Металлофиз. новейшие технол. / Metallofiz. Noveishie Tekhnol.
2017, т. 39, № 1, сс. 1–9 / DOI: 10.15407/mfint.39.01.0001
Оттиски доступны непосредственно от издателя

ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ И ЧАСТИЦ С КОНДЕНСИРОВАННЫМ ВЕЩЕСТВОМ

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

Ефекти повної багатократності дифузного розсіяння в кристалах з дефектами другого класу за Кривоглазом

С. В. Дмітрієв, В. Б. Молодкін, М. Г. Толмачов, О. С. Скакунова, С. В. Лізунова, Р. В. Лехняк, К. В. Фузік, Г. О. Веліховський, О. П. Васькевич, В. В. Лізунов, А. А. Катасонов, І. Е. Голентус, С. Й. Оліховський, Л. М. Скапа, В. В. Молодкін

Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,
бульв. Акад. Вернадського, 36,
03142 Київ, Україна

Створено теоретичну модель динамічної дифракції рентґенівських променів у кристалах з дефектами довільних типів, що вперше враховує ефекти повної (а не лише другого порядку теорії збурень) багатократності розсіяння дифузних і когерентних хвиль на флуктуаційній частині кристалічного потенціалу. Зокрема, одержано вирази для дисперсійних поправок до когерентного та дифузного хвильових полів, що враховують повну багатократність розсіяння, як на періодичній, так і на флуктуаційній частинах кристалічного потенціалу. Показано необхідність і достатність використання зазначених поправок у формулах для інтенсивности дифракції при діагностиці дефектів другого класу за М. О. Кривоглазом.

Ключові слова: динамічна дифракція, дифузне розсіяння, дисперсійний механізм, багатократність дифузного розсіяння, мікродефекти.

Corresponding author: Vadim Borisovich Molodkin
E-mail: v.molodkin@gmail.com

G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine

Please cite this article as: S. V. Dmitriev, V. B. Molodkin, M. G. Tolmachev, O. S. Skakunova, S. V. Lizunova, R. V. Lekhnyak, K. V. Fuzik, G. O. Velikhovskii, O. P. Vaskevich, V. V. Lizunov, A. A. Katasonov, I. E. Golentus, S. I. Olikhovskii, L. M. Skapa, and V. V. Molodkin, Effects of Total Multiplicity of Diffuse Scattering in Crystals Containing the Second-Class Defects According to Krivoglaz’s Classification, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **39**, No. 1: 1–9 (2017) (in Ukrainian), DOI: 10.15407/mfint.39.01.0001.

The theoretical model of dynamical diffraction of X-rays in crystals with defects of arbitrary types, which takes into account effects of total (not only by means of the second order of disturbance theory) multiplicity of diffuse and coherent waves' scattering by fluctuating part of intracrystalline potential, are constructed. Particularly, expressions for dispersion corrections for coherent and diffuse wave fields, which take into account a total multiplicity of scattering on periodic and fluctuating parts of intracrystalline potential, are obtained. Necessity and sufficiency of the use of mentioned corrections in formulas for diffraction intensity for diagnostics of the second-class defects within the M. O. Krivoglaz classification are shown.

Keywords: dynamical diffraction, diffuse scattering, dispersion mechanism, multiplicity of diffuse scattering, microdefects.

Создана теоретическая модель динамической дифракции рентгеновских лучей в кристаллах с дефектами произвольных типов, учитывающая впервые эффекты полной (а не только второго порядка теории возмущений) многократности рассеяния диффузных и когерентных волн на флуктуационной части кристаллического потенциала. В частности, получены выражения для дисперсионных поправок к когерентному и диффузному волновым полям, которые учитывают полную многократность рассеяния, как на периодической, так и на флуктуационной частях кристаллического потенциала. Показана необходимость и достаточность использования указанных поправок в формулах для интенсивности дифракции при диагностике дефектов второго класса по М. А. Кривоглазу.

Ключевые слова: динамическая дифракция, диффузное рассеяние, дисперсионный механизм, многократность диффузного рассеяния, микродефекты.

(Отримано 28 грудня 2016 р.)

1. ВСТУП

Важливою задачею сучасного матеріалознавства є встановлення взаємозв'язку між внутрішньою структурою матеріалів і їх властивостями. Тому задача діагностики структури матеріалів для виробів нанотехнологій є надзвичайно актуальною. Важливе місце серед матеріалів наноіндустрії займають кристалічні структури, ефективними методами діагностики структури яких є дифракційні методи, що ґрунтуються на розсіянні Рентґенових променів, теплових нейтронів і електронів. Дифракційні методи мають низку переваг, зокрема, вони є високоінформативними, експресними і неруйнівними.

Для діагностики дефектної структури монокристалічних матеріалів у роботах [1–9] побудовано динамічну теорію розсіяння для випадку монокристалів з дефектами, яка дозволила адекватно описати вплив одночасно присутніх дефектів багатьох типів, але лише першого класу за класифікацією М. О. Кривоглаза на динамічну картину розсіяння. Це дало можливість розробити фазоваріаційні принципи вирішення оберненої задачі розсіяння для таких багатопараметричних систем за рахунок вимірювань параметрів картини розсіяння при варіації умов дифракції. На цій основі створено цілу низку рентґенодифракційних методів багатопараметричної з підвищеною чутливістю та інформативністю діагностики дефектної структури в кристалах з декількома типами дефектів та, крім того, з додатково порушеним поверхневим шаром [6], а також в багатошарових [7] та пружно вигнутих [8] кристалах з дефектами.

Як встановлено в роботі [9], підвищення функціональних можливостей методів діагностики у вказаних випадках забезпечується дисперсійним механізмом впливу дефектів на картину розсіяння. На відміну від кінематичного підходу [10], в динамічному дефекти впливають не лише на амплітуду хвильової функції, а й на її хвильовий вектор, тобто фазу, що робить залежність вимірюваних експериментально параметрів картини розсіяння від характеристик дефектів експоненційно підсиленою. В результаті включення дисперсійного механізму також з'являється значний вплив умов експерименту на характер прояву дефектів в картині розсіяння, що дозволило не лише підвищити на порядки точність, а також і поліпшити надійність та інформативність діагностики дефектів за допомогою динамічної дифракції.

Вказані результати одержано для дефектів лише першого класу, а саме, для дефектів кулонівського типу. На практиці в монокристалічних матеріалах, особливо в металах, часто присутні дефекти другого класу, зокрема дислокації. Такі дефекти, з однієї сторони, формують важливі властивості монокристалів, а з іншої сторони, мають суттєві особливості впливу на дифракцію випромінення в таких кристалах. Останнє можна використати для діагностики дефектів другого класу за допомогою дифракційних методів.

Однак, на сьогоднішній день не існує адекватної теоретичної моделі, яка б описувала динамічну дифракцію в кристалах з дефектами другого класу. Подібна ситуація обумовлена тим, що для повільно спадаючих полів зміщень від дефектів другого класу несправедливі ті наближення (зокрема, наближення лише двократності дифузного розсіяння), завдяки яким було отримано точні розв'язки задачі дифракції в кристалах з дефектами першого класу. Таким чином, для розв'язання задачі діагностики дефектів другого класу необхідно створити принципово іншу модель, яка б враховувала ефекти повної багатократності дифузного розсіяння, тобто вийшла б за рамки наближення його двократності.

2. ОСНОВНІ РІВНЯННЯ ДЛЯ ВРАХУВАННЯ ЕФЕКТІВ ПОВНОЇ БАГАТОКРАТНОСТІ ДИФУЗНОГО РОЗСІЯННЯ

Розглянемо динамічне розсіяння рентґенівських хвиль монокристалом з дефектами. В цьому випадку, використовуючи теорію збурень для розв'язку основної системи динамічних рівнянь, на першому ітераційному кроці було отримано наступну систему рівнянь для дифузних амплітуд $D_{\mathbf{q}}$, $D_{\mathbf{H+q}}$ з хвильовими векторами $\mathbf{K}_0+\mathbf{q}$ і $\mathbf{K}_\mathbf{H}+\mathbf{q}$ [1–5]:

$$\begin{cases}(-2\varepsilon_{0\mathbf{q}}+\chi_0+\Delta\chi_{00}^{(1)})D_{\mathbf{q}}+(CE\chi_{-\mathbf{H}}+\Delta\chi_{0\mathbf{H}}^{(1)})D_{\mathbf{H+q}}=-(\delta\chi_{\mathbf{q}}D_0+C\delta\chi_{-\mathbf{H+q}}D_\mathbf{H})\\(CE\chi_\mathbf{H}+\Delta\chi_{\mathbf{H}0}^{(1)})D_{\mathbf{q}}+(-2\varepsilon_{\mathbf{Hq}}+\chi_0+\Delta\chi_{\mathbf{HH}}^{(1)})D_{\mathbf{H+q}}=-(C\delta\chi_{\mathbf{H+q}}D_0+\delta\chi_{\mathbf{q}}D_\mathbf{H}),\end{cases}\quad(1)$$

де дисперсійні поправки за рахунок дифузного розсіяння дифузних хвиль, тобто двократного розсіяння на флуктуаційній частині потенціалу (поляризовності) кристалу, визначаються виразами:

$$\Delta\chi_{\mathbf{GG}'}^{(1)}(\mathbf{q})=sC^2\sum_{\mathbf{q}'\neq\mathbf{q}}\frac{a_{\mathbf{GG}'}(\mathbf{q}-\mathbf{q}')}{d^{(0)}(\mathbf{q}-\mathbf{q}')}S_{\mathbf{GG}'}(\mathbf{q}').$$

Тут $s=-1$ при $\mathbf{G}'=\mathbf{G}$, $s=1$ при $\mathbf{G}'\neq\mathbf{G}$, $a_{\mathbf{GG}}(\mathbf{q})=-2\varepsilon_{\mathbf{Gq}}+\chi_0$ та $a_{\mathbf{GG}'}(\mathbf{q})=CE\chi_{\mathbf{G}'-\mathbf{G}}$ при $\mathbf{G}'\neq\mathbf{G}$, E — статичний фактор Дебая–Валлера, C — поляризаційний множник, $\varepsilon_{0\mathbf{q}}$, $\varepsilon_{\mathbf{Hq}}$ — помилки збудження, χ_0, $\chi_\mathbf{H}$ — Фур'є-компоненти періодичної «у середньому» складової поляризовності кристалу, $\delta\chi_{\mathbf{q}}$, $\delta\chi_{\mathbf{H+q}}$ — Фур'є–компоненти флуктуаційної складової поляризовності, $d^{(0)}=0$ — дисперсійне рівняння в нульовому наближенні. Кореляційна функція $S_{\mathbf{GG}'}(\mathbf{q})$ визначається усередненням за ансамблем (розподілу дефектів) квадратичних комбінацій Фур'є-компонент флуктуаційної частини поляризовності: $S_{\mathbf{GG}'}(\mathbf{q})=\langle\delta\chi_{\mathbf{q-H+2G}}\delta\chi_{\mathbf{-q+H-2G}'}\rangle$, де $\mathbf{G}$ і $\mathbf{G}'=0$ або $\mathbf{H}$.

Ітераційну процедуру було перервано шляхом нехтування при одержанні (1) більш як двократністю дифузного розсіяння. Однак таку процедуру можна продовжити та отримати дисперсійні поправки, що враховують процеси багатократного (вищих ніж другого) порядків дифузного розсіяння дифузних хвиль [5]:

$$\Delta\chi_{\mathbf{GG}'}^{(n)}(\mathbf{q})=sC^2\sum_{\mathbf{q}'\neq\mathbf{q}}\frac{a_{\mathbf{GG}'}(\mathbf{q}-\mathbf{q}')+\Delta\chi_{\mathbf{G}'\mathbf{G}}^{(n-1)}(\mathbf{q}-\mathbf{q}')}{d^{(n-1)}(\mathbf{q}-\mathbf{q}')}S_{\mathbf{GG}'}(\mathbf{q}'),\quad(2)$$

де $n=1, 2, \ldots$, $\Delta\chi_{\mathbf{GG}'}^{(0)}=0$ та

$$d^{(n)}(\mathbf{q})=\left[-2\varepsilon_{0\mathbf{q}}+\chi_0+\Delta\chi_{00}^{(n)}(\mathbf{q})\right]\left[-2\varepsilon_{\mathbf{Hq}}+\chi_0+\Delta\chi_{\mathbf{HH}}^{(n)}(\mathbf{q})\right]-\\-\left[CE\chi_{-\mathbf{H}}+\Delta\chi_{0\mathbf{H}}^{(n)}(\mathbf{q})\right]\left[CE\chi_{\mathbf{H}}+\Delta\chi_{\mathbf{H}0}^{(n)}(\mathbf{q})\right].$$

Спрямовуючи в (2) n до ∞ і переходячи від суми до інтегрування, можна отримати наступну систему інтегральних рівнянь, що враховують процеси багатократного дифузного розсіяння дифузних хвиль:

$$\Delta\chi'_{\mathbf{GG'}}(\mathbf{q}) = sC^2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int\limits_{\mathbf{q}\neq\mathbf{q}'} d\mathbf{q}' \frac{a_{\mathbf{GG'}}(\mathbf{q}-\mathbf{q}') + \Delta\chi'_{\mathbf{G'G}}(\mathbf{q}-\mathbf{q}')}{d(\mathbf{q}-\mathbf{q}')} S_{\mathbf{GG'}}(\mathbf{q}'), \qquad (3)$$

$$\begin{gathered} d(\mathbf{q}) = \left[-2\varepsilon_{0\mathbf{q}} + \chi_0 + \Delta\chi'_{00}(\mathbf{q})\right]\left[-2\varepsilon_{\mathbf{Hq}} + \chi_0 + \Delta\chi'_{\mathbf{HH}}(\mathbf{q})\right] - \\ - \left(CE\chi_{-\mathbf{H}} + \Delta\chi'_{0\mathbf{H}}(\mathbf{q})\right)\left(CE\chi_{\mathbf{H}} + \Delta\chi'_{\mathbf{H}0}(\mathbf{q})\right). \end{gathered} \qquad (4)$$

Враховуючи аналогічно довільний порядок ітераційної процедури для когерентних хвиль, можна отримати систему рівнянь для когерентних амплітуд:

$$\begin{cases} \left(-2\varepsilon_0 + \chi_0 + \Delta\chi_{00}\right) D_0 + \left(CE\chi_{-\mathbf{H}} + \Delta\chi_{0\mathbf{H}}\right) D_{\mathbf{H}} = 0, \\ \left(CE\chi_{\mathbf{H}} + \Delta\chi_{\mathbf{H}0}\right) D_0 + \left(-2\varepsilon_{\mathbf{H}} + \chi_0 + \Delta\chi_{\mathbf{HH}}\right) D_{\mathbf{H}} = 0, \end{cases} \qquad (5)$$

де дисперсійні поправки до когерентних хвиль за рахунок повного багатократного дифузного розсіяння визначаються виразом:

$$\Delta\chi_{\mathbf{GG'}} = sC^2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \frac{a_{\mathbf{GG'}}(\mathbf{q}) + \Delta\chi_{\mathbf{G'G}}(\mathbf{q})}{d(\mathbf{q})} S_{\mathbf{GG'}}(-\mathbf{q}). \qquad (6)$$

Для розв'язку інтегрального рівняння (3) перепишемо його в наступному вигляді:

$$\Delta\chi'_{\mathbf{GG'}}(\mathbf{q}) = f_{\mathbf{GG'}}(\mathbf{q}) + \alpha_0 \int d\mathbf{q}' \frac{\Delta\chi'_{\mathbf{G'G}}(\mathbf{q}') S_{\mathbf{GG'}}(\mathbf{q}-\mathbf{q}')}{d(\mathbf{q}')}, \qquad (7)$$

$$\alpha_0 = sC^2 \frac{V}{(2\pi)^3}, \quad f_{\mathbf{GG'}}(\mathbf{q}) = \alpha_0 \left(g_{\mathbf{GG'}}(\mathbf{q}) - \frac{\Delta\chi'_{\mathbf{G'G}}(0)}{d(0)} S_{\mathbf{GG'}}(\mathbf{q}) \right),$$

$$g_{\mathbf{GG'}}(\mathbf{q}) = \int\limits_{\mathbf{q}'\neq\mathbf{q}} d\mathbf{q}' \frac{a_{\mathbf{GG'}}(\mathbf{q}-\mathbf{q}') S_{\mathbf{GG'}}(\mathbf{q}')}{d(\mathbf{q}-\mathbf{q}')}, \qquad (8)$$

$$d(\mathbf{q}') = \left[-2\varepsilon_{0\mathbf{q}'} + \chi_0\right]\left[-2\varepsilon_{\mathbf{Hq}'} + \chi_0\right] - C^2E^2\chi_{-\mathbf{H}}\chi_{\mathbf{H}}. \qquad (9)$$

Резонансний знаменник (9) можна представити у вигляді:

$$d(\mathbf{q}') = -4b^{-1}\left(\varepsilon_{0\mathbf{q}'} - \varepsilon_{0D}^{\delta 1}\right)\left(\varepsilon_{0\mathbf{q}'} - \varepsilon_{0D}^{\delta 2}\right),$$

де $\varepsilon_{0D}^{\delta\tau}$ — розв'язки дисперсійного рівняння $d(\mathbf{q}) = 0$ для дифузних хвиль при певних $\Delta\theta$, $\Delta\theta'$. Таким чином, вираз (7) можна записати у вигляді:

$$\Delta\chi'_{\mathbf{GG'}}(\mathbf{q}) = f_{\mathbf{GG'}}(\mathbf{q}) + \frac{b\alpha_0}{4(\varepsilon_{0D}^{\delta 2} - \varepsilon_{0D}^{\delta 1})} \sum_{\tau} (-1)^{\tau} \int\limits_{V_{\mathbf{q}}} d\mathbf{q}' \frac{\Delta\chi'_{\mathbf{G'G}}(\mathbf{q}') S_{\mathbf{GG'}}(\mathbf{q}-\mathbf{q}')}{(\varepsilon_{0\mathbf{q}'} - \varepsilon_{0D}^{\delta\tau})}. \qquad (10)$$

Ввівши змінну інтегрування $K' = K + K\varepsilon_{0\mathbf{q}'}$ і враховуючи комплексний характер полюсів $\varepsilon_{0\mathbf{q}}^{\delta\tau}$, для (10) отримаємо:

$$\Delta\chi'_{\mathbf{GG}'}(\mathbf{q}) = f_{\mathbf{GG}'}(\mathbf{q}) + P_{\mathbf{GG}'}^{\delta\tau}(\mathbf{q}) + i\mu_{\mathbf{GG}'}^{\delta\tau}(\mathbf{q}), \tag{11}$$

$$P_{\mathbf{GG}'}^{\delta\tau}(\mathbf{q}) = \varepsilon\sum_{\tau}(-1)^{\tau}\int dS_{K'}\int dK' \frac{\Delta\chi'_{\mathbf{G}'\mathbf{G}}(\mathbf{q}')S_{\mathbf{GG}'}(\mathbf{q}-\mathbf{q}')(K'-K_r'^{(\delta\tau)})}{(K'-K_r'^{(\delta\tau)})^2 + K_i'^{(\delta\tau)2}}, \tag{12}$$

$$\mu_{\mathbf{GG}'}^{\delta\tau}(\mathbf{q}) = \varepsilon\sum_{\tau}(-1)^{\tau}\int dS_{K'}\int dK' \frac{\Delta\chi'_{\mathbf{G}'\mathbf{G}}(\mathbf{q}')S_{\mathbf{GG}'}(\mathbf{q}-\mathbf{q}')K_i'^{(\delta\tau)}}{(K'-K_r'^{(\delta\tau)})^2 + K_i'^{(\delta\tau)2}}, \tag{13}$$

$$K_r'^{(\delta\tau)} = K + K\,\mathrm{Re}(\varepsilon_{0D}^{\delta\tau}), \quad K_i'^{(\delta\tau)} = K\,\mathrm{Im}(\varepsilon_{0D}^{\delta\tau}), \quad \varepsilon = \frac{Kb\alpha_0}{4(\varepsilon_{0D}^{\delta 2} - \varepsilon_{0D}^{\delta 1})}.$$

Враховуючи справедливість наближення $K_i'^{(\delta\tau)} \to 0$, невласний інтеграл (12) по K' існує лише в сенсі головного значення за Коші. При цьому інтегрування (12) проводиться по всіх $K' \neq K'^{(\delta\tau)}$ ($K'^{\delta\tau} = K + K\varepsilon_{0D}^{\delta\tau}$), тобто по тих хвильових векторах, які не лежать на дисперсійній поверхні. Оскільки розглядається пружне розсіяння, то хвильові вектори пружно розсіяних хвиль мають задовольняти дисперсійному рівнянню і повинні лежати на дисперсійній поверхні. В такому випадку можна знехтувати вкладом в дифузне розсіяння від тих амплітуд, чиї хвильові вектори не лежать на дисперсійній поверхні. Отже, можна покласти $P_{\mathbf{GG}'}^{\delta\tau}(\mathbf{q}) = 0$. В інтегралі (13) при $K_i \to 0$ маємо δ-функцію, що зароджується, тобто:

$$\lim_{K_i'^{(\delta\tau)}\to 0} \frac{K_i'^{(\delta\tau)}}{(K'-K_r'^{(\delta\tau)})^2 + K_i'^{(\delta\tau)2}} = \pi\delta(K' - K_r'^{(\delta\tau)}).$$

Таким чином, для (13) отримаємо:

$$\mu_{\mathbf{GG}'}^{\delta}(\mathbf{q}) = \pi\varepsilon\sum_{\tau}(-1)^{\tau}\int dS_{K'}\Delta\chi'_{\mathbf{G}'\mathbf{G}}(\mathbf{q}'_{\delta\tau})S_{\mathbf{GG}'}(\mathbf{q}-\mathbf{q}'_{\delta\tau}), \tag{14}$$

де $\mathbf{q}'_{\delta\tau} = (\mathbf{q}'_s, K'^{(\delta\tau)})$, $\mathbf{q} = (\mathbf{q}_s, K')$, $\mathbf{q}_s$, $\mathbf{q}'_s$ — імпульсні координати на дисперсійній поверхні. З врахуванням (14) для дисперсійних поправок за рахунок дифузного розсіяння (11) матимемо наступну систему інтегральних рівнянь для $\Delta\chi'^{\delta 1}_{\mathbf{GG}'}(\mathbf{q}_s)$ і $\Delta\chi'^{\delta 2}_{\mathbf{GG}'}(\mathbf{q}_s)$:

$$\Delta\chi'^{\delta\mu}_{\mathbf{GG}'}(\mathbf{q}_s) = f_{\mathbf{GG}'}^{\delta\mu}(\mathbf{q}_s) + i\pi\varepsilon\sum_{\tau}(-1)^{\tau}\int dS_{K'}\Delta\chi'^{\delta\tau}_{\mathbf{G}'\mathbf{G}}(\mathbf{q}'_s)S_{\mathbf{GG}'}(\mathbf{q}_s-\mathbf{q}'_s). \tag{15}$$

Здійснивши пряме інтегральне перетворення Фур'є виразу (15) і врахувавши властивість Фур'є-перетвору згортки, можна отримати наступну систему алгебраїчних рівнянь для діагональних дисперсійних поправок ($\mathbf{G} = \mathbf{G}'$):

$$\Delta\tilde{\chi}'^{\delta\mu}_{\mathbf{G}}(\mathbf{u}) = \tilde{f}^{\delta\mu}_{\mathbf{G}}(\mathbf{u}) + i\pi\varepsilon\sum_{\tau}(-1)^{\tau}\Delta\tilde{\chi}'^{\delta\tau}_{\mathbf{G}}(\mathbf{u})\tilde{S}_{\mathbf{G}}(\mathbf{u}), \qquad (16)$$

де тильдою позначено Фур'є-перетвори відповідних функцій. Знайшовши розв'язки системи рівнянь (16) і здійснивши зворотній Фур'є-перетвір, одержимо:

$$\Delta\chi'^{\delta\mu}_{\mathbf{G}}(\mathbf{q}_s) = f^{\delta\mu}_{\mathbf{G}}(\mathbf{q}_s) + i\pi\varepsilon\sum_{\tau}(-1)^{\tau}\int d\mathbf{u}\tilde{f}^{\delta\tau}_{\mathbf{G}}(\mathbf{u})\tilde{S}_{\mathbf{G}}(\mathbf{u})e^{-i\mathbf{q}_s\mathbf{u}},$$

або, з врахуванням формули Парсеваля:

$$\Delta\chi'^{\delta\mu}_{\mathbf{G}}(\mathbf{q}_s) = f^{\delta\mu}_{\mathbf{G}}(\mathbf{q}_s) + i\pi\varepsilon\sum_{\tau}(-1)^{\tau}\int dS_{K'}f^{\delta\tau}_{\mathbf{G}}(\mathbf{q}'_s)S_{\mathbf{G}}(\mathbf{q}_s - \mathbf{q}'_s), \qquad (17)$$

де інтегрування ведеться по обох листах дисперсійної поверхні.

Вираз (17) є точним розв'язком інтегрального рівняння (3) зі знаменником у формі (9). Для отримання аналітичних виразів в (17) необхідно провести інтегрування для конкретних типів дефектів. Крім того, слід звернути увагу на те, що дисперсійні поправки дифузно розсіяних хвиль, згідно (8), залежать від дисперсійних поправок для когерентних хвиль. Враховуючи (8), з (17) отримаємо наступний вираз для дисперсійних поправок до когерентних хвиль за рахунок багатократності дифузного розсіяння:

$$\Delta\chi'^{\delta}_{\mathbf{G}}(0) = \sum_{\mu\neq\mu'=1}^{2}\frac{b^{\delta\mu}_{\mathbf{G}}(1-(-1)^{\mu}I^{\delta\mu'}_{\mathbf{G}}) - I^{\delta\mu'}_{\mathbf{G}}b^{\delta\mu'}_{\mathbf{G}}}{(1-I^{\delta1}_{\mathbf{G}})(1+I^{\delta2}_{\mathbf{G}}) - I^{\delta1}_{\mathbf{G}}I^{\delta2}_{\mathbf{G}}}, \qquad (18)$$

$$b^{\delta\mu}_{\mathbf{G}} = f^{\delta\mu}_{\mathbf{G}}(0) + i\pi\varepsilon\alpha_0\sum_{\tau}(-1)^{\tau}\int dS_{K'}g^{\delta\tau}_{\mathbf{G}}(\mathbf{q}'_s)S_{\mathbf{G}}(-\mathbf{q}'),$$

$$I^{\delta\tau}_{G} = i\pi\varepsilon\frac{\alpha_0}{d(0)}\int dS_{K'}S^{\delta\tau}_{\mathbf{G}}(\mathbf{q}'_s)S^{\delta\tau}_{\mathbf{G}}(-\mathbf{q}'_s),$$

де $S^{\delta\tau}_{\mathbf{G}}(\mathbf{q}'_s) = S_{\mathbf{G}}(\mathbf{q}'_s, K'^{(\delta\tau)})$, $S_{\mathbf{G}}(\mathbf{q}'_s) = S_{\mathbf{G}}(\mathbf{q}_s, 0)$.

Вирази (17) і (18) отримані для дисперсійних поправок з $\mathbf{G} = \mathbf{G}'$. Поправки з $\mathbf{G} \neq \mathbf{G}'$ як правило малі, в порівнянні з отриманими. Однак у випадку дефектів другого класу такі недіагональні поправки можуть помітно впливати на інтенсивність дифракції, тому, в загальному випадку, слід знаходити такі поправки за допомогою описаного вище методу отримання діагональних поправок.

3. ВИСНОВКИ

В роботі отримано вирази для дисперсійних поправок до дифузного та бреґґівського хвильових полів, що враховують ефекти повної багатократності розсіяння бреґґівських і дифузних хвиль як на періодичній «в середньому», так і на флуктуаційній частинах сприйнятливості кристалу. Отримані результати необхідні для опису картини дифракції в кристалах з дефектами другого класу, де ефекти повної багатократності розсіяння на флуктуаційній частині потенціалу (поляризовності) кристалу стають суттєвими. Таким чином, створено теоретичну модель, яка складає основу для проведення діагностики дефектів другого класу.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. В. Б. Молодкин, Е. А. Тихонова, *Физ. мет. металловед.*, **24**, № 3: 385 (1967).
2. V. B. Molodkin, *Phys. Metals*, **3**, No. 3: 573 (1981).
3. V. B. Molodkin, *Phys. Metals*, **3**, No. 4: 615 (1981).
4. Л. И. Даценко, В. Б. Молодкин, М. Е. Осиновский, *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами* (Киев: Наукова думка: 1988).
5. С. Й. Оліховський, Є. М. Кисловський, В. Б. Молодкін, Є. Г. Лень, Т. П. Владімірова, О. В. Решетник, *Металлофиз. новейшие технол.*, **22**, № 6: 3 (2000).
6. В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, С. В. Дмитриев, А. А. Белоцкая, М. Т. Когут, А. И. Гранкина, Е. И. Богданов, И. И. Рудницкая, О. Г. Гимчинский, И. И. Московка, В. Н. Венгер, *Металлофиз. новейшие технол.*, **28**, № 8: 1041 (2006).
7. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, I. M. Fodchuk, E. S. Skakunova, E. V. Pervak, V. V. Molodkin, *Phys. Status Solidi A*, **204**, Iss. 8: 2606 (2007).
8. A. N. Kostyuk, V. B. Molodkin, and S. I. Olikhovskii, *Phys. Status Solidi B*, **178**, Iss. 1: 45 (1993).
9. В. В. Лизунов, В. Б. Молодкин, С. В. Лизунова, Н. Г. Толмачев, Е. С. Скакунова, С. В. Дмитриев, Б. В. Шелудченко, С. М. Бровчук, Л. Н. Скапа, Р. В. Лехняк, Е. В. Фузик, *Металлофиз. новейшие технол.*, **36**, № 7: 857 (2014).
10. M. A. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin: Springer: 1996).

REFERENCES

1. V. B. Molodkin and E. A. Tikhonova, *Fiz. Met. Metaloved.*, **24**, No. 3: 385 (1967) (in Russian).
2. V. B. Molodkin, *Phys. Metals*, **3**, No. 3: 573 (1981).
3. V. B. Molodkin, *Phys. Metals*, **3**, No. 4: 615 (1981).
4. L. I. Datsenko, V. B. Molodkin, M. E. Osinovskii, *Dinamicheskoe Rasseyanie Rentgenovskikh Luchey Real'nymi Kristallami* [Dynamic Scattering of X-Rays by Real Crystals] (Kiev: Naukova Dumka: 1988) (in Russian).
5. S. J. Olikhovs'ky, Ye. M. Kislovs'ky, V. B. Molodkin, Ye. G. Len', T. P. Vladimirova, and O. V. Reshetnyk, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **22**, No. 6: 3 (2000) (in Ukrainian).

6. V. B. Molodkin, A. I. Nizkova, S. V. Dmitriev, A. O. Bilotska, M. T. Kogut, A. I. Grankina, Ye. I. Bogdanov, I. I. Rudnitska, O. G. Gymchynsky, I. I. Moskovka, and V. M. Venger, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **28**, No. 8: 1041 (2006) (in Russian).
7. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, I. M. Fodchuk, E. S. Skakunova, E. V. Pervak, V. V. Molodkin, *Phys. Status Solidi A*, **204**, Iss. 8: 2606 (2007).
8. A. N. Kostyuk, V. B. Molodkin, and S. I. Olikhovskii, *Phys. Status Solidi B*, **178**, Iss. 1: 45 (1993).
9. V. V. Lizunov, V. B. Molodkin, S. V. Lizunova, M. G. Tolmachyov, O. S. Skakunova, S. V. Dmitriev, B. V. Sheludchenko, S. M. Brovchuk, L. M. Skapa, R. V. Lekhnyak, and K. V. Fuzik, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **36**, No. 7: 857 (2014) (in Russian).
10. M. A. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin: Springer: 1996).