

PACS numbers: 61.05.cc, 61.05.cf, 61.05.cp, 61.72.Dd, 61.72.Qq, 61.72.S-, 68.65.Ac

**Дисперсионные эффекты взаимосвязанности зависимостей
от различных условий дифракции картины рассеяния
и колоссального усиления этих зависимостей
и их структурной чувствительности и информативности**

Л. Н. Скапа, В. В. Лизунов, В. Б. Молодкин, Е. Г. Лень,
Б. В. Шелудченко, С. В. Лизунова, Е. С. Скакунова, Н. Г. Толмачёв,
С. В. Дмитриев, Р. В. Лехняк, Г. О. Велиховский, В. В. Молодкин,
И. Н. Заболотный, Е. В. Фузик, О. П. Васькевич

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

В работе проведён квантово-механический количественный анализ возможностей повышения чувствительности и информативности картины многократного рассеяния к несовершенствам структуры кристаллов за счёт использования дисперсионных эффектов колоссального усиления структурно чувствительных зависимостей дифракционной картины от различных условий дифракции. Установлено появление за счёт дисперсионного механизма эффектов взаимосвязанности указанных зависимостей картины от различных условий между собой и с зависимостями от характеристик дефектов и в результате изменения избирательности чувствительности этих зависимостей к дефектам какого-либо типа при вариации условий дифракции. Это существенно расширило возможности применения целенаправленно комбинированной обработки дифракто-

Correspondence 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-03680 Kyiv, Ukraine*

L. M. Skapa, V. V. Lizunov, V. B. Molodkin, E. G. Len, B. V. Sheludchenko,
S. V. Lizunova, O. S. Skakunova, M. G. Tolmachev, S. V. Dmitriev, R. V. Lekhnyak,
G. O. Velikhovskii, V. V. Molodkin, I. M. Zabolotnyi, K. V. Fuzik, and O. P. Vas'kevich
Dispersion Effects of Interconnection of the Scattering Pattern Dependences on
Different Diffraction Conditions and Huge Intensification of These Dependences and
Their Structure Sensitivity and Informativeness, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **37**,
No. 11: 1567–1582 (2015) (in Russian).

метрических данных в различных условиях дифракции для повышения информативности многопараметрической диагностики.

Ключевые слова: динамическая дифракция, дисперсионный механизм, микродефекты.

У роботі проведено квантово-механічну кількісну аналізу можливостей підвищення чутливості й інформативності картини багаторазового розсіяння до недосконалостей структури кристалів через використання дисперсійних ефектів колосального посилення структурно чутливих залежностей дифракційної картини від різних умов дифракції. Встановлено появу через дисперсійний механізм ефектів взаємопов'язаності зазначених залежностей картини від різних умов між собою та із залежностями від характеристик дефектів і в результаті зміни вибірковості чутливості цих залежностей до дефектів якогось типу при варіації умов дифракції. Це істотно розширило можливості застосування цілеспрямовано комбінованого оброблення дифрактометричних даних у різних умовах дифракції для підвищення інформативності багатопараметричної діагностики.

Ключові слова: динамічна дифракція, дисперсійний механізм, мікродефекти.

In this work, the quantum-mechanical quantitative analysis of features to increase the sensitivity and informativeness of multiple-scattering pattern to the imperfections of the crystal structure due to the use of dispersion effects of enormous diffraction-pattern structure dependence gain on various diffraction conditions are performed. The effects of interconnection of these patterns dependences on various diffraction conditions between themselves and with dependences on the defects' characteristics and the changes in the selective sensitivity to the defects under variation of diffraction conditions are revealed. As shown, these effects are caused by dispersion mechanism. That substantially increases the possibilities of using the purposefully combined diffractometric data given at various diffraction conditions to increasing the informativeness of multiparametric diagnostics.

Key words: dynamical diffraction, dispersion mechanism, microdefects.

(Получено 25 сентября 2015 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

В работах [1–14] раскрыта дисперсионная природа и показаны возможности дисперсионного принципиально нового уровня повышения показателей чувствительности и информативности диагностики. В частности, в работах [7, 8] предложена модель, которая позволяет проводить количественный анализ вкладов различных дисперсионных эффектов в улучшение диагностических возможностей различных методов дисперсионной дифрактометрии как высоко-разрешающей, так и интегральной дисперсионной дифрактометрии при произвольных толщинах образцов. Ниже проведено обобщение

этой модели также и на случаи многослойных систем.

2. МОДЕЛЬ ПОЛНОЙ ИНТЕГРАЛЬНОЙ ИНТЕНСИВНОСТИ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ В МНОГОСЛОЙНЫХ СИСТЕМАХ

Схема многослойной структуры и дифрагированных лучей в геометрии Брэгга представлена на рис. 1. Система уравнений для амплитуд j -го слоя:

$$\begin{aligned} (-2\varepsilon_{0j} + \chi_{0j} + \Delta\chi_{00j})D_{0j} + (CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0Hj})D_{Hj} &= 0, \\ (CE\chi_H + \Delta\chi_{H0j})D_{0j} + (-2\varepsilon_{Hj} + \chi_{0j} + \Delta\chi_{HHj})D_{Hj} &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

откуда связь между амплитудами падающей и отражённой волн:

$$\begin{aligned} D_{Hj}^{(\delta)} &= c_j^{(\delta)} D_{0j}^{(\delta)}, \quad (2) \\ c_j^{(\delta)} &= \sqrt{b_j \kappa_j} (y_j + (-1)^\delta \sqrt{y_j^2 - 1}), \quad \kappa_j = \chi_{Hj} / \chi_{-Hj}, \quad b_j = \gamma_{0j} / |\gamma_{Hj}|, \\ \gamma_{0j} &= \sin(\theta_{Bj} - \psi), \quad \gamma_{Hj} = -\sin(\theta_{Bj} + \psi), \quad \theta_{Bj} = \theta_B + \Delta\theta_{sj}, \\ \Delta\theta_{sj} &= (\varepsilon_{j\perp} \cos^2 \psi + \varepsilon_{j\parallel} \sin^2 \psi) \operatorname{tg} \theta_B + \operatorname{sgn}(1 - b_j) (\varepsilon_{j\perp} - \varepsilon_{j\parallel}) \sin \psi \cos \psi, \\ y_j &= (\alpha_j - \alpha_{0j}) \sqrt{b_j} / \sigma_j, \quad \sigma_j^2 = C^2 E_j^2 \chi_{Hj} \chi_{-Hj}, \\ \alpha_j &= (\mathbf{K} + \mathbf{H}_j) \Delta \mathbf{H}_j / K^2 = -\Delta \theta_j \sin(2\theta_{Bj}), \quad \Delta \theta_j = \Delta \theta + \Delta \theta_{sj}, \\ 2\alpha_{0j} &= \chi_{0j} + \Delta\chi_{HHj} + (\chi_{0j} + \Delta\chi_{00j}) / b_j, \quad \Lambda_j = \lambda \sqrt{|\gamma_{0j}| |\gamma_{Hj}|} / \sigma_j, \end{aligned}$$

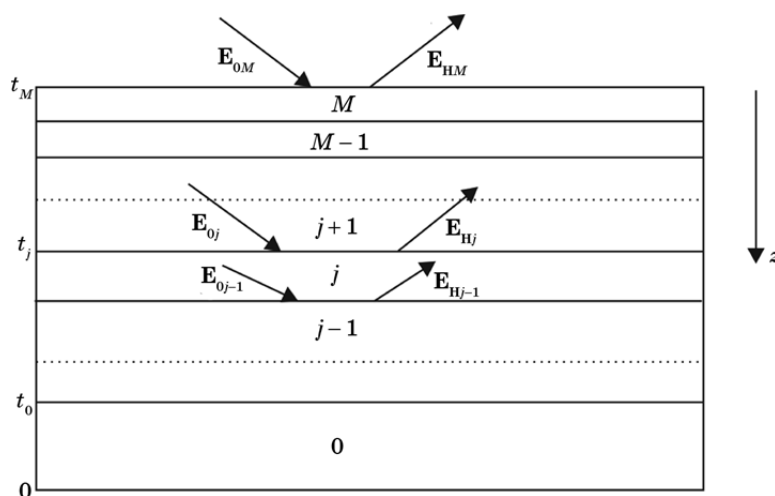


Рис. 1. Схема многослойной кристаллической системы.

Fig. 1. Scheme of multilayer crystal system.

где учтено, что $\Delta\chi_{0\text{H}j} \approx 0$ и $\Delta\chi_{\text{H}0j} \approx 0$, $\Delta\chi_{00j} = \Delta\chi_{\text{H}j} = \mu_{\text{ds}j}(\Delta\theta) / K$, θ_{B} — угол Брэгга подложки, ψ — угол асимметрии, $\varepsilon_{j\perp}$, $\varepsilon_{j\parallel}$ — перпендикулярная и параллельная компоненты деформации j -го слоя.

Для нахождения амплитуд падающей и отражённой волн, необходимо уравнение (2) дополнить граничными условиями для соответствующих волн:

$$D_{\text{T}j}(\mathbf{r}) = \sum_{\delta} D_{0j}^{(\delta)} e^{-i\mathbf{K}_{0j}^{(\delta)} \mathbf{r}} = E_{0j} e^{-i\mathbf{K}'_{0j+1} \mathbf{r}} \Big|_{z=t_j}, \quad (3)$$

$$D_{\text{S}j}(\mathbf{r}) = \sum_{\delta} D_{\text{H}j}^{(\delta)} e^{-i\mathbf{K}_{\text{H}j}^{(\delta)} \mathbf{r}} = E_{\text{H}j-1} e^{-i\mathbf{K}'_{\text{H}j-1} \mathbf{r}} \Big|_{z=t_{j-1}}. \quad (4)$$

Учитывая, что $\mathbf{K}_{0j}^{(\delta)} = \mathbf{K}'_{0j+1} + K\Delta_j^{(\delta)} \mathbf{n}$ на поверхности t_j , и $\mathbf{K}_{\text{H}j}^{(\delta)} = \mathbf{K}'_{\text{H}j-1} + K\Delta_j^{(\delta)} \mathbf{n}$ на поверхности t_{j-1} , а также уравнение (2), получим следующую систему уравнений для падающих волн в j -ом слое:

$$\begin{cases} D_{0j}^{(1)} e^{-iK\Delta_j^{(1)} t_j} + D_{0j}^{(2)} e^{-iK\Delta_j^{(2)} t_j} = E_{0j}, \\ c_j^{(1)} D_{0j}^{(1)} e^{-iK\Delta_j^{(1)} t_{j-1}} + c_j^{(2)} D_{0j}^{(2)} e^{-iK\Delta_j^{(2)} t_{j-1}} = E_{\text{H}j-1}, \end{cases} \quad (5)$$

$$\Delta_j^{(\delta)} = \frac{1}{2\gamma_{0j}} (\chi_{0j} + \Delta\chi_{00j}^{(\delta)}) + \frac{\lambda}{2\Lambda_j} [y_j + (-1)^\delta \sqrt{y_j^2 - 1}].$$

Решение этой системы уравнений даёт следующее выражение для амплитуд падающих волн:

$$D_{0j}^{(\delta)} = \frac{E_{0j} c_j^{(\delta')} - E_{\text{H}j-1} e^{iK\Delta_j^{(\delta')} d_j}}{c_j^{(\delta')} e^{iK\Delta_j^{(\delta')} d_j} - c_j^{(\delta)} e^{iK\Delta_j^{(\delta)} d_j}} e^{iK\Delta_j^{(\delta)} t_{j-1}}, \quad \delta' \neq \delta, \quad \delta, \delta' = 1, 2, \quad d_j = t_{j-1} - t_j. \quad (6)$$

Запишем третье граничное условие для рассеянной волны на поверхности $z = t_j$:

$$D_{\text{S}j} = \sum_{\delta} D_{\text{H}j}^{(\delta)} e^{-i\mathbf{K}_{\text{H}j}^{(\delta)} \mathbf{r}} = E_{\text{H}j} e^{-i\mathbf{K}'_{\text{H}j+1} \mathbf{r}} \Big|_{z=t_j}. \quad (7)$$

Учитывая, что $\mathbf{K}_{\text{H}j}^{(\delta)} = \mathbf{K}'_{\text{H}j+1} + K\Delta_j^{(\delta)} \mathbf{n}$ на поверхности $z = t_j$, и подставляя (2) и (6) в (7), для $E_{\text{H}j}$ получим:

$$E_{\text{H}j} = \sum_{\delta} D_{\text{H}j}^{(\delta)} e^{-iK\Delta_j^{(\delta)} t_j} = \eta_j E_{0j} + \rho_j E_{\text{H}j-1}, \quad (8)$$

где

$$\eta_j = b\kappa_j \sum_{\delta} \frac{e^{iK\Delta_j^{(\delta)} d_j}}{A_j^{(\delta)}}, \quad \rho_j = -e^{iK(\Delta_j^{(1)} + \Delta_j^{(2)}) d_j} \sum_{\delta} \frac{c_j^{(\delta)}}{A_j^{(\delta)}},$$

$$A_j^{(\delta)} = c_j^{(\delta')} e^{iK\Delta_j^{(\delta')} d_j} - c_j^{(\delta)} e^{iK\Delta_j^{(\delta)} d_j}.$$

Заменив в (8) индекс j на $j-1$, получим:

$$E_{\text{H}j-1} = \eta_{j-1} E_{0j-1} + \rho_{j-1} E_{\text{H}j-2},$$

подставив это выражение в правую часть (8), получим:

$$E_{\text{H}j}(2) = \eta_j E_{0j} + \eta_{j-1} \rho_j E_{0j-1} + \rho_j \rho_{j-1} E_{\text{H}j-2}. \quad (8.1)$$

Тут обозначение в скобках $k = 2$ означает, что амплитуда волны, отражённой от j -го слоя, выражена через амплитуду волны, отражённой от $j - k = j - 2$ слоя.

Далее, подставим в (8) вместо j индекс $j - 2$ и подставим полученное выражение в правую часть (8.1). Получим:

$$E_{\text{H}j}(3) = \eta_j E_{0j} + \eta_{j-1} \rho_j E_{0j-1} + \eta_{j-2} \rho_j \rho_{j-1} E_{0j-2} + \rho_j \rho_{j-1} \rho_{j-2} E_{\text{H}j-3}. \quad (8.2)$$

Продолжая подобную процедуру, можно заметить закономерность формирования слагаемых и множителей в них. В общем случае можно записать:

$$E_{\text{H}j}(k) = \sum_{i=0}^{k-1} \eta_{j-i} \left(\prod_{m=0}^{i-1} \rho_{j-m} \right) E_{0j-i} + \left(\prod_{m=0}^{k-1} \rho_{j-m} \right) E_{\text{H}j-k}, \quad (9)$$

где следует положить $\prod_{m=0}^N x_m = 1$ при $N < 0$.

Для нахождения амплитуд E_{0j-i} , которые входят в (9), запишем четвёртое граничное условие для j -го слоя:

$$D_{Tj} = \sum_{\delta} D_{0j}^{(\delta)} e^{-i\mathbf{K}_0^{(\delta)} \mathbf{r}} = E_{0j-1} e^{-i\mathbf{K}'_{0j-1} \mathbf{r}} \Big|_{z=t_{j-1}}. \quad (10)$$

Учитывая, что $\mathbf{K}'_{0j-1} = \mathbf{K}_{0j}^{(\delta)} - K \Delta_j^{(\delta)} \mathbf{n}$ на поверхности $z = t_{j-1}$, и подставляя (6) в (10), получим:

$$E_{0j-1} = \omega_j E_{0j} - \psi_j E_{\text{H}j-1}, \quad (11)$$

где

$$\omega_j = \sum_{\delta} \frac{c_j^{(\delta')}}{A_j^{(\delta)}}, \quad \psi_j = \sum_{\delta} \frac{e^{iK \Delta_j^{(\delta)} d_j}}{A_j^{(\delta)}}.$$

Уравнения (11) и (8) составляют систему рекуррентных уравнений для амплитуд падающей и отражённой волн. Из (11) следует:

$$E_{\text{H}j-1} = \frac{1}{\psi_j} (\omega_j E_{0j} - E_{0j-1}) \quad \text{и} \quad E_{\text{H}j} = \frac{1}{\psi_{j+1}} (\omega_{j+1} E_{0j+1} - E_{0j}).$$

Подставив эти уравнения в (8), получим:

$$E_{0j} = a_{j-1}E_{0j-1} + b_{j-2}E_{0j-2}, \quad (12)$$

$$a_j = \frac{\Psi_{j+1}}{\omega_{j+1}} \left(\eta_j + \frac{\rho_j \omega_j}{\Psi_j} + \frac{1}{\Psi_{j+1}} \right), \quad b_j = -\frac{\rho_{j+1} \Psi_{j+2}}{\Psi_{j+1} \omega_{j+2}}.$$

Итак, найдено рекуррентное соотношение (12) для E_{0j} . Однако, для нахождения амплитуд в произвольном слое из рекуррентной формулы (12) необходимо иметь два начальных значения для амплитуд падающей волны. В то же время известны первое и последнее значения. Одно из них является амплитудой падающей на кристалл волны в вакууме E_{0M} , а другое — амплитудой падающей волны на выходящей поверхности кристалла, которая в случае геометрии Брэгга в приближении толстого кристалла равняется нулю, т.е. $E_{0-1} = 0$ (согласно обозначениям на рис. 1.).

Преобразуя формулу (12) аналогично тому, как выводилась формула (9), можно выразить амплитуду падающей на подложку волны через амплитуду волны, падающей на кристалл в вакууме. Подставим в (12) вместо j последовательно $j-1, j-2, j-3$. В результате получим:

$$E_{0j}(1) = a_{j-1}E_{0j-1} + b_{j-2}E_{0j-2},$$

$$E_{0j}(2) = (a_{j-1}a_{j-2} + b_{j-2})E_{0j-2} + a_{j-1}b_{j-3}E_{0j-3},$$

$$E_{0j}(3) = [(a_{j-1}a_{j-2} + b_{j-2})a_{j-3} + a_{j-1}b_{j-3}]E_{0j-3} + (a_{j-1}a_{j-2} + b_{j-2})b_{j-4}E_{0j-4},$$

$$E_{0j}(4) = [(a_{j-1}a_{j-2} + b_{j-2})a_{j-3} + a_{j-1}b_{j-3}]a_{j-4} + (a_{j-1}a_{j-2} + b_{j-2})b_{j-4}E_{0j-4} +$$

$$+ [(a_{j-1}a_{j-2} + b_{j-2})a_{j-3} + a_{j-1}b_{j-3}]b_{j-5}E_{0j-5}.$$

В общем случае, отметив соответствующую закономерность, получим:

$$E_{0j}(k) = c_{j,k}E_{0j-k} + c_{j,k-1}b_{j-k-1}E_{0j-k-1}, \quad (13)$$

где коэффициенты $c_{j,k}$ определяются рекуррентным соотношением:

$$c_{j,k} = a_{j-k}c_{j,k-1} + b_{j-k}c_{j,k-2} \quad (14)$$

с граничными условиями: $c_{j1} = a_{j-1}$, $c_{j2} = a_{j-1}a_{j-2} + b_{j-2}$.

Подставив в (13) $j = M$, получим выражение, которое связывает падающую волну в вакууме с амплитудами падающих волн в двух произвольных соседних слоях (заданных индексом k):

$$E_{0M}(k) = c_{M,k}E_{0M-k} + c_{M,k-1}b_{M-k-1}E_{0M-k-1}. \quad (15)$$

Если в (15) взять $k = M$, тогда:

$$E_{0M}(M) = c_{M,M}E_{00} + c_{M,M-1}b_{-1}E_{0,-1}.$$

Поскольку для амплитуды падающей волны, которая в геометрии Брэгга выходит с противоположной стороны кристалла, $E_{0,-1} = 0$, получаем:

$$E_{0M}(M) = c_{M,M}E_{00}. \quad (16)$$

Выражение (16) связывает между собой падающие волны в вакууме и в подложке. Коэффициент $c_{M,M}$ является последним членом рекуррентного соотношения

$$c_{M,k} = a_{M-k}c_{M,k-1} + b_{M-k}c_{M,k-2}$$

с граничными условиями $c_{M1} = a_{M-1}$, $c_{M2} = a_{M-1}a_{M-2} + b_{M-2}$ и зависит от характеристик всех слоёв.

Из (16) получаем для падающей на подложку волны:

$$E_{00} = \frac{E_{0M}(M)}{c_{M,M}} = \frac{E_0}{c_{M,M}}. \quad (17)$$

Выражение (17) вместе с $E_{0,-1} = 0$ являются двумя искомыми начальными условиями для рекуррентного соотношения (12).

Подставляя эти начальные условия в (12), получим выражения для нескольких первых значений:

$$E_{00} = \frac{E_0}{c_{M,M}}, \quad E_{01} = a_0 \frac{E_0}{c_{M,M}}, \quad E_{02} = (a_0 a_1 + b_0) \frac{E_0}{c_{M,M}},$$

$$E_{03} = [a_2(a_0 a_1 + b_0) + b_1 a_0] \frac{E_0}{c_{M,M}},$$

$$E_{04} = (a_3[a_2(a_0 a_1 + b_0) + b_1 a_0] + b_2(a_0 a_1 + b_0)) \frac{E_0}{c_{M,M}}.$$

Заметив закономерность, в общем случае можно записать:

$$E_{0j} = \phi_j \frac{E_0}{c_{M,M}}, \quad (18)$$

где ϕ_j определяется рекуррентным соотношением:

$$\phi_j = a_{j-1}\phi_{j-1} + b_{j-2}\phi_{j-2}$$

с начальными условиями $\phi_0 = 1$, $\phi_1 = a_0$.

Подставив (18) в (9,) получим:

$$E_{Hj}(k) = \frac{E_0}{c_{M,M}} \sum_{i=0}^{k-1} \eta_{j-i} \left(\prod_{m=0}^{i-1} \rho_{j-m} \right) \phi_{j-i} + \left(\prod_{m=0}^{k-1} \rho_{j-m} \right) E_{Hj-k}. \quad (19)$$

Взяв в (19) $j = M$, получим слева амплитуду отражённой от кристалла волны в вакууме, которая связана с амплитудой волны, отражённой от $(M - k)$ -го слоя. Известно, что амплитуда отражённой волны на обратной стороне кристалла в геометрии Брэгга равна нулю ($E_{H, -1} = 0$). Учитывая это, и подставляя в (19) также $k = M + 1$, получим:

$$E_{HM}(M + 1) = \frac{E_0}{c_{M,M}} \sum_{i=0}^M \eta_{M-i} \left(\prod_{m=0}^{i-1} \rho_{M-m} \right) \phi_{M-i}.$$

Для дифференциальной отражательной способности получим:

$$R_{\text{coh}}(\Delta\theta) = \frac{1}{b} \left| \frac{E_{HM}(M + 1)}{E_0} \right|^2 = \frac{1}{b |c_{M,M}|^2} \left| \sum_{j=0}^M r_{\text{coh},j}(\Delta\theta_j) \right|^2, \quad (20)$$

$$r_{\text{coh},j}(\Delta\theta_j) = \eta_{M-j} \left(\prod_{m=0}^{j-1} \rho_{M-m} \right) \phi_{M-j}.$$

Для интегральной интенсивности получим:

$$R_{\text{coh}}^i = \frac{1}{b} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{|c_{M,M}|^2} \left| \sum_{j=0}^M r_{\text{coh},j}(\Delta\theta_j) \right|^2 d(\Delta\theta).$$

3. ПОЛУЧЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На основе построенной обобщённой модели дисперсионно чувствительной дифрактометрии неидеальных кристаллов произвольной толщины проведён анализ дифференциальных и интегральных картин рассеяния для широкого интервала эффективных толщин кристалла.

На рисунке 2 представлены толщинные зависимости полной интегральной интенсивности динамической дифракции (ПИИДД) для несовершенных кристаллов с различными дефектными структурами, нормированные (рис. 2, а-в) и не нормированные (рис. 2, г) на соответствующую зависимость для совершенного кристалла. На графиках рис. 2, а и г кроме толщинной зависимости ПИИДД представлены также аналогичные зависимости брэгговской и диффузной составляющих ПИИДД. Фиттированием экспериментальной толщинной зависимости (рис. 2, а) получены следующие параметры дефектной структуры исследуемого кристалла Si: сферические кластеры Cu_3Si

с деформацией на границе кластера $\varepsilon = 0,13$, радиусом $R_p = 0,02$ мкм и концентрацией $c_p = 9 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ ($L_H = 0,018$). Отметим, что данный метод позволяет надёжно фиксировать рекордно низкие концентрации дефектов кулоновского типа.

Расчёты для различных дефектных структур рассмотренного кристалла Si демонстрируют высокую чувствительность толщинных зависимостей ПИИДД к изменению, как типа (радиуса) дефектов, так и их концентрации. Чувствительность к типу дефекта демон-

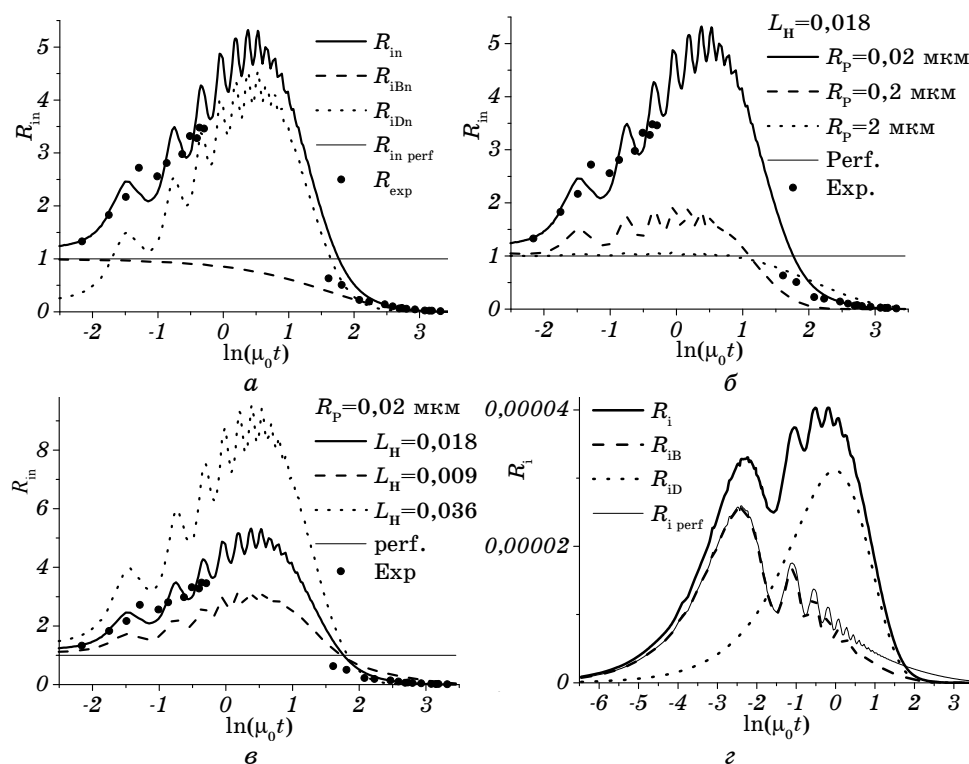


Рис. 2. Теоретические (сплошные линии) и экспериментальные (маркеры) толщинные зависимости нормированной ПИИДД (R_{in}) (а-в) и её брэгговской (R_{iBn}) и диффузной (R_{iDn}) составляющих (а), а также не нормированная на интегральную интенсивность идеального кристалла зависимость ПИИДД (R_i) и её составляющие (г) для монокристаллов Si с различной дефектной структурой (Лауэ-дифракция, рефлекс (220)).

Fig. 2. Theoretical (solid line) and experimental (markers) thickness dependences of normalized on integral intensity of perfect crystal the total integral intensity of dynamical diffraction (TIIDD) (R_{in}) for single Si crystal with various defect structures (а-в) and its Bragg (R_{iBn}) and diffuse (R_{iDn}) components (а), as well as the thickness dependence of non-normalized TIIDD (R_i) and its components (г) (Laue-diffraction, reflex (220)).

стрирует рис. 2, б, где представлены расчёты для кластеров с радиусами $R_p = 0,02, 0,2, 2$ мкм при одинаковых значениях $L_H = 0,018$, т.е. при $c_p = 9 \cdot 10^{10}, 3,8 \cdot 10^9, 1,2 \cdot 10^6$ см⁻³ соответственно, а к концентрации дефектов — рис. 2, в, где представлены расчёты для кластеров с $R_p = 0,02$ мкм и концентрациями в два раза меньше ($L_H = 0,009$) и в два раза больше ($L_H = 0,036$) восстановленной из эксперимента концентрации $c_p = 9 \cdot 10^{10}$ см⁻³ ($L_H = 0,018$).

Кроме того, из рис. 2 видно, что существенные отклонения (их знак и величина) ПИИДД несовершенного кристалла от соответствующей интенсивности в совершенном кристалле подтверждаются экспериментально и обуславливаются результатом конкуренции разных составляющих дисперсионного механизма, которые влияют на соотношение брэгговской и диффузной компонент ПИИДД и зависят от условий дифракции (в частности, от эффективной толщины). Так, для динамически тонких кристаллов ($\mu t \sim 1$) наблюдается увеличение ПИИДД до 400% за счёт дисперсионного эффекта аномального роста вклада диффузной составляющей. При этом для динамически толстых кристаллов ($\mu t \gg 1$) ПИИДД уменьшается на 1–2 порядка величины за счёт определяющего вклада увеличения дисперсионных интерференционного поглощения и эффекта экстинкции.

При этом зависимости от толщины и их чувствительность к несовершенствам структуры отдельно для брэгговской и диффузной составляющих ПИИДД существенно отличаются (даже знаком) между собой и демонстрируют радикально повышенную чувствительность к дефектам в сравнении с чувствительностью непосредственно самой ПИИДД. Это свидетельствует о целесообразности использования методов именно трёхкристальной интегральной дифрактометрии.

Таким образом, показано, что максимальная информативность и чувствительность к дефектам за счёт роста вклада диффузной составляющей ПИИДД наблюдается в области промежуточных значений эффективной толщины кристалла, где в результате дефекты первого класса по Кривоглазу проявляются в динамической картине, как дефекты второго класса. При дальнейшем увеличении эффективной толщины кристалла изменяется характер дисперсионного влияния дефектов от их определяющего влияния на отражательные способности к определяющей роли их влияния на поглощательную способность. При этом в первом случае дефекты обеспечивают за счёт указанного увеличения вклада диффузной составляющей значительное повышение полной отражательной способности кристалла с ростом его неидеальности, т.е. общее повышение дифрагированной интенсивности. При увеличении толщины переход к определяющей роли поглощательной способности приводит к изменению знака влияния дефектов на картину рассеяния, а именно к общему существенному уменьшению дифрагированной интенсивности с ростом неидеальности кристалла, которое обеспечивается соответствующим

дисперсионным влиянием неидеальностей за счёт динамического фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера на интерференционные коэффициенты поглощения брэгговской и диффузной составляющих и на коэффициенты их экстинкции за счёт эффектов многократности рассеяния на неидеальностях структуры кристаллов.

Результаты, представленные на рис. 3, дали возможность установить, дисперсионный эффект взаимосвязанности влияний различных условий дифракции на картину рассеяния, а именно, что на характер толщинной зависимости ПИИДД существенно влияют другие условия дифракции, в частности, использование жёсткого излучения $WK_{\alpha 1}$ и больших векторов дифракции (333) позволяет повысить чувствительность ПИИДД к дефектам за счёт дисперсионного эффекта аномального повышения вклада диффузной составляющей на четыре порядка величины для динамически тонких кристаллов и дополнительно повысить её ещё на 1–2 порядка при переходе к мягкому излучению ($CuK_{\alpha 1}$) и понижения ПИИДД неидеальных кристаллов относительно соответствующего случая полностью идеальных кристаллов за счёт относительного повышения интерференционного поглощения и эффектов экстинкции. При этом эффект усиления чувствительности к несовершенствам структуры толщинных зависимостей ПИИДД за счёт изменения длины волны излучения может дополнительно усиливаться при переходе к отражениям с более высокими индексами, т.е. может управляться выбором рефлексов или геометрии дифракции.

Таким образом, используя различные условия дифракции (о комбинации различных методов см. [15]), можно достигнуть повышения диапазона изменений величины ПИИДД до 5–6 порядков величины.

Проведённый анализ рис. 3 позволил сделать заключение, что с изменением условий дифракции изменяются определяющие механизмы дисперсионных эффектов и соотношения вкладов брэгговской и диффузной составляющих и вкладов от дефектов разного типа, и это приводит к радикальному усилению и к изменению характера (даже знака) влияния дефектов на динамическую картину рассеяния, т.е. дефекты могут как уменьшать, так и повышать интенсивность рассеяния в какой-либо точке пространства обратной решётки, как и интегральную интенсивность, в сравнении с таковой в идеальном кристалле и при этом очень существенно (на порядки величины). Отличия взаимосвязанных зависимостей всех перечисленных дисперсионных эффектов от характеристик дефектов разного типа так же, как и от условий дифракции, обеспечивают уникально чувствительную к характеристикам дефектов многообразность (подтверждённую экспериментально) динамической картины, обусловленную взаимосвязанной зависимостью от условий дифракции характера результирующего влияния дефектов разного типа на картину рассеяния, и обуславливают качественно новые

функциональные возможности информативности диагностики, в частности, возможность однозначной высокочувствительной многопараметрической дифрактометрии.

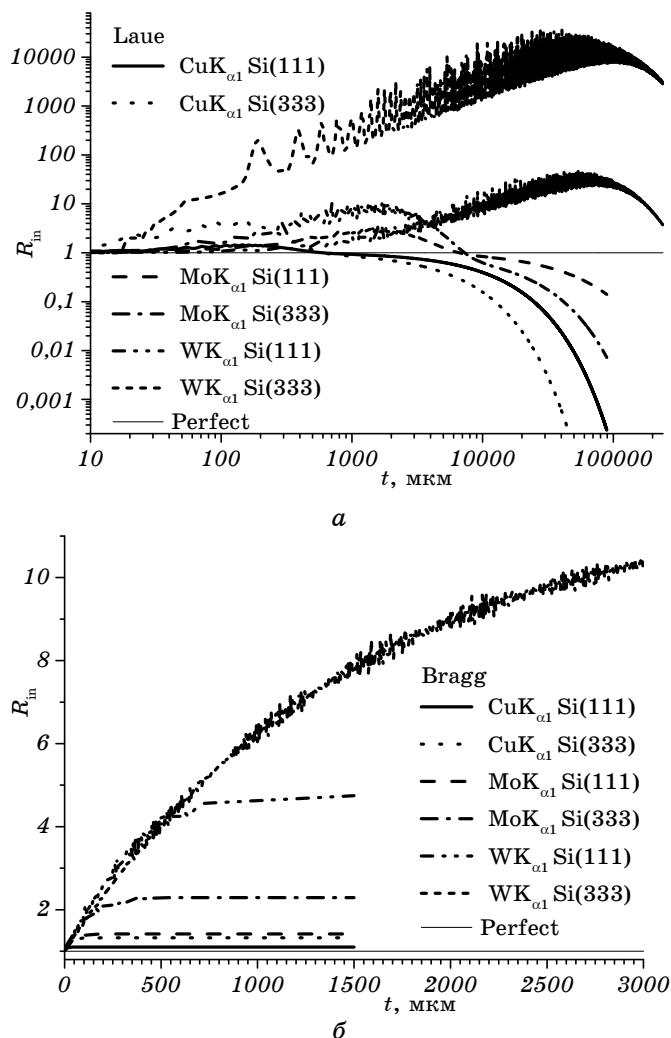


Рис. 3. Влияние на зависимость от эффективной толщины ПИИДД других условий дифракции: длины волны, отражения и геометрии дифракции. Кластеры SiO_2 в монокристалле Si: $R_p = 0,01$, $c_p = 6,91 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ ($L_{111} = 0,001$, $L_{333} = 0,0085$).

Fig. 3. Influence on TIIDD dependence from effective thickness of other diffraction conditions: wave length, reflex, and geometry of diffraction. Clusters SiO_2 in single Si crystal: $R_p = 0.01$, $c_p = 6.91 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ($L_{111} = 0.001$, $L_{333} = 0.0085$).

Полученные результаты демонстрируют, что установленная природа (дисперсионный механизм) уникальной чувствительности к дефектам взаимосвязанных зависимостей от условий дифракции динамической картины, что наблюдается на эксперименте, может быть использована при решении проблемы однозначной диагностики структурного совершенства многопараметрических систем путём применения комбинированного подхода при обработке экспериментальных картин рассеяния в целенаправленно выбранных (на основе анализа особенностей проявления дисперсионного механизма в зависимости от типа дефектов и методов дифрактометрии) условиях динамической дифракции.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в работе установлены дисперсионные эффекты взаимосвязанности и колоссального усиления зависимостей картины многократного рассеяния от разных условий дифракции, которые оказались взаимосвязанными как между собой, так и с зависимостями картины рассеяния от характеристик несовершенств структуры. Это обеспечило возможность целенаправленного изменения избирательности чувствительности этих зависимостей к дефектам одного или другого типа при вариации остальных условий дифракции и в результате радикальное улучшение показателей чувствительности и информативности диагностики и решило проблему неразрушающей диагностики структурного совершенства многопараметрических систем.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. 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).
2. 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, В. В. Молодкин, Е. В. Фузик, *Успехи физики металлов*, **15**, № 2: 55 (2014).
3. 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).
4. 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. Толмачев, Р. В. Лехняк, Л. Н. Скапа, Н. П. Ирха, *Металлофиз. новейшие технол.*, **36**, № 9: 1271 (2014).
5. В. Б. Молодкин, В. В. Лизунов, С. В. Лизунова, Е. С. Скакунова, С. В. Дмитриев, Б. В. Шелудченко, С. М. Бровчук, Л. Н. Скапа, *Наноразмерные системы и наноматериалы: состояние и перспективы развития исследований в Украине* (Киев: Академперіодика: 2014), с. 253.

6. 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. Толмачев, Р. В. Лехняк, Л. Н. Скапа, Н. П. Ирха, *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии*, **12**, № 3: 565 (2014).
7. В. В. Лизунов, Е. В. Кочелаб, Е. С. Скакунова, Е. Г. Лень, В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, Н. Г. Толмачёв, Б. В. Шелудченко, С. В. Лизунова, Л. Н. Скапа, *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии*, **13**, № 1: 99 (2015).
8. В. В. Лизунов, Е. В. Кочелаб, Е. С. Скакунова, Е. Г. Лень, В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, Н. Г. Толмачёв, Б. В. Шелудченко, С. В. Лизунова, Л. Н. Скапа, *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии*, **13**, № 2: 349 (2015).
9. В. В. Лизунов, В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, С. В. Лизунова, Н. Г. Толмачев, А. И. Низкова, Е. С. Скакунова, С. В. Дмитриев, Б. В. Шелудченко, Я. В. Василик, Т. Г. Сыч, Е. В. Фузик, Р. В. Лехняк, Л. Н. Скапа, *Металлофиз. новейшие технол.*, **37**, № 2: 265 (2015).
10. В. Б. Молодкин, В. Ю. Сторіжко, В. В. Лизунов, С. В. Лизунова, М. Г. Толмачов, Л. М. Скапа, К. В. Фузик, В. В. Молодкин, О. С. Скакунова, Б. В. Шелудченко, С. В. Дмитриев, Е. В. Кочелаб, Р. В. Лехняк, *Успехи физики металлов*, **16**, № 2: 159 (2015).
11. О. С. Скакунова, С. Й. Оліховський, В. Б. Молодкин, Е. Г. Лень, Є. М. Кисловський, О. В. Решетник, Т. П. Владімірова, С. В. Кочелаб, В. В. Лизунов, С. В. Лизунова, В. Л. Маківська, М. Г. Толмачов, Л. М. Скапа, Я. В. Василик, К. В. Фузик, *Металлофиз. новейшие технол.*, **37**, № 3: 409 (2015).
12. V. V. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. S. Skakunova, E. G. Len, E. N. Kislovskii, O. V. Reshetnyk, T. P. Vladimirova, V. V. Lizunov, L. N. Skapa, S. V. Lizunova, E. V. Fuzik, N. G. Tolmachev, B. K. Ostafiychuk, V. M. Pylypiv, and O. Z. Garpul', *Металлофиз. новейшие технол.*, **37**, № 8: 1017 (2015).
13. С. В. Дмитриев, Р. В. Лехняк, В. Б. Молодкин, В. В. Лизунов, Л. Н. Скапа, Е. С. Скакунова, С. В. Лизунова, С. И. Олиховский, Е. Г. Лень, Н. Г. Толмачев, Б. В. Шелудченко, Е. В. Фузик, Г. О. Велиховский, *Металлофиз. новейшие технол.*, **37**, № 9: 1169 (2015).
14. В. Б. Молодкин, В. Ю. Сторіжко, С. В. Лизунова, Б. В. Шелудченко, В. В. Лизунов, М. Г. Толмачов, Є. М. Кисловський, С. Й. Оліховський, С. О. Вершинський, В. Л. Денисенко, К. В. Фузик, Г. О. Велиховський, Р. В. Лехняк, Є. Г. Лень, Л. М. Скапа, С. М. Бровчук, *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии*, **13**, № 3: 469 (2015).
15. 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. stat. sol. (a)*, **204**, No.8: 2651 (2007).

REFERENCES

1. V. V. Lizunov, V. B. Molodkin, S. V. Lizunova, N. G. Tolmachev, E. S. Skakunova, S. V. Dmitriev, B. V. Sheludchenko, S. M. Brovchuk, L. N. Skapa, R. V. Lekhnyak, and E. V. Fuzik, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **36**, No. 7: 857 (2014) (in Russian).
2. V. V. Lizunov, V. B. Molodkin, S. V. Lizunova, N. G. Tolmachev, E. S. Skakunova, S. V. Dmitriev, B. V. Sheludchenko, S. M. Brovchuk, L. N. Skapa, R. V. Lekhnyak, V. V. Molodkin, and E. V. Fuzik, *Uspehi Fiziki Metallov*, **15**, No. 2: 55 (2014)

- (in Russian).
3. 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, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **36**, No. 8: 1035 (2014).
 4. V. V. Lizunov, S. M. Brovchuk, A. I. Nizkova, V. B. Molodkin, S. V. Lizunova, B. V. Sheludchenko, G. I. Grankina, I. I. Rudnitska, S. V. Dmitriev, M. G. Tolmachev, R. V. Lekhnyak, L. M. Skapa, and N. P. Irha, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **36**, No. 9: 1271 (2014) (in Russian).
 5. V. B. Molodkin, V. V. Lizunov, S. V. Lizunova, E. S. Skakunova, S. V. Dmitriev, B. V. Sheludchenko, S. M. Brovchuk, and L. N. Skapa, *Nanorazmernye Sistemy i Nanomaterialy: Sostoyanie i Perspektivy Razvitiya Issledovaniy v Ukraine [Nanoscale systems and Nanomaterials: State and Perspectives of Investigation Development in Ukraine]* (Kyiv: Akadempriodika: 2014), p. 253 (in Russian).
 6. V. V. Lizunov, S. M. Brovchuk, A. I. Nizkova, V. B. Molodkin, S. V. Lizunova, B. V. Sheludchenko, G. I. Grankina, I. I. Rudnytska, S. V. Dmitriev, M. G. Tolmachov, R. V. Lekhnyak, L. M. Skapa, and N. P. Irha, *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*, **12**, No. 3: 565 (2014) (in Russian).
 7. V. V. Lizunov, E. V. Kochelab, O. S. Skakunova, E. G. Len, V. B. Molodkin, S. J. Olikhovs'kyi, M. G. Tolmachov, B. V. Sheludchenko, S. V. Lizunova, and L. M. Skapa, *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*, **13**, No. 1: 99 (2015) (in Russian).
 8. V. V. Lizunov, E. V. Kochelab, O. S. Skakunova, E. G. Len, V. B. Molodkin, S. J. Olikhovs'kyi, M. G. Tolmachov, B. V. Sheludchenko, S. V. Lizunova, and L. M. Skapa, *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*, **13**, No. 2: 349 (2015) (in Russian).
 9. V. V. Lizunov, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, S. V. Lizunova, N. G. Tolmachev, H. I. Nizkova, O. S. Skakunova, S. V. Dmitriev, B. V. Sheludchenko, Ya. V. Vasylyk, T. G. Sych, K. K. Fuzik, R. V. Lekhnyak, and L. M. Skapa, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **37**, No. 2: 265 (2015) (in Russian).
 10. V. B. Molodkin, V. E. Storizhko, V. V. Lizunov, S. V. Lizunova, M. H. Tolmachov, L. M. Skapa, K. V. Fuzik, V. V. Molodkin, O. S. Skakunova, B. V. Sheludchenko, S. V. Dmitriev, Ye. V. Kochelab, and R. V. Lekhnyak, *Uspehi Fiziki Metallov*, **16**, No. 2: 159 (2015) (in Ukrainian).
 11. O. S. Skakunova, S. I. Olikhovskii, V. B. Molodkin, E. G. Len, E. M. Kislovskii, O. V. Reshetnyk, T. P. Vladimirova, E. V. Kochelab, V. V. Lizunov, S. V. Lizunova, V. L. Makivs'ka, M. G. Tolmachov, L. M. Skapa, Ya. V. Vasylyk, and K. V. Fuzik, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **37**, No. 3: 409 (2015) (in Ukrainian).
 12. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. S. Skakunova, E. G. Len, E. N. Kislovskii, O. V. Reshetnyk, T. P. Vladimirova, V. V. Lizunov, L. N. Skapa, S. V. Lizunova, E. V. Fuzik, N. G. Tolmachev, B. K. Ostafiychuk, V. M. Pylypiv, and O. Z. Garpul', *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **37**, No. 8: 1017 (2015).
 13. S. V. Dmitriev, R. V. Lekhnyak, V. B. Molodkin, V. V. Lizunov, L. M. Skapa, O. S. Skakunova, S. V. Lizunova, S. I. Olikhovskii, E. G. Len, M. G. Tolmachov, B. V. Sheludchenko, K. V. Fuzik, and G. O. Velikhovskii, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **37**, No. 9: 1169 (2015) (in Russian).
 14. V. B. Molodkin, V. Yu. Storizhko, S. V. Lizunova, B. V. Sheludchenko, V. V. Lizunov, M. G. Tolmachov, E. M. Kyslovskiy, S. J. Olikhovskiy,

- S. O. Vershynskiy, V. L. Denysenko, K. V. Fuzik, G. O. Velikhovskiy, R. V. Lekhnyak, E. G. Len, L. M. Skapa, and S. M. Brovchuk, *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*, **13**, No. 3: 469 (2015) (in Ukrainian).
15. 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. stat. sol. (a)*, **204**, No.8: 2651 (2007).