, Д. И. Пискунов, *ЖЭТФ*, **99**, № 2: 589 (1991).
33. N. Kato, *Acta Crystallogr. A*, **36**, Iss. 5: 763 (1980).
34. В. Б. Молодкин, М. В. Ковальчук, И. М. Карнаузов и др., *Основы динамической высокоразрешающей дифрактометрии функциональных материалов* (Нальчик: Кабардино-Балкарский университет: 2013).
35. В. Б. Молодкин, М. В. Ковальчук, И. М. Карнаузов и др., *Основы интегральной многопараметрической диффузно-динамической дифрактометрии* (Нальчик: Кабардино-Балкарский университет: 2013).

## REFERENCES

1. M. Von Laue, *Röntgenstrahl-Interferenzen* (Leipzig: Akademische Verlagsgesellschaft: 1948).

2. C. Hammond, *The Basics of Crystallography and Diffraction* (London: Oxford University Press: 2001).
3. R. W. James, *Solid State Physics*, **15**: 55 (1963).
4. B. W. Batterman and H. Cole, *Rev. Mod. Phys.*, **36**: 681 (1964).
5. M. A. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin: Springer: 1996).
6. V. B. Molodkin, M. V. Kovalchuk, A. P. Shpak, S. I. Olikhovskii, Ye. M. Kyslovskyy, A. I. Nizkova, E. G. Len, T. P. Vladimirova, E. S. Skakunova, V. V. Molodkin, G. E. Ice, R. I. Barabash, and I. M. Karnaukhov, *Diffuse Scattering and the Fundamental Properties of Materials* (Eds. R. I. Barabash, G. E. Ice, and P. E. A. Turchi) (New Jersey: Momentum Press: 2009), p. 391.
7. A. P. Shpak, M. V. Koval'chuk, V. B. Molodkin, A. I. Nizkova, I. V. Gin'ko, S. I. Olikhovskii, E. M. Kislovskii, E. G. Len, A. O. Bilotska, K. V. Pervak, and V. V. Molodkin, *Sposob Mnogoparametricheskoy Strukturnoy Diagnostiki Monokristallov s Neskol'kimi Tipami Defektov*, Patent of Ukraine No. 36075 (Publ. 10 October 2008) (in Ukrainian).
8. A. P. Shpak, M. V. Koval'chuk, V. B. Molodkin, V. L. Nosik, V. Yu. Storizhko, L. A. Bulavin, I. M. Karnaukhov, R. I. Barabash, G. E. Ice, A. I. Nizkova, I. V. Gin'ko, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, V. A. Tatarenko, E. G. Len, A. O. Bilotska, K. V. Pervak, and V. V. Molodkin, *Sposob Mnogoparametricheskoy Strukturnoy Diagnostiki Monokristallov s Neskol'kimi Tipami Defektov*, Patent of Ukraine No. 89594 (Publ. 10 February 2010) (in Ukrainian).
9. V. B. Molodkin, A. P. Shpak, M. V. Kovalchuk, V. F. Machulin, and V. L. Nosik, *Physics–Uspekhi*, **54**: 661 (2011).
10. V. B. Molodkin and E. A. Tikhonova, *Fiz. Met. Metalloved.*, **24**, No. 3: 385 (1967) (in Russian).
11. V. B. Molodkin, *Metallofizika*, **2**, No. 1: 3 (1980) (in Russian).
12. V. B. Molodkin, *Phys. Metals*, **3**: 615 (1981).
13. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, and M. E. Osinovskii, *Phys. Metals*, **5**: 1 (1984).
14. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, and M. E. Osinovskii, *Phys. Metals*, **5**: 847 (1985).
15. V. V. Kochelab, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, and M. E. Osinovskii, *phys. status solidi (a)*, **108**, No. 1: 67 (1988).
16. L. I. Datsenko, V. B. Molodkin, and M. E. Osinovskiy, *Dinamicheskoe Rasseyanie Rentgenovskikh Luchey Real'nyimi Kristallami* (Kiev: Naukova Dumka: 1988) (in Russian).
17. 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).
18. 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).
19. A. P. Shpak, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, Ye. M. Kyslovskyy, O. V. Reshetnyk, T. P. Vladimirova, E. G. Len, A. I. Nizkova, V. M. Venger, and S. V. Dmitriev, *phys. status solidi (a)*, **204**, No. 8: 2651 (2007).
20. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii et al., *phys. status solidi (a)*, **204**, No. 8: 2606 (2007).
21. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, M. E. Osinovskii et al., *phys. status solidi (a)*,

- 87, No. 2 : 597 (1985).
22. J. E. Thomas, T. O. Baldwin, and P. H. Dederichs, *Phys. Rev. B*, **3**: 1167 (1971).
  23. W. L. Bond, *Acta Crystallogr.*, **13**: 814 (1960).
  24. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. G. Len, E. N. Kislovskii, V. P. Kladko, O. V. Reshetnyk, T. P. Vladimirova, and B. V. Sheludchenko, *phys. status solidi (a)*, **206**, No. 8: 1761 (2009).
  25. E. A. Tikhonova, *Fizika Tverdogo Tela*, **9**, No. 2: 516 (1967) (in Russian).
  26. P. H. Dederichs, *Phys. Rev. B*, **1**, No. 4: 1306 (1970).
  27. V. V. Nemoshkalenko, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii et al., *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A*, **308**, No. 1: 294 (1991).
  28. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii et al., *Phys. Rev. B*, **78**: 224109 (2008).
  29. V. A. Bushuev, *Kristallografiya*, **39**, No. 6: 983 (1994) (in Russian).
  30. K. M. Pavlov and V. I. Punegov, *Acta Crystallogr. A*, **56**, Iss. 3: 227 (2000).
  31. V. Holy and K. T. Gabrielyan, *phys. status solidi (b)*, **140**: 39 (1987).
  32. A. M. Polyakov, F. N. Chukhovskiy, and D. I. Piskunov, *ZhETF*, **99**, No. 2: 589 (1991) (in Russian).
  33. N. Kato, *Acta Crystallogr. A*, **36**, Iss. 5: 763 (1980).
  34. V. B. Molodkin, M. V. Koval'chuk, I. M. Karnaukhov et al., *Osnovy Dinamicheskoy Vysokorazreshayushchey Difraktometrii Funktsional'nykh Materialov* (Nal'chik: Kabardino-Balkarskiy Universitet: 2013) (in Russian).
  35. V. B. Molodkin, M. V. Koval'chuk, I. M. Karnaukhov et al., *Osnovy Integral'noy Mnogoparametricheskoy Diffuzno-dinamicheskoy Difraktometrii* (Nal'chik: Kabardino-Balkarskiy Universitet: 2013) (in Russian).