

© 2005р. **С.А. Кшевецький**, М.Д. Борча, І.І. Крицун, І.М. Фодчук,  
Я.Д. Гарабажів

Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, Чернівці

## ЗАСТОСУВАННЯ БАГАТОХВИЛЬОВОЇ ДИФРАКТОМЕТРІЇ ДЛЯ АБСОЛЮТНОГО ВИЗНАЧЕННЯ ПОСТІЙНОЇ ГРАТКИ ВИСОКОДОСКОНАЛИХ КРИСТАЛІВ

Запропоновано методику абсолютного визначення постійної ґратки для кубічних монокристалів. Використовується випадкова багатохвильова дифракція, яка реалізується суміщенням двох трихвильових відбивань нагріванням зразка до певної температури. На прикладі кристалів кремнію та телуриду кадмію показано ефективність даної методики. Шляхом порівняння експериментальних результатів з розрахованими продемонстровано можливість визначення знаку деформації і побудови тензора деформації.

The technique of the absolute lattice parameter determination for the cubic single crystals have been proposed, where the coincidental multiple diffraction is realizable at the superposition of two three-beam reflections at the certain temperature of the sample. Using example of silicon and cadmium telluride the efficiency of this technique have been demonstrated. By the comparison of experimental results and calculated ones the possibility of strain sign determination and strain tensor construction have been shown.

### Вступ

Визначення періоду ґратки  $a$  кристалічних об'єктів за допомогою Х-променевої методики з максимальною точністю має важливе практичне значення для багатьох областей фізики і матеріалознавства. Вивчення розподілів внутрішніх напруг, складу і природи багатокомпонентних фаз, закономірностей осадження з твердих розчинів, точної локалізації границь фаз і вимірювання коефіцієнтів термічного розширення – це лише деякі з традиційних напрямків застосування Х-променевої дифрактометрії. На основі аналізу зміни періоду ґратки можна отримати необхідну інформацію про природу, концентрацію і властивості дефектів ґратки в металах і напівпровідниках. На даний час накопичено значний обсяг інформації про методи визначення періодів ґратки кристалічних матеріалів, а також про способи і методики покращення точності їх визначення [1-20]. Зазначимо, що точність вимірювання періоду ґратки кристалічних об'єктів для більшості Х-променевої методики обмежена спектральною шириною дифракційної лінії (дисперсією) і, як правило,  $\Delta a/a \geq 10^{-5}$  [1, 2].

Разом з тим розвиток новітніх напівпровідникових технологій при виготовленні великих за площею, високочистих і високодосконалих

бездислокаційних кристалів Si і Ge неможливий без розвитку оригінальних методик, здатних дати абсолютну і відносну точність визначення періодів ґраток на рівні  $\Delta a/a \approx 10^{-7} \div 10^{-8}$ . Тому розробка нових методів Х-променевої дифрактометрії має не тільки прикладне, але й фундаментальне значення, оскільки це дає змогу визначити ряд базисних фізичних констант. Проаналізуємо деякі з найбільш перспективних методів визначення періодів ґратки високодосконалих кристалічних матеріалів.

### 1. Методи вимірювання періодів ґратки високодосконалих кристалів

**Вимірювання абсолютних значень міжплощинних віддалей.** Найбільш точні значення  $a$  отримані за допомогою методу трикристалльної LLL-інтерферометрії, для якої не потрібно знання довжини хвилі Х-променів [2]. Наприклад, визначений за допомогою даного методу період ґратки для чистого Si при 25°C у вакуумі становить  $a = 5,4310646 \text{ \AA} \pm 0,15 \times 10^{-6} \text{ \AA}$  [4].

**Вимірювання відносних міжплощинних віддалей.** Для конкретного випадку вибір методики повинен бути таким, щоб вона дозволяла вимірювати  $\delta\theta$  з такою прецизійністю, яка достатня для забезпечення необхідної точності  $\Delta a/a$ .

Водночас точність визначення  $\delta\theta$  пов'язана з шириною і формою дифракційного профілю, формування якого залежить від багатьох інструментальних факторів – зміщення зразка, обертання і т. ін. [5-7].

Відомі дисперсійна і псевдобездисперсійна схеми двокристалльної дифрактометрії, за якими проводяться вимірювання міжплощинних віддалей ґратки відносно цих самих віддалей в еталонному кристалі без врахування довжини хвилі [8].

Шляхом вдосконалення даної схеми і враховуючи всі можливі похибки експерименту, автори роботи [9] забезпечили точність визначення  $\Delta a/a$  на рівні  $10^{-6}$  і менше, оскільки в даній методиці не потрібно враховувати поправки на заломлення. За цією методикою отримані дані про концентрацію дислокаційних петель, що утворюються внаслідок опромінення.

Водночас, "брегівський міжплощинний компаратор", розроблений у [10-11] – найкращий в області вимірювань відносних міжплощинних віддалей ґратки. У цьому методі використовуються два багатократні відбивання між зразком та еталонним кристалом, а також три детектори. Досягнута точність вимірів –  $\Delta a/a \approx 3 \cdot 10^{-8}$ .

#### **Вимірювання періоду ґратки, пов'язані з довжиною хвилі X-променів (метод Бонда)**

У роботі [12] Бондом продемонстровано, що для високодосконалих монокристалів точність визначення міжплощинних віддалей ґратки задається точністю вимірювання довжини хвилі.

Оскільки дифрагований пучок не сканується, а вимірюється його кутове положення, то на визначення  $\theta$  не впливають ефекти поглинання, центрування зразка, похибки у виборі нуля кутової шкали. Врахування вказаних похибок створює найбільші труднощі для традиційних методів. Найбільш вагомими похибками, які необхідно враховувати у методі Бонда: заломлення, кутова залежність множника Лоренца, осьова розбіжність падаючого пучка, зміщення падаючого пучка і нормалі до площини відбивання одне відносно одного і відносно осі обертання а також похибки у кутовій шкалі [6,7]. За методом Бонда  $\Delta a/a \leq 10^{-6}$  [1].

Зауважимо, що при наявності у кристалі розвиненої субзернистої структури падає точність визначення періоду ґратки. Зумовлено це існуванням границь субзерен в об'ємі, які вносять значний внесок у розширення кутового розподілу інтенсивності дифрагованих променів.

#### **Методи, що базуються на явищі багатохвильової дифракції**

Аналіз систематичних похибок визначення періодів ґратки за допомогою методу багатохвильової дифрактометрії [3,13-15] показав, що цей метод не має похибок, пов'язаних з поглинанням, зміщенням зразка, неточністю відліку кутових положень детектора дифрагованого випромінювання. Крім того метод багатохвильової дифрактометрії не поступається жодному з найбільш точних двохвильових методів вимірювання періодів ґратки, зокрема методу Бонда. Інші систематичні похибки, властиві більшості методам вимірювання періодів ґратки, для багатохвильової дифрактометрії також є несуттєвими. Водночас, на відміну від методу Бонда, даний метод володіє "внутрішнім" критерієм точності юстування зразка, оскільки юстування виконується при азимутальному повороті монокристала навколо вектора первинного (базисного) відбивання і відповідна похибка, як правило, не перевищує 1–3 кут. сек, а прецесія вектора дифракції на вказану величину з точністю до  $\Delta a/a \approx 10^{-7}$  не впливає на результати визначення періодів ґратки. У методі Бонда відхилення вектора дифракції від площини, перпендикулярної до осі гоніометра, може вносити помітні і важко контрольовані похибки [16-18]. Для методу багатохвильової дифрактометрії несуттєвою є похибка, зумовлена вертикальною розбіжністю падаючого пучка, тоді як у методі Бонда аналогічна похибка може бути суттєвою і потребує введення відповідних поправок [6-7].

Важливо, що на характерній багатохвильовій дифрактограмі отримується ціла система відбивань, з аналізу яких можна визначити серію періодів ґратки тільки за одним азимутальним скануванням і, як наслідок, отримати кращу статистичну точність по визначенню  $a$ . Вибір первинного відбивання, при цьому, є вирішальним, оскільки він визначає рівень фонові інтенсивності розсіяння X-променів. Водночас індексація багатохвильових максимумів відбивань є набагато складнішою, ніж для двохвильових дифракцій [19].

При вимірюваннях періодів ґраток Si, Ge і алмаза отримано точність  $\Delta a/a \sim (0,8-2) \cdot 10^{-6}$  за допомогою відносно простої апаратури. Очевидно, що дана методика – одна з найефективніших для визначення деформацій ґратки і побудови тензора деформацій [9].

#### **Методи з використанням широкого розбіжного пучка**

Відомо, що найбільш придатним методом дослідження синтезованих кристалів алмаза, бага-

трьох сплавів, керамік і мінералів, які мають дуже малі розміри (~1 мм) і структурно недосконалі й неоднорідні, є метод широкого розбіжного X-пучка (метод Коселя). Будь-яке порушення тривимірної періодичності розміщення атомів викликає відповідну зміну процесу розсіювання X-променів. Одночасна дифракція X-променів від декількох систем кристалографічних площин приводить до збільшення кількості дифрагованих хвиль і, відповідно, до якісних і кількісних змін у процесах розсіювання. По зміщенню дифракційних ліній на коселеграмах визначаються зміни періодів ґраток у різних кристалографічних напрямках і на їх основі розраховуються компоненти тензора деформацій. Зміна тонкої структури поперечного профілю інтенсивності вздовж лінії Коселя дає змогу визначати локальні структурні порушення кристалічної ґратки. Крім того розподіл інтенсивності у багатохвильових областях дифракції X-променів дуже чутливий до слабких полів деформацій [21, 22].

Точність визначення періоду ґратки методом Коселя становить  $\Delta a/a \approx 1,5 \cdot 10^{-6}$  [23-25].

Основний недолік методу Коселя полягає у нагріванні електронним пучком малого за об'ємом кристалу, що відповідним чином відображається на X-променевих зображеннях. Цей недолік відсутній для псевдо-коселівського методу [24]. Крім того, досить складним є також геометричний опис кривих дифракційного відбивання [25].

## 2. Експериментальні дослідження

У даній роботі продемонстровано оригінальний метод визначення абсолютного значення періодів ґратки кристалів за допомогою багатохвильового методу Ренінгера [26].

Зазначимо, що періоди ґратки монокристалів за допомогою методу багатохвильової X-променевої дифрактометрії кремнію можна визначати з експериментально виміряних кутових віддалей між відповідними максимумами багатохвильової дифракції на фоні інтенсивності двохвильового первинного відбивання при відомій довжині хвилі X-променів [13,14]. Найбільш інтенсивні багатохвильові максимуми виникають при азимутальному скануванні кристалу довкола вектора дифракції первинного відбивання, забороненого структурою [27].

Зміною періода ґратки або довжини хвилі можна стимулювати зміщення багатохвильових максимумів на дифрактограмі один відносно одного. Можуть виникати такі випадки [3, 13]: а) однойменні піки, що відповідають входу і ви-

ходу вузла оберненої ґратки на сферу Евальда, зближаються і врешті решт накладаються (компланарна дифракція); б) різнойменні піки зближуються і накладаються (випадкова дифракція). Це важливо, оскільки для випадкової дифракції не потрібно вимірювати кутову відстань між піками. Отже виникає унікальна можливість підвищити точність вимірювань абсолютних значень періодів ґратки.

Розглянемо більш детально даний метод.

Схема експерименту. У залежності від ступеня досконалості кристалу похибка вимірювання періодів ґратки, як уже зазначалась, за даним методом складає  $10^{-4} \div 10^{-6}$  Å [3,13,14].

Для експериментальних досліджень використано X-променеву трубку з кобальтовим анодом ( $\text{CoK}_{\alpha 1}$ -випромінювання). Схема експерименту наведена на рис.1. З джерела I вертикальний пучок X-променів падає на кристал Si – монохроматор, після чого дифрагуючи від площин (111) поширюється у горизонтальній площині. Для даної схеми кристал-монохроматор крім монохроматизації і поляризації відіграє роль коліматора, що обмежує вертикальну розбіжність пучка до значення

$$\Delta\theta = \Delta\lambda / 2d \cos\theta = 4, \quad (1)$$

де  $\Delta\lambda$  – власна ширина  $K_{\alpha}$ -лінії,  $\theta$  – кут Брега.

Інтенсивність основного брегівського відбивання при неперервному азимутальному скануванні навколо забороненого структурою відбивання для кремнію реєструється детектором Д. При цьому, вузол оберненої ґратки, що відповідає основному брегівському відбиванню, постійно знаходиться на сфері Евальда, а інші вузли по чергово виходять на сферу Евальда. Це відповідає появі багатохвильових максимумів інтенсивності на фоні забороненого структурою відбивання. Такі максимуми виникають у разі, коли з трьох векторів дифракції хоча б два відповідають незабороненим X-променевим відбиванням.

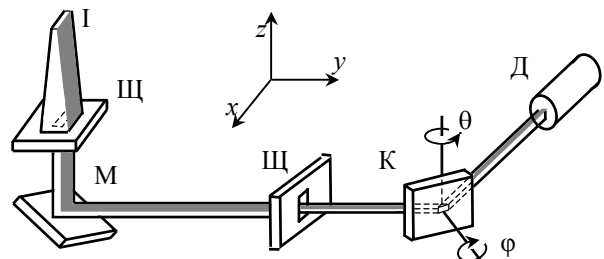


Рис. 1. Схема експерименту. I – X-променева трубка, Щ – щілини, М – кристал-монохроматор, К – досліджуваний кристал, Д – детектор випромінювання,  $\theta$  і  $\phi$  – брегівський і азимутальний кути повороту кристала

### Аналіз багатохвильових дифрактограм

Положення кожного з вимірних дифракційних максимумів інтенсивності визначається як центр маси профілю інтенсивності над рівнем фону. Для кожної пари структурно еквівалентних максимумів багатохвильової дифракції віддалі між ними є різницею їх азимутальних положень.

Кутова відстань між двома довільними максимумами на дифрактограмі азимутального сканування [14]:

$$\varphi_{ij} = \pm\beta_j - (\pm\beta_i) - \Delta\tilde{\varphi}_{ij}, \quad (2)$$

де  $\beta_i$  і  $\beta_j$  – половина кутової відстані між максимумами, що відповідають входу і виходу вузла  $i$  та  $j$  на сферу Евальда,  $\Delta\tilde{\varphi}_{ij}$  – різниця азимутальних координат вузлів  $i$  та  $j$ :

$$\Delta\tilde{\varphi}_{ij} = \text{sign}(\vec{H}_i \vec{H}_j) \arccos \frac{([\vec{H} \times \vec{H}_i], [\vec{H} \times \vec{H}_j])}{|[\vec{H} \times \vec{H}_i]| \cdot |[\vec{H} \times \vec{H}_j]|}. \quad (3)$$

Виходячи з геометрії азимутального сканування і враховуючи вектор дифракції зв'язуючого відбивання  $\vec{H}_{ci} = \vec{H} - \vec{H}_i$ , характеристичний кут  $\beta_i$  для трихвильової дифракції, брегівський кут відбивання  $\theta$  і кут  $\sigma_i$  між векторами дифракції  $\vec{H}_i$  та  $\vec{H}_{ci}$ , отримуємо співвідношення

$$\cos \beta_i = \frac{\text{tg } \theta}{\text{tg } \sigma_i}. \quad (4)$$

Для кубічної сингонії маємо

$$a = \frac{\lambda \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}{2 \sin \theta}. \quad (5)$$

Для максимумів багатохвильової дифракції, що відповідають одному й тому самому вузлу оберненої ґратки, період ґратки визначається з (4) і (5):

$$a = \frac{\lambda \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}{2} \sqrt{\frac{\text{ctg}^2 \sigma_i}{\cos^2(\varphi_{ii}/2)} + 1}. \quad (6)$$

Очевидно, що  $\varphi_{ii} = 2\beta_i$ .

Похибка обчислення періоду ґратки в залежності від похибки експериментально вимірних міжпикових кутових відстаней така

$$\frac{\Delta a}{a} = \frac{\cos^2 \theta}{\text{tg } \theta} \sqrt{\text{tg}^2 \sigma_i - \text{tg}^2 \theta} \cdot d\varphi_{ii}. \quad (7)$$

Зі співвідношення (7) випливає, що зменшення похибки визначення періоду ґратки можна отримати при виборі таких максимумів багатохвильової дифракції, для яких  $\sigma_i \approx \theta$ , тобто, виходячи з (4), при малих значеннях характеристичного кута  $\beta_i$ .

Для компланарної багатохвильової дифракції з (4) і (7) випливає, що при  $\Delta\varphi \rightarrow 0$ ,  $\Delta a \rightarrow 0$ . Для випадкової дифракції не потрібно вимірювати кутову відстань між багатохвильовими максимумами, оскільки багатохвильові піки на дифрактограмі суміщаються один з одним. У випадку близько розміщених багатохвильових максимумів можна підвищити точність вимірювань абсолютних значень періодів ґратки шляхом зміни температури. Відповідна методика визначення періодів ґратки пропонується у даній роботі.

### Вимірювання абсолютних значень періодів ґратки

Випадкова багатохвильова дифракція має місце, коли чотири або більше некомпланарних вузлів оберненої ґратки одночасно розташовані на сфері Евальда. У цьому випадку радіус сфери Евальда фіксований і для кубічних кристалів дорівнює:

$$\frac{an}{\lambda} = \sqrt{x_0^2 + y_0^2 + z_0^2}, \quad (8)$$

де  $a$  – період ґратки,  $n$  – показник заломлення,  $\lambda$  – довжина хвилі у вакуумі,  $x_0, y_0, z_0$  – координати точки Лорентца (деякі раціональні числа, що визначаються індексами Міллера вузлів оберненої ґратки). Як випливає з (8), відношення періоду ґратки до довжини хвилі не пов'язано з кутовими величинами. Критерієм експериментального накладання піків взято мінімум напівширини їх спільного профілю.

Для реалізації випадкової багатохвильової дифракції  $\text{CoK}_{\alpha 1}$ -випромінювання на монокристалі кремнію були обрані трихвильові максимуми  $(222, \bar{1}11/311)$  і  $(222, 1\bar{3}1/151)$  (рис. 2). Досліджуваний кристал знаходився у термостаті, в якому температура зразка змінювалася в діапазоні  $25 \div 180^\circ\text{C}$ . Профілі багатохвильового піка вимірювалися за схемою азимутального сканування при обертанні кристала навколо напрямку  $[222]$  із кроком 5 кут.сек. При цьому температура зразка підтримувалася з точністю  $0,05^\circ\text{C}$ . Мінімум напівширини піка на рис.3 спостерігався при температурі зразка  $74,5 \pm 0,3^\circ\text{C}$ . При цій температурі для розглянутої конфігурації з (6) маємо  $an/\lambda = 1/8 \sqrt{590}$ . Для  $\lambda = 1,78890 \text{ \AA}$  і  $n = 0,999989$  при  $T = 74,5^\circ\text{C}$  період ґратки кремнію  $a = 5,431588 \pm \pm 5 \cdot 10^{-6} \text{ \AA}$ .

Аналогічні дослідження проведені для монокристалу  $\text{CdTe}$  і базисного відбивання  $(600)$   $\text{CuK}_{\alpha 1}$ -випромінювання. На рис.3 рівні двоххвильового фону розміщені у відповідності зі значеннями параметра  $a/\lambda$  при кожній температурі.

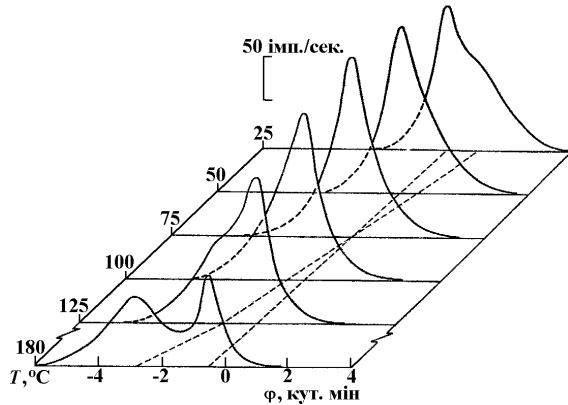


Рис. 2. Експериментальні профілі трихвильових максимумів  $(222, \bar{1}11/311)$  і  $(222, \bar{1}\bar{3}1/151)$  в залежності від температури

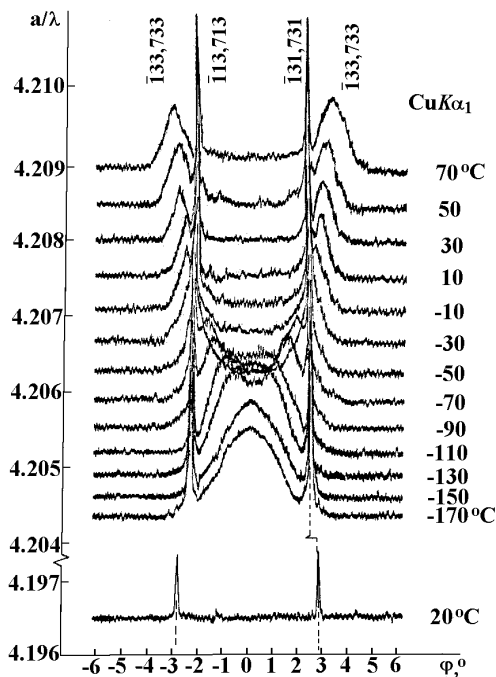


Рис. 3. Експериментальні профілі багатохвильових максимумів в залежності від температури для CdTe

Отже, запропонована методика вимірювання абсолютного значення періоду ґратки, в якій використано ефект суміщення двох трихвильових максимумів шляхом зміни температури, не містить похибок, пов'язаних з неточністю лімба гоніометра, і характеризується високою прецизійністю  $\Delta a/a \sim 10^{-6}$ .

### 3. Теоретичні розрахунки

Для якісного та кількісного аналізу багатохвильових відбивань на основі кінематичної теорії розсіяння X-променів розроблено алгоритм та відповідне програмне забезпечення для розрахунку і графічного представлення багатохвильових дифракційних зображень при азимутальному скануванні кристала навколо вектора диф-

ракції первинного відбивання.

Для розрахунку дифрактограми за Ренінгером в [28] та [29,30] розроблені алгоритми на основі динамічної теорії розсіяння X-променів у випадку дифракції Бреґа. Проте, в цих алгоритмах не враховано поглинання, розбіжність пучка та його спектральна ширина. У наших розрахунках ці параметри бралися до уваги.

В праці [31] показано, що ширина профілю інтенсивностей залежить від середньої товщини кристалу з поправкою на екстинкцію, а також від розбіжності і спектральної ширини падаючого випромінювання. Так само це стосується й інтенсивності піків. Для розрахунку обрані ті самі умови дифракції, що реалізувались експериментально. Вибрано кутовий діапазон азимутального сканування, в який входять трихвильові максимуми  $(222, \bar{1}11/311)$  і  $(222, \bar{1}\bar{3}1/151)$ . Для порівняння з експериментальними результатами, крім аналізу кутових положень піків, використано значення відносної інтенсивності (таблиця 1). Розрахована інтегральна ширина профілю відбивання  $(222, \bar{1}11/311)$  практично не змінювалась при повному накладанні з профілем відбивання  $(222, \bar{1}\bar{3}1/151)$  внаслідок значної різниці їх інтенсивностей.

З врахуванням зміни періоду ґратки за лінійним законом

$$a = a_0 + 1,85 \cdot 10^{-5} \cdot T(^{\circ}\text{C})$$

отримано серію відповідних ділянок дифрактограм для різних температур зразка кремнію (рис.4). На рис. 4 спостерігається добре якісне узгодження результатів розрахунку з експериментальними, і демонструється зміна місцеположень  $(222, \bar{1}11/311)$  і  $(222, \bar{1}\bar{3}1/151)$  максимумів

Таблиця 1. Кутова відстань  $\Delta\phi$  між піками  $(222, \bar{1}11/311)$  і  $(222, \bar{1}\bar{3}1/151)$  відбивань, максимальна інтенсивність  $I_{\text{max}}$  для  $(222, \bar{1}11/311)$  відбивання та відповідний кут на дифрактограмі  $\phi_{\text{max}}$

$T, ^{\circ}\text{C}$	$\Delta\phi$	$I_{\text{max}}$	$\phi_{\text{max}}, \text{кут. град}$
0	-0,029	138,60	67,019
25	-0,019	141,83	67,018
50	-0,008	148,99	67,017
72	0	155,2939	67,016
72,5	0	155,3881	67,016
73	0	155,1718	67,016
75	0,001	155,44	67,016
100	0,012	154,19	67,015
125	0,022	150,66	67,014
150	0,033	148,03	67,013

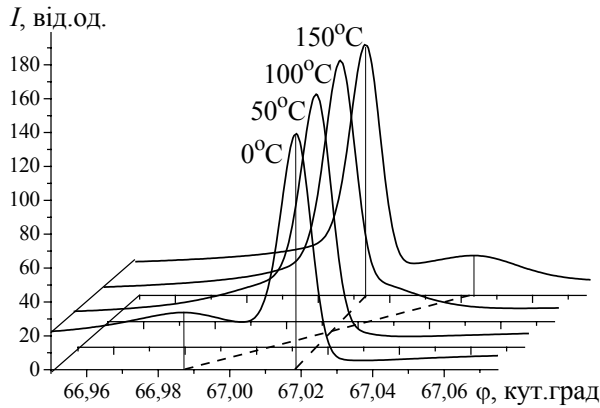


Рис.4. Розраховані профілі багатохвильових максимумів  $(222, \bar{1}11/311)$  і  $(222, \bar{1}\bar{3}1/151)$  в залежності від температури.

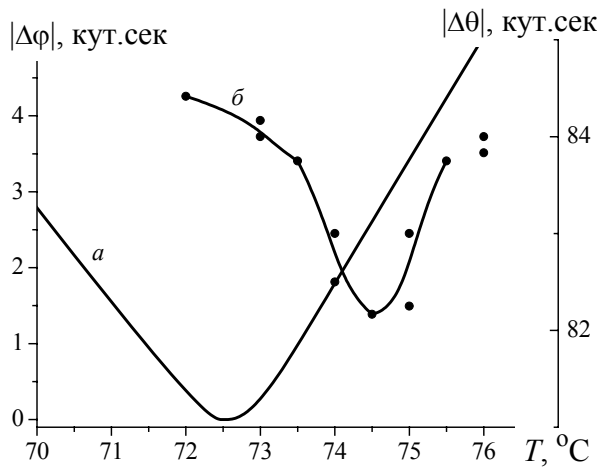


Рис.5. Температурні залежності розрахованої кутової відстані  $\Delta\phi$  між максимумами інтенсивності  $(222, \bar{1}11/311)$  і  $(222, \bar{1}\bar{3}1/151)$  (а) та експериментально отриманої ширини  $\Delta\theta$  спільного профілю інтенсивності (б) при їх накладанні

з температурою. Це дало змогу уточнити кількісне значення періоду кристалічної ґратки кремнію та температуру зразка, при якій відповідні максимуми повністю збігаються:

$$a = 5,431550 \pm 10^{-6} \text{ \AA} \text{ при } T = 72,5 \pm 0,5 \text{ }^\circ\text{C}.$$

Невідповідність у кількісних значеннях періодів ґратки і відповідних температур (рис.5), отриманих експериментально та за допомогою розрахунку, пояснюється тим, що, імовірно, досліджений кристал кремнію був не достатньо досконалим, а містив преципітати мікрodefektів, які можуть суттєво вплинути на кутове положення багатохвильових максимумів і на їхню ширину профілю [2, 3]. Вимірний період ґратки виявився більшим за рахунок деформацій, зумовлених дефектами, що привело до збільшення кутової відстані між розглянутими багатохвильовими максимумами. Оскільки критерієм експе-

риментального накладання піків використано мінімальну ширину профілю, то у цьому випадку період ґратки слід визначати з використанням поправок на дифузне розсіяння [32]. Подальші дослідження і більш детальний аналіз поведінки багатохвильових максимумів дозволять визначити знак деформацій, а також компоненти тензора деформацій даного зразка.

### Висновки

1. Зміною періоду ґратки шляхом нагрівання (охолодження) зразка можна викликати зміщення дифракційних максимумів інтенсивності на ренінґерограмах з різними швидкостями, реалізуючи випадки їх накладання (компланарна або випадкова дифракція).

2. Запропонована методика абсолютного визначення постійної ґратки кубічних монокристалів відносно довжини хвилі X-випромінювання, що виключає вимірювання абсолютних значень кутових інтервалів. Вимірюваними величинами є напівширина багатохвильового піка і температура кристала.

3. Дана методика по визначенню постійної ґратки не містить похибок, пов'язаних з неточністю лімба гоніометра, і характеризується високою прецизійністю –  $\Delta a/a \sim 10^{-6}$ .

4. Невідповідність експериментальних та розрахованих значень періодів ґраток пояснюється деформаціями, зумовленими комплексами мікрodefektів у кристалі кремнію.

### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Härtwig J., Bak-Misiuk J., Berger H., Brühl H.-G., Okada Y., Grosswig S., Wokulska K., Wolf J. Comparison of lattice parameters obtained from an internal silicon monocrystal standard // Phys. Stat. Sol. (a) – 1994. – 142. – P.19-26.
2. Authier A. Dynamical theory of X-ray diffraction. – Oxford: University Press, 2001.
3. Чжан Ш. Многоволновая дифракция рентгеновских лучей в кристаллах. – М: Мир, 1987.
4. Hart M. High precision lattice parameter measurements by multiple Bragg reflexion diffractometry // Proc. Roy. Soc. A. – 1969. – 309. – P.281-296.
5. Härtwig J., Hölzer G., Förster E., Goetz K., Wokulska K., Wolf J. Remeasurement of characteristic X-ray emission lines and their application to line profile analysis and lattice parameter determination // Phys. Stat. Sol. (a) – 1994. – 143. – P.23-34.
6. Galdecka E. Description and peak-position determination of single X-ray diffraction profile for high-accuracy lattice-parameter measurements by the Bond method. I. An analysis of descriptions available // Acta Cryst. – 1993. – A49. – P.106-115.

7. Galdecka E. Description and peak-position determination of single X-ray diffraction profile for high-accuracy lattice-parameter measurements by the Bond method. II. Testing and choice of description // *Acta Cryst.* – 1993. – **A49**. – P.116-126.
8. Spooner F.J., Wilson C.G. The measurement of single-crystal lattice parameters using a double-diffraction technique // *J. Appl. Cryst.* – 1973. – **6**. – P.132-135.
9. Fatami M. A high resolution double-crystal diffractometer method for the measurement of lattice parameter in single crystals // *J. Cryst. Growth.* – 1989. – **96**. – P.316-326.
10. Ando M., Bailey D., Hart M. // *Acta Cryst.* – 1993. – **A34**. – P.291-301.
11. Buschert R.C., Meyer A.J., Kauffman D.S., Gotwald J.K. // *J. Appl. Cryst.* – 1983. – **16**. – P.599-605.
12. Bond W.L. Precision lattice constant determination // *Acta Cryst.* – 1960. – **13**. – P.814-818.
13. Кивевецкий С.А., Михальченко В.П., Стецко Ю.П., Шелудько С.А. Уточнение параметров решетки монокристаллов методом многоволновой дифрактометрии // *УФЖ* – 1985. – **30**, №12. – С.1843-1848.
14. Кивевецкий С.А., Стецко Ю.П., Шелудько С.А. Метод прецизионного определения параметров решетки монокристаллов на основе компланарной многоволновой рентгеновской дифракции // *Письма в ЖТФ*. – 1985. – **11**, №2. – С.1397-1400.
15. Раранский Н.Д., Фодчук И.М., Сергеев В.Н., Гимчинский А.Г., Борча М.Д. Влияние акустических деформаций на многоволновую дифракцию в схеме Реннингера // *Металлофизика*. – 1993. – **15**, №2. – С.80-83.
16. Burke J., Tomkeieff M.V. Errors in the Bond method of lattice parameter determinations. Further considerations // *J. Appl. Cryst.* – 1969. – **2**. – P.247-248.
17. Berger H. A method for precision lattice-parameter measurement of single crystals // *J. Appl. Cryst.* – 1984. – **17**. – P.451-455.
18. Berger H. Systematic errors in precision lattice-parameter determination of single crystals caused by asymmetric line profiles // *J. Appl. Cryst.* – 1986. – **19**. – P.34-38.
19. Post B. Accurate lattice constants from multiple diffraction measurements. I. Geometry, techniques and systematic errors // *J. Appl. Cryst.* – 1975. – **8**. – P.452-458.
20. Ortner B. The choice of lattice planes in X-ray strain measurements of single crystals // *Adv. X-ray Anal.* – 1984. – **29**. – P.113-118.
21. Fodchuk I.M., Raransky M.D., Borcha M.D., Gultay L.L., Tkach O.O. The features of anomalous multiple X-ray transmission in Ge crystals with distortions // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2001. – **34**. – P.A93-A98.
22. Borcha M., Fodchuk I., Tkach V. X-ray multiple diffraction in synthesized diamond with a multi-layered structure // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2005. – **38**. – P.A227-A231.
23. Ellis T., Nanni L.F., Shrier A., Weissmann S., Padawer G.E., Hosokawa N. Strain and precision lattice parameter measurements by the X-ray divergent beam method. I. // *Journal of Applied Physics.* – 1964. – **35**, No. 11. – P.3364-3372.
24. Ullrich H.-J. Precision lattice parameter measurements by interferences from lattice sources (Kossel lines) and divergent beam X-ray diffraction (pseudo-Kossel-lines) in back reflection // *Phys. Stat. Sol.* – 1967. – **20**. – P.K113-K117.
25. Clarke P.T. The direct determination of interplanar spacings and crystal orientations from Kossel patterns // *Phys. Stat. Sol. (a)* – 1971. – **6**. – P.575-580.
26. Renninger M. "Umweganregung", eine bisher unbeachtete Wechselwirkungserscheinung bei Raumgitterinterferenzen // *Z. Phys.* – 1937. – **106**. – No. 1-2. – S.141-176.
27. Михайлюк И.П., Остапович М.В., Кивевецкий С.А., Кушницрюк Г.В. Интенсивность пиков Реннингера запрещенного отражения (222) Ge // *УФЖ*. – 1980. – **25**, №8. – С. 1292-1299.
28. Juretschke H. Modified two-beam description of X-ray fields and intensities near a three-beam diffraction point. General formulation and first-order solution // *Acta Cryst.* – 1984. – **A40**, pt. 4. – P. 379-389.
29. Rossmannith E. UMWEG – a computer program for calculation and graphical representation of umweganregung patterns // *Z. Kristallographie.* – 1985. – **171**. – P.253-254.
30. Rossmannith E. Comparison of an umweganregung pattern, measured on an automatic single-crystal diffractometer, with calculated patterns // *Acta Cryst.* – 1986. – **A42**, – P.344-348
31. Rossmannith E. Extinction-corrected mean thickness and integral width used in the program UMWEG98 // *Applied Crystallography.* – 2000. – **33**. – P.330-333.
32. Holy V., Härtwig J. The role of diffuse scattering on microdefects in the precise lattice parameter measurement // *Phys. Stat. Sol. B.* – 1988. – **145**. – P.363-372.