

## 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.J-, 61.72.Lk

### Возможности диагностики нескольких типов дефектов кристалла на основе эффекта различного влияния дефектов разного типа на деформационную зависимость полной интегральной интенсивности динамической дифракции

В. В. Лизунов, С. М. Бровчук, А. И. Низкова,  
В. Б. Молодкин, С. В. Лизунова, Б. В. Шелудченко,  
А. И. Гранкина, И. И. Рудницкая, С. В. Дмитриев,  
Н. Г. Толмачёв, Р. В. Лехняк, Л. Н. Скапа, Н. П. Ирха

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

В работе установлено и количественно проанализировано различие деформационных зависимостей (ДЗ) когерентной ( $R_{ib}$ ) и диффузной ( $R_{id}$ ) составляющих полной интегральной интенсивности динамической дифракции (ПДИД) как между собой, так и для каждого из нескольких типов дефектов, одновременно присутствующих в монокристаллическом образце. Это открывает принципиальную возможность определения параметров дефектов разного типа при использовании (наряду с вариацией условий дифракции) различных участков ДЗ ПДИД с резкой ДЗ  $R_{id}/R_{ib}$  (вклада диффузной составляющей). Показано, что при изменении условий Лауэ-дифракции от соответствующих приближению толстого кристалла к соответствующим приближению тонкого кристалла и при расширении области изменения степени упругой деформации появляется возможность управления интервалом и характером изменения отношения  $R_{id}/R_{ib}$ , а в результате — чувствительностью ДЗ ПДИД к типу и характеристикам микродефектов.

В роботі встановлено та кількісно проаналізовано різницю деформаційних залежностей (ДЗ) когерентної ( $R_{ib}$ ) та дифузної ( $R_{id}$ ) складових повної інтегральної інтенсивності динамічної дифракції (ПДИД) як між собою, так і для кожного з декількох типів дефектів, одночасно присутніх у монокристалічному зразку. Це відкриває принципову можливість визначення параметрів дефектів різного типу з використанням (разом з варіацією умов дифракції) різних областей ДЗ ПДИД з різкою ДЗ  $R_{id}/R_{ib}$  (внеску дифузної складової). Показано, що при зміні умов Лауе-дифракції від

відповідних наближенню товстого кристалу до відповідних наближенню тонкого кристалу та при розширенні області зміни ступеня пружної деформації з'являється можливість керування інтервалом і характером зміни відношення  $R_{id}/R_{ib}$ , а в результаті — чутливістю ДЗ ПІДД щодо типу й характеристик мікрodefектів.

The paper establishes and analyses quantitatively the difference in the deformation dependences (DD) of coherent ( $R_{ib}$ ) and diffuse ( $R_{id}$ ) components of the total integrated intensity of dynamical diffraction (TIIDD) for both of these ones and for each one of the various types of defects, if such are available simultaneously in the single-crystal sample. This provides the possibility of parameters' determination in principle for the different types of defects, using the diffraction conditions as well the variation of different segments of the DD TIIDD with sharp DD of  $R_{id}/R_{ib}$  (i.e. of the diffuse component contribution). As shown, if the Laue-diffraction conditions vary from ones corresponding to the thick-crystal approximation to ones corresponding to the thin-crystal approximation, and with expansion of the elastic strain range of variability, it becomes possible to control both the interval and the pattern of change of the  $R_{id}/R_{ib}$  relation. As a result, one can control the sensitivity of the DD TIIDD to the type and characteristics of microdefects.

**Ключевые слова:** микродефекты, деформационные зависимости, полная интегральная интенсивность динамической дифракции.

*(Получено 7 июля 2014 г.)*

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Для анализа изменений брэгговской и диффузной составляющих интенсивности дифракции в зависимости от характеристик микродефектов и макродеформаций использованы полученные в [1–4] выражения для полной интегральной интенсивности динамической дифракции (ПИИДД). Следует отметить, что в кинематической теории М. А. Кривоглаза [5] без макродеформаций потенциал рассеяния излучения кристаллом состоит из двух частей, одна из которых «в среднем» периодическая, как и в идеальном кристалле, но значения периода и отражательной способности отличаются за счёт равномерно (случайно) распределённых дефектов, вторая — флуктуационная, описывающая отклонение от этой периодичности за счёт случайно распределённых дефектов. При этом потенциал в теории Кривоглаза определяет только амплитуды рассеянных волн. В связи с этим механизм влияния дефектов на кинематическую картину рассеяния является амплитудным. Части потенциала реального кристалла, соответствующие «среднему» и флуктуационному слагаемым, непосредственно формируют соответственно брэгговское и диффузное рассеяние. При этом полная интегральная интенсивность кинематической дифракции не зависит ни от макроде-

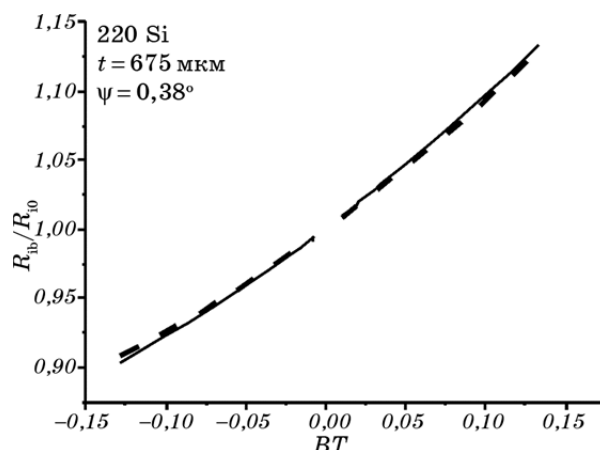
формаций, ни от микродефектов. Изменение соотношения  $R_{id}/R_{ib}$  в кинематической теории может быть связано только с изменением в кристалле характеристик и концентрации дефектов и не зависит ни от условий дифракции, ни от макродеформаций. В динамической теории [2, 3], вследствие учёта многократности рассеяния, и брэгговская, и диффузная составляющие интенсивности определяются именно обеими частями потенциала; при этом он действует и на амплитуду, и на фазу рассеянной волны. Таким образом, как показано в [6], включается дисперсионный механизм влияния дефектов на картину многократного рассеяния излучения кристаллом. Особенность последнего состоит в том, что влияние условий дифракции и влияние параметров дефектов при этом «запутываются», что делает метод ПИИДД для определения параметров дефектов более сложным, но и более чувствительным и информативным, способным определить дефекты нескольких типов. Собственно измерение ПИИДД в разных условиях дифракции и даёт необходимое количество уравнений для комбинированного подхода в многопараметрической диагностике дефектов. В настоящей работе предлагается вместо зависимостей (или наряду с ними) от условий дифракции, которые «запутываются» с зависимостями от характеристик дефектов, использовать аналогичные зависимости от макродеформаций, появляющиеся при многократном рассеянии за счёт дисперсионного механизма.

## 2. ОПРЕДЕЛЕНИЕ МОДЕЛИ ДЕФОРМАЦИОННОЙ ЗАВИСИМОСТИ ПИИДД ДЛЯ ЗАДАННЫХ УСЛОВИЙ ДИФРАКЦИИ

В работе [4] авторами предложена структурно-чувствительная модель деформационной зависимости (ДЗ) ПИИДД и установлен механизм возможного увеличения чувствительности ДЗ ПИИДД к дефектам за счёт нефакторизованности («запутанности») зависимостей ПИИДД от макродеформаций и от микродефектов. Следует отметить, что брэгговская и диффузная составляющие ПИИДД раздельно каждая не обладают такой особенностью. В настоящей работе эта идея получила дальнейшее развитие. При этом ДЗ ИИДД упруго изогнутого идеального кристалла, нормированной на ИИДД неизогнутого идеального кристалла, представляется в виде:

$$\frac{R_{ib}}{R_{i0}} = [(1 + \alpha BT + \beta(BT)^2)] \left( 1 + \alpha' \frac{M_0}{r} + \beta' \frac{M_0^2}{r^2} \right) \exp \left[ -\gamma' \frac{M_0^2}{r^2} \right], \quad (1)$$

где  $B = \lambda^2 \sin \psi [1 + \gamma_0 \gamma_1 (1 + \nu)] / [2\pi |\chi_{hr}|^2 rd]$ ,  $T = \pi t |\chi_{hr}| / (\lambda \sqrt{\gamma_0 \gamma_1})$ ,  $\psi$  — угол между отражающей плоскостью и нормалью к поверхности кристалла,  $\theta_B$  — угол Брэгга,  $\lambda$  — длина волны используемого излу-



**Рис. 1.** ДЗ ИИДД упруго изогнутого идеального кристалла, нормированная на ИИДД неизогнутого идеального кристалла  $R_{ib}(BT)/R_{i0}$ , излучение  $MoK_{\alpha}$ . Сплошные линии — расчёт по теории [1], штриховая линия — расчёт по модели (2), коэффициент добротности подгонки (КДП) к сплошной линии равен 0,00072.

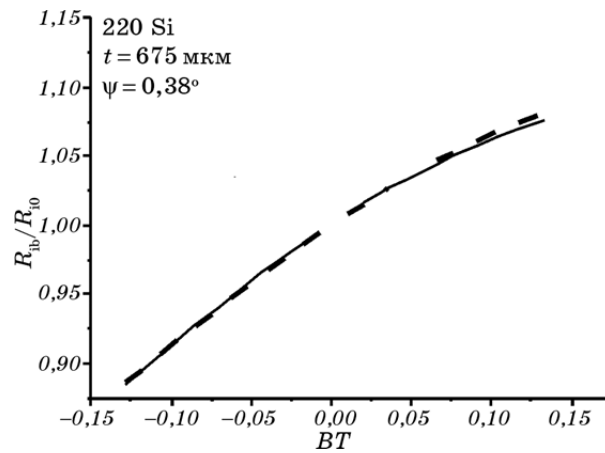
чения,  $\gamma_0 = \cos(\theta_B + \psi)$ ,  $\gamma_1 = \cos(\theta_B - \psi)$ ,  $\nu$  — коэффициент Пуассона,  $\mu_0$  — линейный коэффициент фотоэлектрического поглощения,  $r$  — радиус кривизны цилиндрического изгиба кристалла,  $t$  — толщина кристалла,  $M_0 = 2Te^{-M} \sin \theta_B \sin \psi (\chi_{Hr} / |\chi_{Hr}|)$ ,  $d = a / \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$ ,  $a$  — постоянная решётки,  $h, k, l$  — индексы Миллера,  $\chi_{Hr}$  — реальная часть Фурье-компоненты поляризуемости кристалла,  $\chi_{Hi}$  — мнимая часть Фурье-компоненты поляризуемости кристалла [1].

На рисунках 1 и 2 представлены графики, полученные после определения коэффициентов модели (1) путём сравнения расчётов по теории [1] и по модели (1). В результате формула (1) сведена к (2):

$$\frac{R_{ib}}{R_{i0}} = [(1 + 0,84BT + 0,93(BT)^2)] \left( 1 - 2,95 \cdot 10^5 \frac{M_0}{r} \right) \exp \left[ -10^{14} \frac{M_0^2}{r^2} \right]. \quad (2)$$

### 3. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МОДЕЛИ ДЗ ПИИДД ДЛЯ КРИСТАЛЛА С РАЗНЫМИ ТИПАМИ ДЕФЕКТОВ

Для определения диффузной составляющей ПИИДД используется полученная экспериментально ДЗ ПИИДД кристалла с известной дефектной структурой. Для каждого из 3-х присутствующих в рассматриваемом кристалле кремния (толщиной  $t = 675$  мкм) типов дефектов для 220 Лауэ-отражения  $MoK_{\alpha}$ -излучения вычислены и



**Рис. 2.** ДЗ ИИДД упруго изогнутого идеального кристалла, нормированная на ИИДД неизогнутого идеального кристалла  $R_{ib}(BT)/R_0$ , излучение  $FeK_\alpha$ . Сплошные линии — расчёт по теории [1], штриховая линия — расчёт по модели (2), КДП к сплошной линии равен 0,000538.

**ТАБЛИЦА 1.** Характеристики дефектной структуры исследуемого кристалла Si.

Тип дефекта	$R, h, \text{мкм}$	$c$	$R_i \cdot 10^6$	$R_{i \text{ coh.}} \cdot 10^6$	$R_{i \text{ dif.}} \cdot 10^6$
Кластеры (1)	$R = 0,67$ $h = 0,014$	$2,24 \cdot 10^{-14}$	8,61	1,31	7,3
Петли (2)	0,67	$6,27 \cdot 10^{-15}$	4,76	3,37	1,39
Мелкие петли (3)	0,00145	$1,78 \cdot 10^{-7}$	4,10	3,70	0,404
(1) + (2) + (3)			9,63	1,19	8,4

приведены в табл. 1 значения ПИИДД  $R_i$  и её когерентной  $R_{i \text{ coh.}}$  и диффузной  $R_{i \text{ dif.}}$  составляющих. Параметры дефектов найдены с помощью теории преципитации, исходя из температуры и времени отжига.

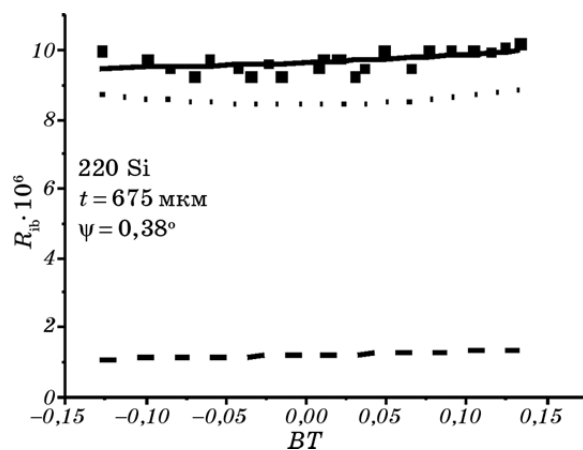
ДЗ ПИИДД упруго изогнутого кристалла с дефектами представляется в виде:

$$\begin{aligned}
 R_{ib} = & 1,19 \cdot 10^{-6} [(1 + 0,84BT + 0,93(BT)^2)] (1 - 2,95 \cdot 10^5 M_0/r) \times \\
 & \times \exp[-10^{14} (M_0/r)^2] + 8,43 \cdot 10^{-6} [(1 + 0,04BT + 2,4(BT)^2)] \times \\
 & \times (1 - 2,95 \cdot 10^5 M_0/r) \exp[-10^{14} (M_0/r)^2],
 \end{aligned} \tag{3}$$

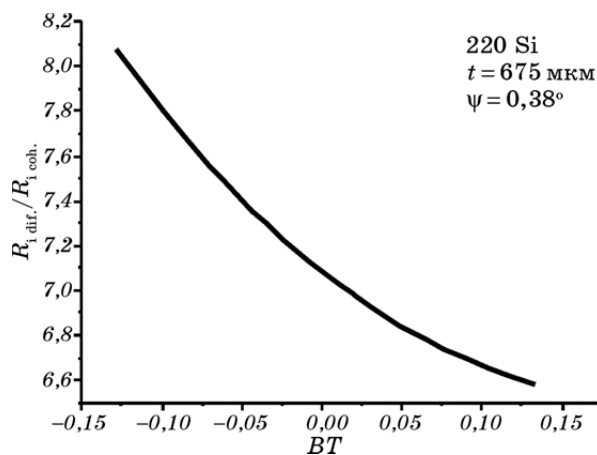
где брэгговская компонента определяется формулой (2), а диффузная — путём подгонки к экспериментальным данным. Результаты

расчётов на основе модели (3) представлены на рис. 3.

С целью выяснения принципиальной возможности существования участков ДЗ с преобладанием диффузной или когерентной составляющих выполнены расчёты, результаты которых показаны на рис. 4.



**Рис. 3.** ДЗ ПИИДД упруго изогнутого кристалла с дефектами  $R_{ib}(BT)$ : маркёры — экспериментальная ДЗ ПИИДД, сплошная линия — ДЗ ПИИДД, рассчитанная по модели (3), штриховая линия — ДЗ когерентной составляющей ПИИДД, рассчитанная по модели (3), пунктирная линия — ДЗ диффузной составляющей ПИИДД, рассчитанная по модели (3); излучение  $MoK_{\alpha}$ ; КДП сплошной линии к эксперименту равен 0,0514.

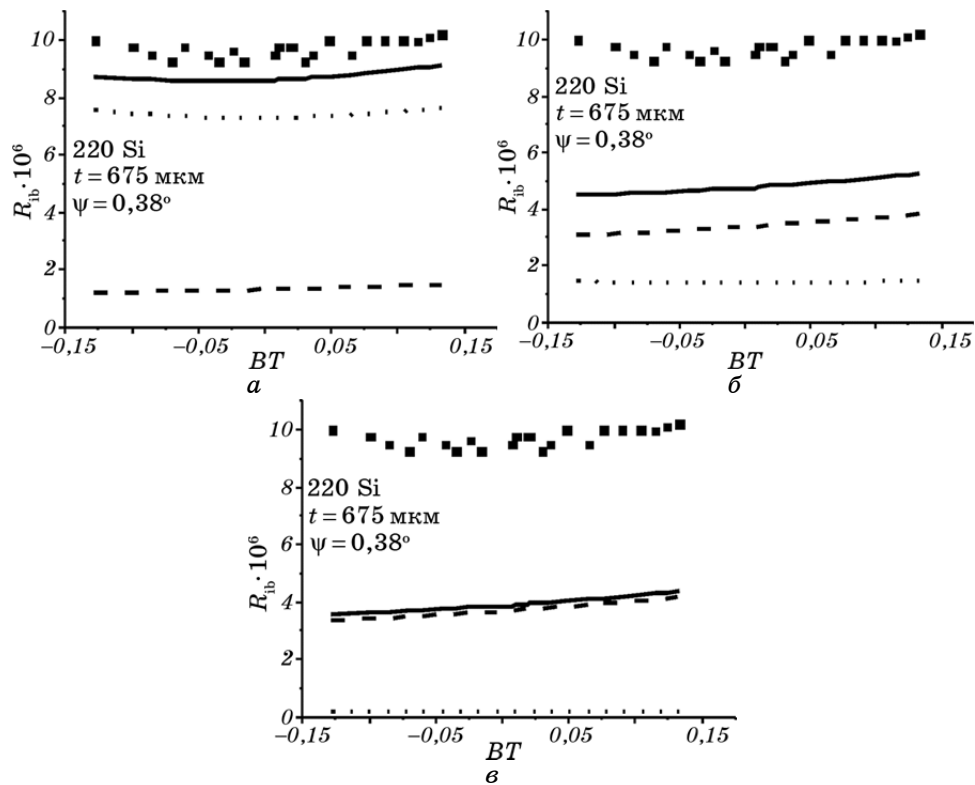


**Рис. 4.** ДЗ отношения диффузной составляющей ПИИДД к когерентной составляющей ПИИДД  $R_{i\ dif}(BT)/R_{i\ coh}(BT)$ , рассчитанная с использованием выражения (3) для упруго изогнутого кристалла с дефектами.

На рисунке 4 приведены ДЗ отношения диффузной составляющей к когерентной, рассчитанные по данным, представленным на рис. 3. Видно, что в исследуемом интервале изменения эффективной деформации заметно изменяется величина указанного отношения.

Также для каждого из 3-х присутствующих в данном кристалле типов дефектов по модели (3) вычислены приведённые на рис. 5 ДЗ ПИИДД  $R_i$  и её когерентной  $R_{i\text{ coh.}}$  и диффузной  $R_{i\text{ dif.}}$  составляющих.

Расчёты, представленные на рис. 5, иллюстрируют значительное различие соотношения брэгговской и диффузной составляющих ПИИДД для трёх разных типов дефектов, одновременно присут-



**Рис. 5.** ДЗ ПИИДД упруго изогнутого кристалла с дефектами  $R_{ib}(BT)$ , обозначения для линий такие же, как на рис. 3. ДЗ ПИИДД рассчитаны в предположении, что: в образце присутствуют только дискообразные кластеры  $\text{SiO}_2$  со средним радиусом  $R = 0,67 \text{ мкм}$ , высотой  $h = 0,014 \text{ мкм}$  и концентрацией  $c = 2,24 \cdot 10^{-14}$  (а); в образце присутствуют только дислокационные петли со средним радиусом  $R = 0,67 \text{ мкм}$  и концентрацией  $c = 6,27 \cdot 10^{-15}$  (б); в образце присутствуют только дислокационные петли со средним радиусом  $R = 0,00145 \text{ мкм}$  и концентрацией  $c = 1,78 \cdot 10^{-7}$  (в).

ствующих в данном образце.

Однако вследствие слабых ДЗ ПИИДД в данном интервале изменения степени эффективной деформации выявить участки ДЗ с преобладающей чувствительностью к дефектам разных типов и, следовательно, разделить вклады от них невозможно.

Необходимо выявить условия дифракции с различными величинами соотношения брэгговской и диффузной составляющих ПИИДД, в которых возможна количественная диагностика дефектов нескольких типов, одновременно присутствующих в образце.

С этой целью в настоящей работе выполнены расчёты ДЗ ПИИДД, а также ДЗ когерентной и диффузной составляющих ПИИДД с использованием модели ДЗ ПИИДД, полученной для других условий дифракции ( $\text{FeK}_\alpha$ -излучение, толщина кристалла  $t = 530$  мкм,  $\psi = 1,5^\circ$ ) и интервалов макродеформаций в работе [4] (формула (4)) для приближения толстого кристалла:

$$R_{\text{ib}} = 2,52 \cdot 10^{-9} [(1 + 0,61BT + 0,64(BT)^2)] (1 + 2,81 \cdot 10^6 M_0/r) \times \\ \times \exp[-8,22 \cdot 10^{13} (M_0/r)^2] + 1,61 \cdot 10^{-9} [(1 + 0,49BT)] \times \\ \times (1 + 2,6 \cdot 10^6 M_0/r) \exp[-6,2 \cdot 10^{13} (M_0/r)^2]. \quad (4)$$

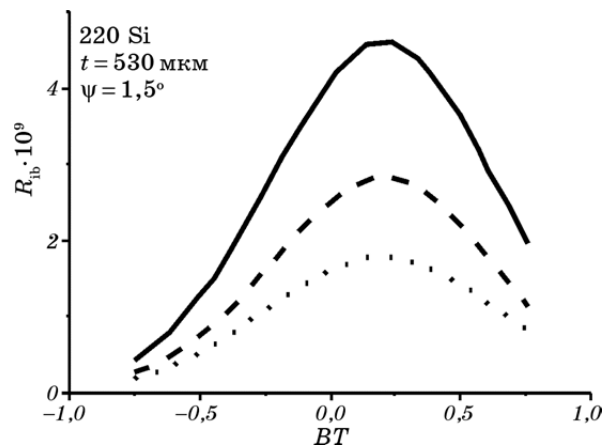
Результаты расчётов ДЗ ПИИДД, выполненные в предположении, что в образце одновременно присутствуют все три типа исследуемых дефектов (кластеры, петли и мелкие петли), представлены на рис. 6.

Из сравнения рисунков 3 и 6 видно, что для одной и той же дефектной структуры при переходе к условиям дифракции, соответствующим приближению толстого кристалла, кардинально изменяется соотношение величин брэгговской и диффузной составляющих ПИИДД. На рисунке 7 представлены результаты расчёта ДЗ отношения величины диффузной составляющей ПИИДД к величине когерентной составляющей ПИИДД.

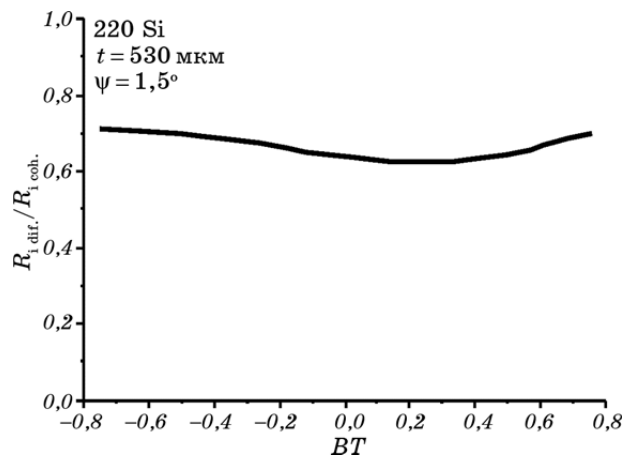
Из рисунка 7 видно, что, несмотря на то, что при увеличении интервала изменения эффективной деформации ДЗ ПИИД, а также ДЗ когерентной и диффузной составляющих ПИИДД становятся более крутыми, а в приближении толстого кристалла ДЗ  $R_{\text{i dif.}}(BT)/R_{\text{i coh.}}(BT)$  практически отсутствует.

Затем для каждого из 3-х типов дефектов данной дефектной структуры по модели (4) вычислены приведённые на рис. 8 ДЗ ПИИДД  $R_{\text{i}}$  и её когерентной  $R_{\text{i coh.}}$  и диффузной  $R_{\text{i dif.}}$  составляющих. Из рисунков 5 и 8 видно, что в данном случае изменение условий дифракции от тонкого к толстому кристаллу не приводит к изменению преобладающего типа дефектов — в обоих приближениях определяющее влияние на величину ПИИДД оказывают кластеры-преципитаты  $\text{SiO}_2$ .





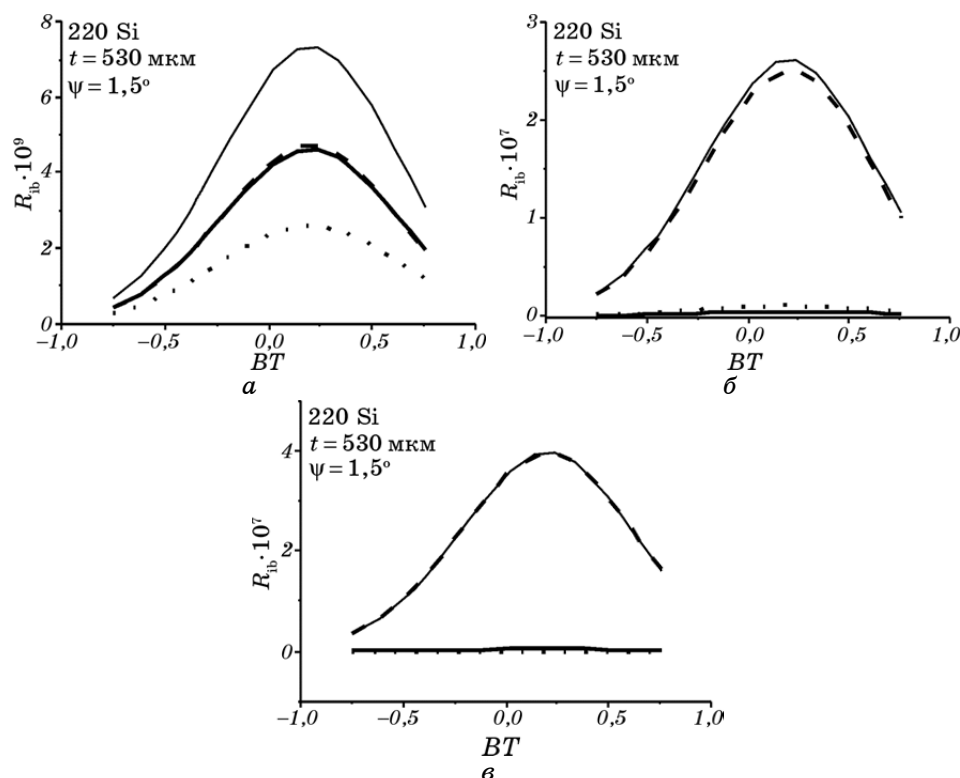
**Рис. 6.** ДЗ ПИИДД упруго изогнутого кристалла с дефектами  $R_{ib}(VT)$ : сплошная линия — ДЗ ПИИДД, рассчитанная по модели (4), штриховая линия — ДЗ когерентной составляющей ПИИДД, рассчитанная по модели (4), пунктирная линия — ДЗ диффузной составляющей ПИИДД, рассчитанная по модели (4); излучение  $\text{FeK}_\alpha$ .



**Рис. 7.** Деформационная зависимость отношения диффузной составляющей ПИИДД к когерентной составляющей ПИИДД  $R_{i \text{ dif.}}(VT)/R_{i \text{ coh.}}(VT)$ , рассчитанная с использованием выражения (4) для упруго изогнутого кристалла с дефектами.

Таким образом, определить параметры присутствующих в кристалле петель путём указанного изменения условий дифракции, оказалось, по указанной причине, невозможно.

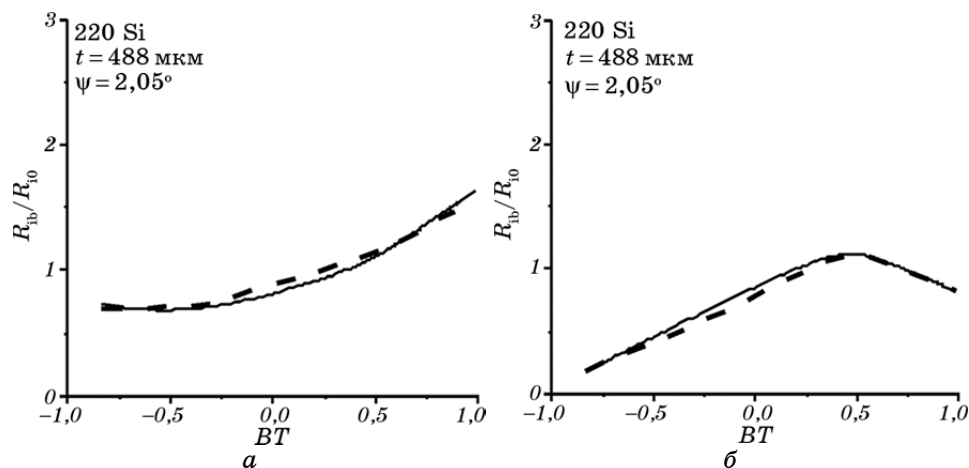
Выявление интервалов изменения  $VT$  с различными ДЗ и величинами соотношения диффузной и брэгговской составляющих



**Рис. 8.** ДЗ ПИИДД упруго изогнутого кристалла с дефектами  $R_{ib}(VT)$ : тонкие сплошные линии — ДЗ ПИИДД, рассчитанные по модели (4), штриховые линии — ДЗ когерентной составляющей ПИИДД, рассчитанные по модели (4), пунктирные линии — ДЗ диффузной составляющей ПИИДД, рассчитанные по модели (4); излучение  $FeK_\alpha$ . Толстые сплошные линии — ДЗ ПИИДД, рассчитанные по модели (4) в предположении, что в образце присутствуют: только дискообразные кластеры  $SiO_2$  со средним радиусом  $R = 0,67$  мкм, высотой  $h = 0,014$  мкм и концентрацией  $c = 2,24 \cdot 10^{-14}$  (а); только дислокационные петли со средним радиусом  $R = 0,67$  мкм и концентрацией  $c = 6,27 \cdot 10^{-15}$  (б); только мелкие дислокационные петли со средним радиусом  $R = 0,00145$  мкм и концентрацией  $c = 1,78 \cdot 10^{-7}$  (в).

ПИИДД, наличие которых открыло бы возможность количественной диагностики дефектов нескольких типов, одновременно присутствующих в образце, целесообразно выполнять для условий дифракции, соответствующих также и приближению тонкого кристалла.

Для интервала изменения  $VT \leq 0,75$ , изученного в работе [4], путём подгонки ДЗ ПИИДД, рассчитанным по модели, к зависимостям ПИИДД, рассчитанным по теории Чуховского–Петрашени, результаты которой представлены на рис. 9, определены параметры



**Рис. 9.** ДЗ ИИДД упруго изогнутого идеального кристалла, нормированная на ИИДД неизогнутого идеального кристалла  $R_{ib}(BT)/R_{10}$ ; сплошные линии — рассчитанные по теории [1], штриховые линии — расчёт по модели (5): излучение  $MoK_\alpha$ , КДП к сплошной линии = 0,143 (а), излучение  $FeK_\alpha$ , КДП к сплошной линии равен 0,114 (б).

модели (5) ДЗ для когерентной составляющей ПИИДД:

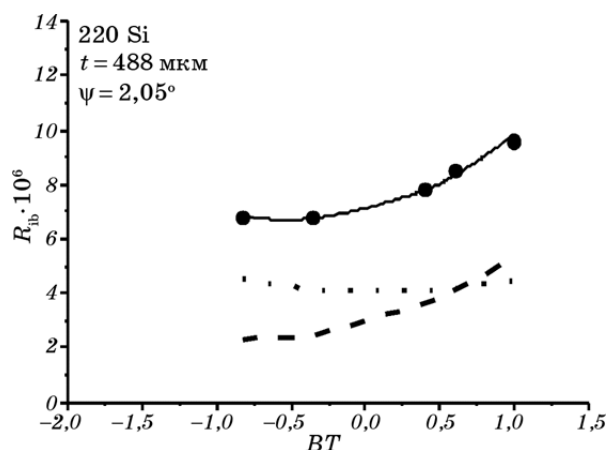
$$\frac{R_{ib}}{R_{10}} = [(1 + 0,58BT + 0,61(BT)^2)] \exp(-0,33\sqrt{|BT|}) \times \left(1 + 3,8 \cdot 10^6 \frac{M_0}{r} + 2,95 \cdot 10^{12} \left(\frac{M_0}{r}\right)^2\right) \exp\left(-2,12 \cdot 10^{10} \left|\frac{M_0}{r}\right|^{3/2}\right). \quad (5)$$

При использовании модели (5) путём подгонки расчётной ДЗ ПИИДД (сплошные линии на рис. 10) к экспериментальной (маркёры на рис. 10) определены коэффициенты модели ДЗ диффузной составляющей ПИИДД для данных условий дифракции, заданного интервала изменения  $BT$  и дефектной структуры:

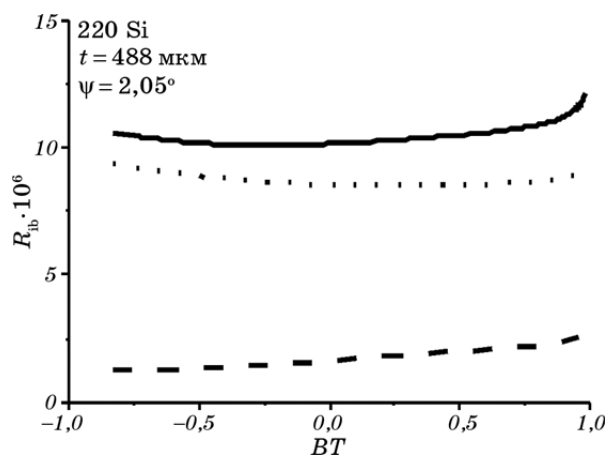
$$R_{ib} = 3,37 \cdot 10^{-6} [(1 + 0,58BT + 0,61(BT)^2)] \exp(-0,33\sqrt{|BT|}) \times \left(1 + 3,8 \cdot 10^6 M_0/r + 2,95 \cdot 10^{12} (M_0/r)^2\right) \exp(-2,12 \cdot 10^{10} |M_0/r|^{3/2}) + 4,04 \cdot 10^{-6} [(1 - 0,03BT + 0,14(BT)^2)] \left(1 + 3,8 \cdot 10^6 M_0/r + 2,95 \cdot 10^{12} (M_0/r)^2\right) \exp(-2,12 \cdot 10^{10} |M_0/r|). \quad (6)$$

Затем, используя полученную модель (6) кристалла с той же толщиной и при тех же условиях дифракции, но с другой дефектной

структурой (соответствующей параметрам, приведённым в табл. 1), также рассчитаны ДЗ ПИИДД (результаты соответствующих расчётов представлены на рис. 11.):



**Рис. 10.** ДЗ ПИИДД упруго изогнутого кристалла с дефектами  $R_{ib}(BT)$ : маркёры — экспериментальная ДЗ ПИИДД, сплошная линия — ДЗ ПИИДД, рассчитанная по модели (6); штриховая линия — ДЗ когерентной составляющей ПИИДД, рассчитанная по модели (6); пунктирная линия — ДЗ диффузной составляющей ПИИДД, рассчитанная по модели (6); излучение  $MoK_\alpha$ , КДП сплошной линии к эксперименту равен 0,0167.



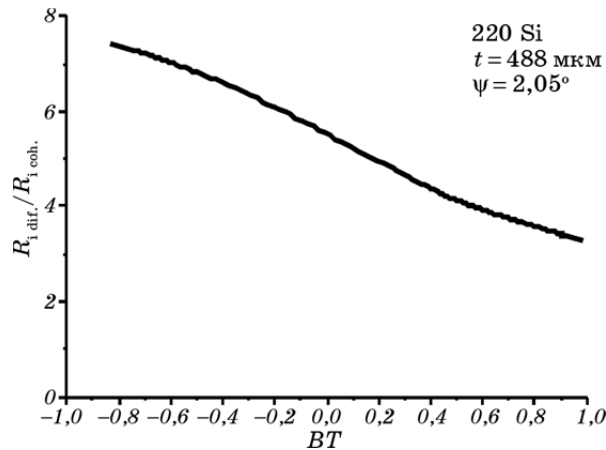
**Рис. 11.** ДЗ ПИИДД упруго изогнутого кристалла с дефектами  $R_{ib}(BT)$ : сплошная линия — ДЗ ПИИДД, рассчитанная по модели (7); штриховая линия — ДЗ когерентной составляющей ПИИДД, рассчитанная по модели (7); пунктирная линия — ДЗ диффузной составляющей ПИИДД, рассчитанная по модели (7); излучение  $MoK_\alpha$ .

$$\begin{aligned}
R_{ib} = & 1,82 \cdot 10^{-6} [(1 + 0,58BT + 0,61(BT)^2)] \exp(-0,33\sqrt{|BT|}) \times \\
& \times \left( 1 + 3,8 \cdot 10^6 \frac{M_0}{r} + 2,95 \cdot 10^{12} \left( \frac{M_0}{r} \right)^2 \right) \exp \left( -2,12 \cdot 10^{10} \left| \frac{M_0}{r} \right|^{3/2} \right) + \\
& + 8,39 \cdot 10^{-6} [(1 - 0,03BT + 0,14(BT)^2)] \left( 1 + 3,8 \cdot 10^6 \frac{M_0}{r} + \right. \\
& \left. + 2,95 \cdot 10^{12} \left( \frac{M_0}{r} \right)^2 \right) \exp \left( -2,12 \cdot 10^{10} \left| \frac{M_0}{r} \right| \right). \quad (7)
\end{aligned}$$

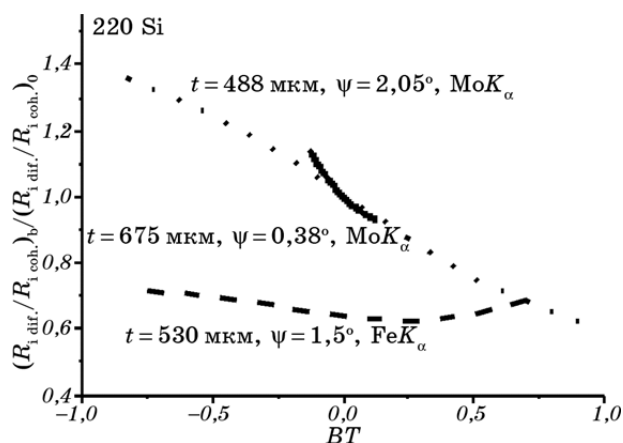
На рисунке 12 представлены результаты расчёта с использованием модели (7) ДЗ отношения величины диффузной составляющей ПИИДД к величине когерентной составляющей ПИИДД, а на рис. 13 ДЗ того же самого отношения, нормированного на своё значение при  $BT = 0$ .

Из рисунка 13 видно, что при изменении условий Лауэ-дифракции от соответствующих приближению толстого кристалла к соответствующим приближению тонкого кристалла и при увеличении интервала изменения степени упругой деформации усиливается деформационная зависимость отношения  $R_{id}/R_{ib}$ .

Это происходит за счёт наибольшего влияния в указанных условиях различия ДЗ отражательных способностей для составляющих ПИИДД и, следовательно, характера влияния дефектов, формируемого этим отношением. В результате увеличивается чувстви-



**Рис. 12.** ДЗ отношения диффузной составляющей ПИИДД к когерентной составляющей ПИИДД  $R_{i \text{ dif.}}(BT)/R_{i \text{ coh.}}(BT)$ , рассчитанная с использованием выражения (7) для упруго изогнутого кристалла с дефектами.



**Рис. 13.** ДЗ отношения диффузной составляющей ПИИДД к когерентной составляющей ПИИДД  $R_{i \text{ dif.}}(BT)/R_{i \text{ coh.}}(BT)$ , нормированного на величину  $R_{i \text{ dif.}}(0)/R_{i \text{ coh.}}(0)$ , рассчитанные с использованием выражений (3) (сплошная кривая), (4) (штриховая кривая) и (7) (пунктирная кривая) для упруго изогнутого кристалла с дефектами.

ность и информативность диагностики дефектов нескольких типов.

#### 4. ВЫВОДЫ

Установлено, что выявление интервалов изменения эффективной макродеформации с различными величинами соотношений брэгговской и диффузной составляющих ПИИДД, наличие которых открыло бы возможность количественной диагностики дефектов нескольких типов, одновременно присутствующих в образце, целесообразно выполнять с использованием условий дифракции, обязательно включающих и приближение тонкого кристалла. Реализация такого подхода является целью следующей работы.

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. F. N. Chukhovskii and P. V. Petrashen', *Acta Crystallogr. A*, **33**: 311 (1977).
2. В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, А. П. Шпак, В. Ф. Мачулин, В. П. Кладько, И. В. Прокопенко, Р. Н. Кютт, Е. Н. Кисловский, С. И. Олиховский, Е. В. Первак, И. М. Фодчук, А. А. Дышеков, Ю. П. Хапачев, *Дифрактометрия наноразмерных дефектов и гетерослоев кристаллов* (Киев: Академперіодика: 2005).
3. В. Б. Молодкин, М. В. Ковальчук, В. Ф. Мачулин, А. И. Низкова, Э. Х. Мухамеджанов, С. В. Лизунова, В. П. Кладько, С. В. Дмитриев, И. Н. Заболотный, Н. П. Ирха, С. М. Бровчук, Я. В. Василик, В. В. Лизунов, А. А. Катасонов, И. И. Рудницкая, В. С. Харченко, А. Е. Благов,

- В. В. Молодкин, Е. В. Первак, Р. В. Лехняк, *Металлофиз. новейшие технол.*, **34**, № 9: 1163 (2012).
4. S. M. Brovchuk, V. B. Molodkin, A. I. Nizkova, I. I. Rudnytska, G. I. Grankina, V. V. Lizunov, S. V. Lizunova, B. V. Sheludchenko, E. S. Skakunova, S. V. Dmitriev, I. N. Zabolotnyi, A. A. Katasonov, B. F. Zhuravlev, R. V. Lekhnyak, L. N. Skapa, and N. P. Irha, *Металлофиз. новейшие технол.*, **36**, № 8: 1035 (2014).
  5. М. А. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin: Springer: 1996).
  6. 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).

## REFERENCES

1. F. N. Chukhovskii and P. V. Petrashen', *Acta Crystallogr. A*, **33**: 311 (1977).
2. V. B. Molodkin, A. I. Nizkova, A. P. Shpak, V. F. Machulin, V. P. Klad'ko, I. V. Prokopenko, R. N. Kyutt, E. N. Kislovskiy, S. I. Olikhovskiy, E. V. Pervak, I. M. Fodchuk, A. A. Dyshekov, and Yu. P. Khapachev, *Difraktometriya Nanorazmernykh Defektov i Geterosloev Kristallov (Diffraction of Nanosize Defects and Heterolayers of Crystals)* (Kiev: Akadempriodika: 2005) (in Russian).
3. V. B. Molodkin, M. V. Koval'chuk, V. F. Machulin, A. I. Nizkova, Eh. H. Muhamedjanov, S. V. Lizunova, V. P. Klad'ko, S. V. Dmitriev, I. M. Zabolotnyy, N. P. Irkha, S. M. Brovchuk, Ya. V. Vasylyk, V. V. Lizunov, A. A. Katasonov, I. I. Rudnyts'ka, V. S. Kharchenko, A. E. Blagov, V. V. Molodkin, K. V. Pervak, and R. V. Lekhnyak, *Металлофиз. Новейшие Технол.*, **34**, No. 9: 1163 (2012) (in Russian).
4. S. M. Brovchuk, V. B. Molodkin, A. I. Nizkova, I. I. Rudnytska, G. I. Grankina, V. V. Lizunov, S. V. Lizunova, B. V. Sheludchenko, E. S. Skakunova, S. V. Dmitriev, I. N. Zabolotnyi, A. A. Katasonov, B. F. Zhuravlev, R. V. Lekhnyak, L. N. Skapa, and N. P. Irha, *Металлофиз. Новейшие Технол.*, **36**, No. 8: 1035 (2014).
5. М. А. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin: Springer: 1996).
6. 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, *Металлофиз. Новейшие Технол.*, **36**, No. 7: 857 (2014) (in Russian).