

## **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-

### **Новые возможности интегральной динамической дифрактометрии несовершенств кристаллов**

В. В. Лизунов, В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, С. В. Лизунова,  
Н. Г. Толмачёв, 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

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

В предыдущей работе авторов [1] обсуждалось открытое ими неизвестное ранее явление управляемого условиями дифракции дисперсионного усиления на несколько порядков величины (в сравнении с традиционным кинематическим случаем диагностики) проявления дефектов в статистической картине динамического (многократного) рассеяния. Настоящая работа посвящена обсуждению наиболее важных следствий из этого открытого явления, которые обеспечили возникновение эффектов чувствительности (и при этом уникальной) к несовершенствам кристаллов полной (брэгговской и диффузной) интегральной интенсивности динамической дифракции (ПИИДД) и аномального вклада её диффузной составляющей, а также чувствительности к характеристикам дефектов появившихся сильных зависимостей ПИИДД от условий дифракции. Обсуждаются новые возможности и примеры использования измерений ПИИДД, вклада её диффузной составляющей и их зависимостей от различных условий динамической дифракции для неразрушающей экспрессной высокочувствительной и информативной диагностики несовершенств структуры многопараметрических систем.

В попередній роботі авторів [1] обговорювалося відкрите ними невідоме раніше явище керованого умовами дифракції дисперсійного підсилення на декілька порядків величини (в порівнянні з традиційним кінематичним випадком діагностики) прояву дефектів у статистичній картині динамічного (багаторазового) розсіяння. Дану роботу присвячено обговоренню найбільш важливих наслідків з цього відкритого явища, які забезпечили виникнення ефектів чутливості (і при цьому унікальної) до недосконалостей кристалів повної (Бреггової і дифузної) інтегральної інтенсив-

вности динамічної дифракції (ПІДД) і аномального внеску її дифузної складової, а також чутливості до характеристик дефектів виниклих сильних залежностей ПІДД від умов дифракції. Обговорюються нові можливості і приклади використання мірян ПІДД, внеску її дифузної складової та їх залежностей від різних умов динамічної дифракції для неруйнівної експресної високочутливої й інформативної діагностики недосконалостей структури багатопараметричних систем.

The phenomenon of dispersion amplification of defects' manifestation in the multiple dynamical scattering pattern was discovered by authors and discussed in [1]. This phenomenon is controlled by the diffraction conditions. Amplification comprises several orders of magnitude (in comparison with the kinematical case of diagnostics). The present work is concerned with discussion of the most important consequences of this phenomenon, which provide the appearance of effects of unique sensitivity of the total (Bragg and diffuse) integral intensity of the dynamical diffraction (TIIDD) to the crystal imperfections and the anomalous contribution of its diffuse component as well as sensitivity of appeared strong TIIDD dependences on the diffraction conditions. New opportunities and examples using the TIIDD measurements, contribution of its diffuse component, and their dependences on various conditions of dynamical diffraction for non-destructive express highly sensitive and informative diagnostics of imperfections of the structure of multiparametric systems are discussed.

**Ключевые слова:** интегральная динамическая дифрактометрия, многопараметрическая диагностика, микродефекты.

*(Получено 12 ноября 2014 г.)*

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В работе [1] обсуждены открытое авторами неизвестное ранее явление усиления на несколько порядков величины проявления дефектов в статистической картине многократного рассеяния, возможности использования этого явления, а также установленной авторами его дисперсионной природы. Отмечалось, что в отличие от статистической кинематической теории (приближение однократного рассеяния), в которой дефекты проявляют своё влияние только на амплитуды рассеянных волн (амплитуды рассеяния), при многократном (динамическом) рассеянии (вырожденный случай теории возмущений) дополнительно формируется принципиально новый механизм влияния искажений не на амплитуды, а на волновые векторы рассеянных волн. Обнаруженный механизм оказывается экспоненциально более эффективным за счёт влияния дефектов непосредственно на показатель экспоненты (на фазу волновой функции), а характер этого влияния дефектов становится управляемым условиями дифракции (длина волны, толщина объекта, геометрия

и углы дифракции и др.). Настоящая работа посвящена рассмотрению случая наиболее простой и экспрессной интегральной дифрактометрии, которая при переходе к динамическому рассеянию приобретает принципиально новые функциональные диагностические возможности. При этом обсуждаются установленные ранее авторами два закона сохранения (т.е. независимости от характеристик искажений кристаллов) главного параметра кинематической теории интегральных интенсивностей, а именно, полной (брэгговской и диффузной) интегральной интенсивности рассеяния, и сохранения (т.е. независимость от условий дифракции) ещё одного параметра кинематической теории интегральных интенсивностей, а именно, вклада диффузной составляющей в полную интегральную интенсивность. Демонстрируется, что эти законы оказываются справедливыми именно в случае кинематического рассеяния и существенно ограничивают чувствительность и информативность кинематической картины рассеяния. В тоже время обнаруженный дисперсионный механизм влияния дефектов на картину многократного рассеяния (за счёт их влияния на закон дисперсии) приводит к ориентационно-интерференционным эффектам в отражательной и поглощательной способностях кристаллов и обуславливает нарушение этих законов сохранения при переходе к случаям многократного рассеяния, что и обеспечивает уникальные показатели появившихся чувствительности и информативности диагностики на основе измерений полной интегральной интенсивности динамической дифракции и её диффузной составляющей, а также их зависимостей от дифракционных условий. В результате открытое явление и целый ряд являющихся следствием из него эффектов, а также их дисперсионная природа позволили авторам статьи существенно расширить функциональные возможности диагностики и создать целый ряд интегральных методов нового поколения, которые не только на несколько порядков величины повысили чувствительность в сравнении с традиционными методами, но и позволили решить проблему однозначной диагностики многопараметрических систем путём комбинирования интегральных измерений картины многократного рассеяния в различных условиях дифракции.

## **2. ИНТЕГРАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ КОМБИНИРОВАННОЙ ДИФФУЗНО-ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ**

Как здесь будет показано наиболее чувствительными и принципиально новыми оказываются методы полной интегральной интенсивности (ПИИ) динамической дифракции с точки зрения их диагностических возможностей.

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

В кинематической теории [2] ПИИ рассеяния  $R_i$  и её брэгговская ( $R_{iB}$ ) и диффузная ( $R_{iD}$ ) составляющие имеют вид:

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

откуда следуют два закона сохранения кинематической теории:

$$R_i = R_{iB} + R_{iD} = R_{ip} \quad (2)$$

(независимость ПИИ от характеристик дефектов) и

$$R_{iD}/R_{iB} = (1 - e^{-2L})/e^{-2L} \approx 2L \quad (3)$$

(независимость от условий дифракции вклада диффузной составляющей ПИИ);  $R_{ip} = C^2 Q t / \gamma_0$  — кинематическая интегральная интенсивность рассеяния идеального кристалла,  $Q = (\pi |\chi_{Hr}|)^2 / [\lambda \sin(2\theta_B)]$  — отражательная способность на единицу длины пути,  $e^{-L}$  — единственный в теории структурно-чувствительный фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера.

В случае симметричной дифракции по Лауэ выражение для полной интегральной интенсивности динамической дифракции (ПИИДД)  $R_i = R_{iB} + R_{iD}$ , усреднённой по толщинным осцилляциям в приближении тонкого кристалла ( $\mu_0 l < 1$ ), имеет вид [3]:

$$R_i = \exp(-\mu_0 l) [B_0 E I_0(h_s) \exp(-\mu_{ds}^0 l) + (1 - E^2) R_{ip} \exp(-\mu^* l)], \quad (4)$$

а в приближении толстого кристалла ( $\mu_0 l \gg 1$ ) ПИИДД описывается выражением [3]:

$$R_i = ((2\pi)^{1/2} C E |\chi_{Hr}| / 4 \sin 2\theta_B) \exp[-(\mu_0 - \mu_H C E) l] / (\mu_H l C E)^{1/2} \times \\ \times [i_0(h_s) \exp(-\mu_{ds}^0 l) + (\alpha / \sin 2\theta_B) \mu_{ds}^0 / (\mu_H C E)], \quad (5)$$

$$i_0(x) = 1 + 1/8x + 9/128x^2 + \dots,$$

$$\alpha = (3/2) [\exp(-\mu_{ds}^0 l) - \exp(-\mu_H C E l)] / (1 - \mu_{ds}^0 / (\mu_H C E)),$$

где  $B_0 = C \pi |\chi_{Hr}| / (2 \sin 2\theta_B)$ ,  $\chi_{Hr}$  — вещественная часть Фурье-компоненты поляризуемости кристалла,  $\theta_B$  — угол Брэгга,  $E = \exp(-L_H)$  — статический фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера,  $h_s = \mu_H l C E$ ,  $C$  — поляризационный множитель,  $\mu_H$  — динамический коэффициент фотоэлектрического поглощения,  $I_0$  — функция Бесселя нулевого порядка от мнимого аргумента,  $\mu_{ds}^0$  — интегральный коэффициент эффективного поглощения когерентной составляющей ПИИДД из-за диффузного рассеяния когерентных волн на флуктуациях статических смещений атомов, вызванных дефектами,  $\mu^*$  — интегральный коэффициент эффективного поглощения

диффузной составляющей ПИИДД из-за диффузного рассеяния когерентных волн и перерассеяния диффузных волн на указанных флуктуациях смещений.

При измерениях толщинных зависимостей ПИИДД методом наклона [3] при вращении кристалла на угол  $\alpha$  вокруг вектора дифракции  $\mathbf{H}$  изменяются эффективная толщина кристалла (длина пути излучения в кристалле)  $t = t_0/\cos\alpha$  и направляющие косинусы падающего ( $\gamma_0$ ) и дифрагированного ( $\gamma_{\mathbf{H}}$ ) лучей относительно внутренней нормали к входной поверхности кристалла:

$$\gamma_0 = \cos\theta_{\mathbf{B}}\cos\psi\cos\alpha - \sin\psi\sin\theta_{\mathbf{B}}, \quad \gamma_{\mathbf{H}} = \cos\theta_{\mathbf{B}}\cos\psi\cos\alpha + \sin\psi\sin\theta_{\mathbf{B}},$$

где  $\psi$  — угол между нормалью к поверхности кристалла и отражающими плоскостями. В симметричном случае  $\psi = 0$ .

В противоположность кинематической теории толщинные зависимости ПИИДД (4) имеют нелинейный характер, причём различный для когерентной ( $I_0 \sim 1 + h_s^2/4 + h_s^4/64 + \dots$ ) и диффузной ( $R_{\text{ip}} \sim t$ ) компонент. Следует также обратить внимание на возможность значительного возрастания, вплоть до преобладающих значений (даже в случае  $L \ll 1$ ), относительного вклада диффузной компоненты в ПИИДД по сравнению с когерентной за счёт увеличения как толщины  $t$ , так и множителя  $(1 - E^2)$ .

Формула (5) описывает эффект аномального прохождения как когерентных, так и диффузно рассеянных волн. Следует отметить сильно выраженный нелинейный характер зависимости  $R_i(t)$  и его принципиальное отличие от аналогичной зависимости (4) для случая тонкого кристалла, а также преобладающий вклад диффузной компоненты в ПИИДД при  $\mu_{\text{ds}}^0 \sim \mu_{\mathbf{H}}$  ( $\sim \mu_0$ ).

В случае произвольной (асимметричной) геометрии дифракции по Брэггу выражение для ПИИДД, объединяющее предельные случаи тонкого ( $\mu_0 l \ll 1$ ) и толстого ( $\mu_0 l \gg 1$ ) кристаллов, имеет вид [5–9]:

$$R_i = R_i^{\text{dyn}} PE + R_{\text{ip}} \Pi(1 - E^2), \quad (6)$$

$$R_i^{\text{dyn}} = (16/3\pi) CQ\Lambda/\gamma_0,$$

$$\Pi(\mu^*, t) = \begin{cases} 1/[2(\mu_0 + \mu^*)t/\gamma] & \text{при } \mu_0 t \gg 1, \\ 1/[1 + (\mu_0 + \mu^*)t/\gamma] & \text{при } \mu_0 t < 1, t \gg \Lambda_{\mathbf{B}}, \end{cases}$$

$$1/\gamma = (1/\gamma_0 + 1/|\gamma_{\mathbf{H}}|)/2, \quad \Lambda_{\mathbf{B}} = \lambda(\gamma_0|\gamma_{\mathbf{H}}|)^{1/2}/(2\pi C|\chi_{\mathbf{H}\mathbf{H}}|) = \Lambda/(2\pi),$$

$$P \cong 1 - 3\pi s/4 \text{ при } s \ll 1, \quad s = (\mu_0 + \mu_{\text{ds}}^0)\Lambda E/(\gamma C).$$

Оба закона сохранения кинематической теории за счёт включения дисперсионного механизма, как следует из приведённых выражений, нарушаются при переходе к динамической дифракции.

В отличие от кинематической теории, как следует из (4)–(6), кроме статического фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера  $E^2$ , в динамической теории появляются ещё два структурно-чувствительные параметры — это интегральные коэффициенты диффузной экстинкции когерентной ( $\mu_{\text{ds}}^0$ ) и диффузной ( $\mu^*$ ) компонент ПИИДД. Это предоставляет уникальную возможность, принципиально отсутствующую в кинематическом случае, используя измерения ПИИДД, корректно и однозначно определять параметры дефектов в динамически рассеивающих кристаллах.

В случае однородного распределения дефектов кулоновского типа с радиусом  $R_0$  и концентрацией  $c$  справедливо выражение, связывающее интегральный коэффициент экстинкции  $\mu_{\text{ds}}^0$  с характеристиками дефектов (см. [3]):

$$\mu_{\text{ds}}^0 = cE^2 C^2 m_0 B, \quad m_0 = \pi v_c H^2 |\chi_{\text{Hr}}|^2 / (2\lambda^2),$$

$$B = b_1 + b_2 \ln(e/r_0^2), \quad b_1 = B_1 + B_2/3, \quad b_2 = B_1 + \cos^2 \theta_B B_2/2,$$

где  $r_0 = R_0/\Lambda$ ,  $\Lambda = \lambda(\gamma_0 \gamma_{\text{H}})^{1/2} / (C|\chi_{\text{Hr}}|)$  — экстинкционная длина,  $H$  — модуль вектора дифракции,  $\lambda$  — длина волны используемого излучения,  $e$  — основание натурального логарифма и предполагается, что  $r_0 < 1$ . Для сферических кластеров  $B_1 = 0$ ,  $B_2 = (4\pi A_{\text{cl}}/v_c)^2$ ,  $A_{\text{cl}} = \Gamma \varepsilon R_0^3$  — мощность кластера,  $\varepsilon$  — относительная деформация на границе кластера,  $\Gamma = (1 + \nu)/[3(1 - \nu)]$ ; для хаотически однородно распределённых дислокационных петель  $B_1 = 4(\pi |\mathbf{b}| R_0^2 / v_c)^{2/15}$ ,  $B_2 = \beta B_1$ ,  $\beta = (3\nu^2 + 6\nu - 1)/[4(1 - \nu^2)]$ ,  $v_c$  — объём элементарной ячейки,  $\nu$  — коэффициент Пуассона,  $\mathbf{b}$  — вектор Бюргерса.

Если  $\mu_{\text{ds}}^0 \ll \mu_0$  и  $r_0 \ll 1$ , то справедливо приближенное соотношение [3]:

$$\mu^* \approx \mu_{\text{ds}}^0 f_{\mu}(r_0),$$

$$f_{\mu}(r_0) = (5 + 2r_0 \ln r_0 - 3/8r_0) / [3(1 - \ln r_0)] \text{ для дислокационных петель}$$

$$f_{\mu}(r_0) = (4 + r_0 \ln r_0 - 2r_0) / (5 - 6 \ln r_0) \text{ для кластеров.}$$

Связь показателя статического фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера  $L_{\text{H}} = -\ln E$  с характеристиками дефектов описывается выражениями [2]:

$$L_{\text{H}} = 0,5 c v_c^{-1} R_0^3 (H |\mathbf{b}|)^{3/2} \text{ (дислокационные петли),}$$

$$L_{\text{H}} = 0,5 c n_0 \eta^2 (1 - \eta^2 / 100) \text{ (сферические кластеры, } \eta^2 \ll 10),$$

$$L_{\text{H}} = c n_0 \eta^{3/2} \text{ (сферические кластеры, } \eta^2 \gg 10),$$

где  $n_0 = (4/3)\pi R_0^3 / v_c$  — количество элементарных ячеек матрицы, замещаемых кластером,  $\eta = \alpha_0 n_0^{1/3} h$ ,  $\alpha_0 = \Gamma \varepsilon (6\pi^2 / v_0)^{1/3}$ ,  $v_0$  — количе-

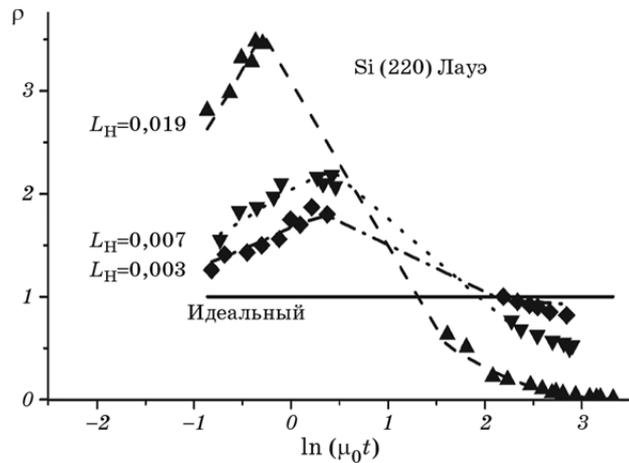
ство атомов в кубической ячейке матрицы,  $h = Na/(2\pi)$ ,  $a$  — постоянная решётки.

Тем самым через параметры  $E$ ,  $\mu_{ds}^0$  и  $\mu^*$  величина ПИИДД  $R_i$  оказывается связанной с характеристиками дефектов ( $c$ ,  $R_0$ ,  $\varepsilon$ ,  $b$ ).

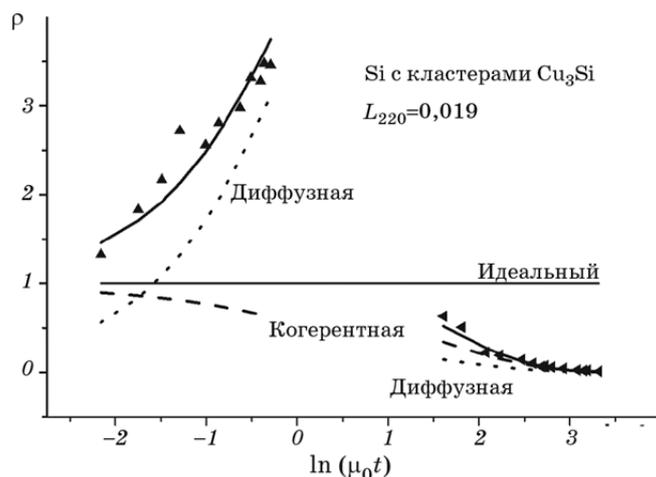
На рисунке 1 представлены результаты экспериментального подтверждения толщинной зависимости вклада диффузного рассеяния и нарушения закона сохранения ПИИДД (маркёры — эксперимент, линии — теория). Полная интегральная интенсивность динамической дифракции представлена нормированной на интегральную интенсивность динамической дифракции идеального кристалла, что в кинематической теории всегда равно единице (см. формулу (2)).

Следует отметить, что на рис. 1 (и некоторых нижеследующих графиках) сплошная горизонтальная линия соответствует идеальному кристаллу при динамическом рассмотрении ( $R_{i\text{perf}}$ ) или любому (идеальному и неидеальному) кристаллу в кинематическом случае, т.е. в последнем случае ПИИД принципиально не чувствительна к искажениям кристалла.

Из рисунка 2, где представлены толщинные зависимости удельных вкладов диффузной и когерентной составляющих ПИИДД, видно, что именно обусловленное дисперсионным механизмом изменение относительного вклада диффузной составляющей ПИИДД (непрерывное с изменением толщины кристалла и дискретное при переходе от приближения тонкого к приближению толстого кристалла), связанное с принципиально различным характером тол-



**Рис. 1.** Зависимости нормированной ПИИДД  $\rho = R_i/R_{ip}$  от величины  $\mu_0 t$ . Линии — результаты расчётов, а маркёры — результаты измерения ПИИДД для трёх образцов в приближениях тонкого (с использованием  $MoK_\alpha$ -излучения, левая часть зависимостей) и толстого (с использованием  $CuK_\alpha$ -излучения и  $FeK_\alpha$ -излучения, правая часть зависимостей) кристаллов [3].



**Рис. 2.** Рассчитанные (сплошные линии) и экспериментальные (маркёры) толщинные зависимости нормированной ПИИДД монокристалла Si. Штриховые линии — рассчитанные толщинные зависимости когерентной составляющей, пунктирные линии — диффузной составляющей. Параметры дефектной структуры кристалла: сферические кластеры  $\text{Cu}_3\text{Si}$  с  $R = 0,035$  мкм,  $\varepsilon = 0,13$  и  $c = 9 \cdot 10^{10}$  см $^{-3}$ .

щинных зависимостей составляющих ПИИДД, а также изменением этого характера при переходе от предельного случая тонкого кристалла к случаю толстого, определяет её уникальную чувствительность к дефектам.

Диагностика дефектной структуры монокристалла методом деформационных зависимостей ПИИДД с использованием особенностей, отмеченных выше, выполнялась на образцах кремния толщиной  $t = 530$  мкм, выращенных по методу Чохральского (Cz-Si) [10–12]. Авторы работ [13, 14] использовали образец № 1 в качестве исходного монокристалла Si с относительно слабо развитой дефектной структурой, а образец № 2 отожгли при  $1100^\circ\text{C}$  в течение 8 часов. Ими были измерены ПИИДД симметричных 220 Лауэ-отражений в зависимости от кривизны четырёхточечного упругого цилиндрического изгиба. Измерения выполняли в приближении тонкого кристалла (при использовании  $\text{MoK}_\alpha$ -излучения) и в приближении толстого кристалла (при использовании  $\text{FeK}_\alpha$ -излучения).

Для описания деформационных зависимостей ПИИДД была использована модель, предложенная в работах [10–12], в которой ПИИДД изогнутого кристалла с дефектами имеет следующий вид:

$$R_{\text{ib}} = R_{\text{coh}}(1 + 0,074BT\mu_0 t) \exp(-0,00604(BT\mu_0 t)^2) + \\ + R_{\text{diff}}(1 + 0,0157BT\mu_0 t) \exp(-0,00044(BT\mu_0 t)^2)$$

для толстого кристалла;

$$R_{ib} = R_{i\text{ coh}}(1 + 0,78BT\mu_0t + 1,024(BT\mu_0t)^2) \exp(-0,078(BT\mu_0t)^2) + R_{i\text{ diff}}(1 - 0,174BT\mu_0t - 0,128(BT\mu_0t)^2) \exp(-0,14(BT\mu_0t)^2)$$

для тонкого кристалла. Здесь  $R_{i\text{ coh}}$  и  $R_{i\text{ diff}}$  — когерентная и диффузная составляющие ПИИДД неизогнутого кристалла соответственно,

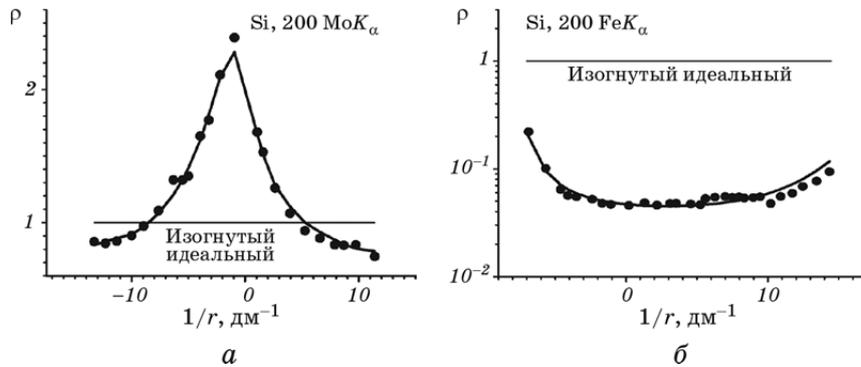
$$B = \lambda^2 \sin \psi [1 + \gamma_0 \gamma_H (1 + \nu)] / (2\pi |\chi_{Hr}|^2 rd)$$

— эффективная деформация,

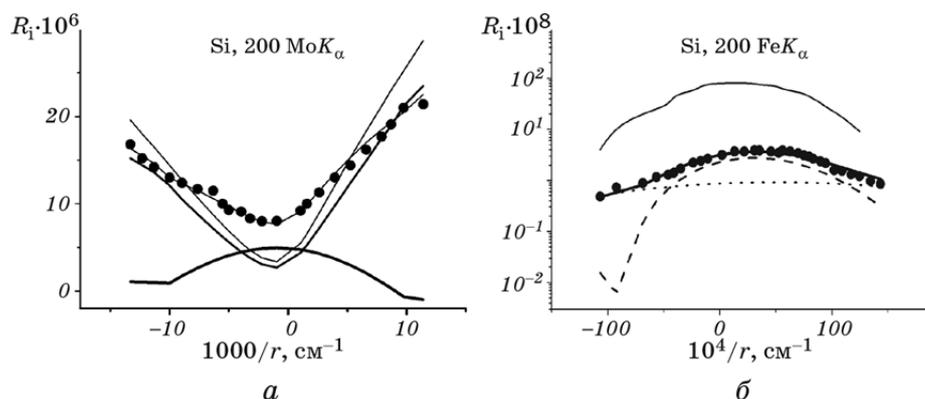
$$T = \pi t |\chi_{Hr}| / \lambda \sqrt{\gamma_0 \gamma_H}$$

— эффективная толщина [15],  $r$  — радиус цилиндрического изгиба кристалла,  $d = a / (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$ ,  $h, k, l$  — индексы Миллера; здесь и далее направляющие косинусы проходящих и дифрагированных лучей имеют вид  $\gamma_0 = \cos(\theta_B - \psi)$  и  $\gamma_H = \cos(\theta_B + \psi)$  соответственно.

Рисунки 3 и 4 приведены в качестве примера и иллюстрируют радикальное изменение при динамической дифракции характера влияния дефектов на интегральную интенсивность рассеяния (первый параметр) в зависимости от радиуса кривизны макроскопического упругого изгиба ( $r$ ) кристалла, а также изменение характера влияния дефектов на эти деформационные зависимости (ДЗ) при изменении других условий дифракции, а именно, при переходе от предельного случая динамической дифракции в тонком кристалле ( $a$ ), когда наблюдается существенное увеличение полной инте-



**Рис. 3.** Рассчитанные (жирные сплошные линии) и экспериментальные (маркёры) деформационные зависимости нормализованной ПИИДД для кристаллов Si с дефектами, а также ДЗ для идеального кристалла (тонкие сплошные линии): тонкий кристалл (*a*), толстый кристалл (*б*).



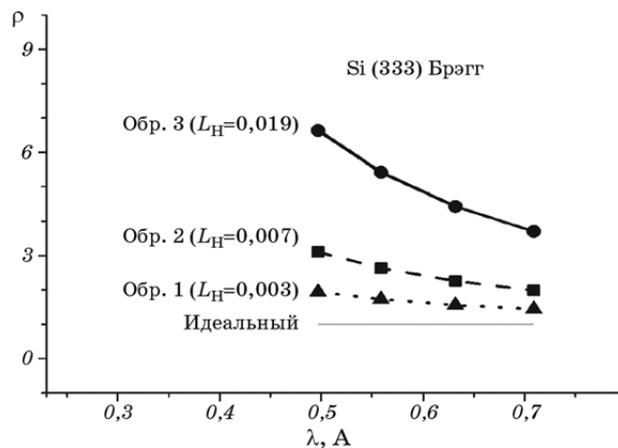
**Рис. 4.** Теоретические и экспериментальные значения деформационных зависимостей ПИИДД неидеального кристалла изображены сплошными жирными линиями и маркерами, соответственно. Пунктирные линии представляют рассчитанные ДЗ когерентной компоненты ПИИДД, штриховые — диффузной, а сплошные тонкие линии — ДЗ ПИИДД кристалла без дефектов: тонкий кристалл (*а*), толстый кристалл (*б*).

гральной интенсивности за счёт дефектов относительно идеального кристалла, к предельному случаю толстого кристалла (*б*), когда имеет место её существенное уменьшение за счёт дефектов [16, 17]. Это обусловлено принципиально различными характерами влияния на брэгговскую и диффузную составляющие динамической картины дифракции, как радиуса кривизны упругого изгиба, так и толщины кристалла, что иллюстрируется на рис. 4 и объясняет этим различием и его следствиями природу нарушения при динамической дифракции второго закона сохранения, а как следствие этого, и первого.

На рисунках 5 и 6 представлены спектральные зависимости ПИИДД неидеальных кристаллов, служащие экспериментальным подтверждением различной функциональной зависимости (6) в приближениях тонкого (область коротких длин волн) и толстого (длинноволновая часть спектра) кристаллов.

Как следует из представленных результатов, при дифракции в геометрии Брэгга эти различия менее ярко выражены, нежели в случае Лауэ-дифракции. Но и в этом случае высокая чувствительность динамической дифракции к различным типам дефектов, присутствующим в исследуемых образцах, сохраняется и существенно возрастает с ростом вклада диффузной составляющей при уменьшении длины волны, т.е. увеличении длины абсорбции и, следовательно, объёма, в котором формируется диффузное рассеяние.

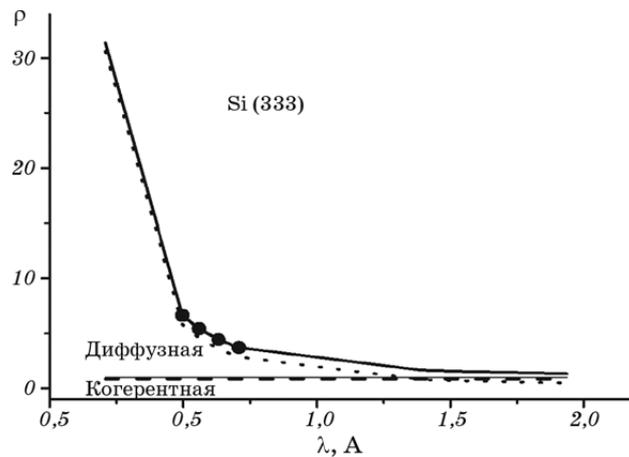
Результаты экспериментальной апробации возможностей многопараметрической диффузно-динамической комбинированной ди-



**Рис. 5.** Зависимость в случае брэгг-дифракции, нормированной ПИИДД дефектных образцов Si от длины волны излучения. Образцы 1 и 2 были отожжены на воздухе в течение 4 и 6 часов при 1000°C и 1080°C соответственно; образец 3 был отожжён в атмосфере азота в течение 7 часов при 1250°C.

фрактометрии (МПДДКД) кристаллов с несколькими типами дефектов представлены в качестве примера ниже в таблице.

При комбинированной обработке экспериментальных данных по



**Рис. 6.** Рассчитанная (сплошная линия) и экспериментальная (маркёры) спектральная зависимость нормированной ПИИДД монокристалла Si. Штриховая линия — рассчитанная спектральная зависимость когерентной составляющей, пунктирная линия — диффузной. Расчёты выполнялись для следующих параметров динамического рассеяния:  $L_H = 0,17$ ,  $\mu^*/\mu_0 = 1,1$ .

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

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

толщинным и деформационным зависимостям ПИИ в различных условиях динамической дифракции удаётся однозначно и с достаточной точностью определить параметры всех четырёх типов дефектов, одновременно присутствующих в исследуемом образце кремния, что существенно повышает информативность метода МПДДКД, в том числе, по сравнению с другими динамическими подходами (Патент Украины № 36075 от 10.10.2008 г. с участием авторов статьи) [4]. Этими результатами продемонстрированы возможности диагностики рекордно низких концентраций дефектов четырёх типов.

### 3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Авторами обсуждается открытое ими и имеющее революционное значение для развития принципиально новых функциональных возможностей диагностики явление и его дисперсионная природа, а именно, явление колоссального усиления проявления дефектов в картине многократного рассеяния и, в частности, в её интегральных параметрах, которое управляется условиями дифракции селективно для каждого типа дефектов и наблюдается как уникально структурно-чувствительные зависимости от условий дифракции картины многократного рассеяния и особенно её интегральных параметров. Отмечается, что 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.

Обсуждены созданные на основе использования открытого явления и детально аналитически описанного дисперсионного механизма влияния дефектов на динамическую картину и её интегральные

параметры теоретические и экспериментальные основы закреплённых патентами принципиально новых уникально чувствительных и информативных интегральных методов, обеспечивающих повышение в десятки тысяч раз чувствительность структурной диагностики и возможность характеристики сложных многопараметрических систем и не имеющих аналогов в мире, примеры которых проиллюстрированы в статье.

## 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. М. А. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin: Springer: 1996).
3. В. Б. Молодкин, М. В. Ковальчук, И. М. Карнаузов, В. Е. Сторишко, С. В. Лизунова, С. В. Дмитриев, А. И. Низкова, Е. Н. Кисловский, В. В. Молодкин, Е. В. Первак, А. А. Катасонов, В. В. Лизунов, Е. С. Скакунова, Б. С. Карамурзов, А. А. Дышеков, А. Н. Багов, Т. И. Оранова, Ю. П. Хапачев, *Основы интегральной многопараметрической диффузодинамической дифрактометрии* (Нальчик: Кабардино-Балкарский университет: 2013).
4. 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.).
5. В. Г. Барьяхтар, Е. Н. Гаврилова, В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, *Металлофизика*, **14**, № 11: 68 (1992).
6. V. V. Nemoshkalenko, V. B. Molodkin, E. N. Kislovskii, and M. T. Kogut, *Металлофизика*, **16**, № 2: 48 (1994).
7. V. G. Baryakhtar, M. V. Kovalchuk, Yu. M. Litvinov, V. B. Molodkin, V. V. Nemoshkalenko, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, and A. I. Nizkova, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A*, **308**: 291 (1991).
8. Е. Н. Гаврилова, Е. Н. Кисловский, В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, *Металлофизика*, **14**, № 3: 70 (1992).
9. В. Г. Барьяхтар, В. В. Немошкеленко, В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский и др., *Металлофизика*, **15**, № 12: 18 (1993).
10. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, С. В. Дмитриев, Е. В. Первак, Е. Г. Лень, А. А. Белоцкая, Я. В. Василик, А. И. Гранкина, И. Н. Заболотный, А. А. Катасонов, М. Т. Когут, О. С. Кононенко, В. В. Молодкин, А. И. Низкова, Л. И. Ниничук, И. В. Прокопенко, И. И. Рудницкая, *Металлофиз. новейшие технол.*, **30**, № 9: 1189 (2008).
11. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, С. В. Дмитриев, Е. В. Первак, И. И. Рудницкая, Ю. А. Динаев, А. И. Низкова, О. С. Кононенко, А. А. Катасонов, И. Н. Заболотный, А. В. Мельник, Я. В. Василик, Т. И. Пархоменко, Л. И. Ниничук, В. Ф. Мачулин, И. В. Прокопенко,

- Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 8: 1009 (2007).
12. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, С. В. Дмитриев, Е. В. Первак, И. И. Рудницкая, Ю. А. Динаев, А. И. Низкова, Е. Г. Лень, А. А. Белоцкая, А. И. Гранкина, М. Т. Когут, О. С. Кононенко, А. А. Катасонов, И. Н. Заболотный, Я. В. Василик, Л. И. Ниничук, И. В. Прокопенко, *Металлофиз. новейшие технол.*, **30**, № 7: 873 (2008).
  13. L. I. Datsenko, V. I. Khrupa, and E. N. Kislovskii, *phys. status solidi (a)*, **68**, No. 2: 399 (1981).
  14. В. И. Хрупа, Е. Н. Кисловский, Л. И. Даценко, *Металлофизика*, **2**, № 4: 55 (1980).
  15. Ф. Н. Чуховский, *Металлофизика*, **2**, № 6: 3 (1980).
  16. А. П. Шпак, М. В. Ковальчук, И. М. Карнаухов, В. В. Молодкин, Е. Г. Лень, А. И. Низкова, С. И. Олиховский, Б. В. Шелудченко, Дж. Е. Айс, Р. И. Барабаш, *Успехи физики металлов*, **9**, № 3: 305 (2008).
  17. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, *Успехи физики металлов*, **5**, № 1: 51 (2004).

## REFERENCES

1. 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).
2. M. A. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin: Springer: 1996).
3. V. B. Molodkin, M. V. Koval'chuk, I. M. Karnaukhov, V. E. Storizhko, S. V. Lizunova, S. V. Dmitriev, A. I. Nizkova, E. N. Kislovskii, V. V. Molodkin, E. V. Pervak, A. A. Katasonov, V. V. Lizunov, E. S. Skakunova, B. S. Karamurzov, A. A. Dyshekov, A. N. Bagov, T. I. Oranova, and Yu. P. Khapachev, *Osnovy Integral'noy Mnogoparametricheskoy Diffuznodinamicheskoy Difraktometrii* (Nal'chik: Kabardino-Balkarskiy Universitet: 2013) (in Russian).
4. A. P. Shpak, M. V. Koval'chuk, V. B. Molodkin, A. I. Nizkova, I. V. Gin'ko, S. I. Olikhovskiy, E. N. Kislovskii, E. G. Len, A. A. Belotskaya, E. V. Pervak, and V. V. Molodkin, *Sposob Mnogoparametricheskoy Strukturnoy Diagnostiki Monokristallov s Neskol'kimi Tipami Defektov*, Patent of Ukraine No. 36075 (Publ. October 10, 2008) (in Russian).
5. V. G. Baryakhtar, E. N. Gavrilova, V. B. Molodkin, and S. I. Olikhovskii, *Metallofizika*, **14**, No. 11: 68 (1992) (in Russian).
6. V. V. Nemoshkalenko, V. B. Molodkin, E. N. Kislovskii, and M. T. Kogut, *Metallofizika*, **16**, No. 2: 48 (1994).
7. V. G. Baryakhtar, M. V. Kovalchuk, Yu. M. Litvinov, V. B. Molodkin, V. V. Nemoshkalenko, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, and A. I. Nizkova, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A*, **308**: 291 (1991).
8. E. N. Gavrilova, E. N. Kislovskii, V. B. Molodkin, and S. I. Olikhovskii, *Metallofizika*, **14**, No. 3: 70 (1992) (in Russian).
9. V. G. Baryakhtar, V. V. Nemoshkalenko, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii et al., *Metallofizika*, **15**, № 12: 18 (1993) (in Russian).
10. A. P. Shpak, V. B. Molodkin, S. V. Dmitriev, K. V. Pervak, E. G. Len,

- A. O. Bilots'ka, Ya. V. Vasylyk, A. I. Grankina, I. M. Zabolotniy, A. A. Katasonov, M. T. Kogut, O. S. Kononenko, V. V. Molodkin, A. I. Nizkova, L. I. Ninichuk, I. V. Prokopenko, and I. I. Rudnits'ka, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **30**, No. 9: 1189 (2008) (in Russian).
11. A. P. Shpak, V. B. Molodkin, S. V. Dmitriev, K. V. Pervak, I. I. Rudnytska, Yu. A. Dinaev, A. I. Nizkova, O. S. Kononenko, A. A. Katasonov, I. M. Zabolotny, A. V. Melnyk, Ya. V. Vasylik, T. I. Parkhomenko, L. I. Ninichuk, V. F. Machulin, and I. V. Prokopenko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **29**, No. 8: 1009 (2007) (in Russian).
  12. A. P. Shpak, V. B. Molodkin, S. V. Dmitriev, K. V. Pervak, I. I. Rudnytska, Yu. A. Dinaev, A. I. Nizkova, E. G. Len, A. O. Bilotska, A. I. Grankina, M. T. Kogut, O. S. Kononenko, A. A. Katasonov, I. M. Zabolotny, Ya. V. Vasylyk, L. I. Ninichuk, and I. V. Prokopenko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **30**, No. 7: 873 (2008) (in Russian).
  13. L. I. Datsenko, V. I. Khrupa, and E. N. Kislovskii, *phys. status solidi (a)*, **68**, No. 2: 399 (1981).
  14. V. I. Khrupa, E. N. Kislovskii, and L. I. Datsenko, *Metallofizika*, **2**, No. 4: 55 (1980) (in Russian).
  15. F. N. Chukhovskiy, *Metallofizika*, **2**, No. 6: 3 (1980) (in Russian).
  16. A. P. Shpak, M. V. Koval'chuk, I. M. Karnaukhov, V. V. Molodkin, E. G. Len, A. I. Nizkova, S. J. Olikhovskii, B. V. Sheludchenko, G. E. Ice, and R. I. Barabash, *Uspehi Fiziki Metallov*, **9**, No. 3: 305 (2008) (in Russian).
  17. A. P. Shpak, V. B. Molodkin, and A. I. Nizkova, *Uspehi Fiziki Metallov*, **5**, No. 1: 51 (2004) (in Russian).