

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

Теория динамического фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера

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. Толмачёв, Б. В. Шелудченко, Е. В. Фузик,
Г. О. Велиховский

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

Получены выражения для динамического фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера с учётом дисперсионного механизма проявления дефектов в картине многократного рассеяния. Показано существенное отличие динамического и кинематического факторов, что важно учитывать при построении самосогласованной динамической теории рассеяния. Установлена зависимость динамического фактора от условий дифракции. Такая зависимость обуславливает дополнительное влияние условий дифракции на характер зависимости картины рассеяния от характеристик и типа дефектов в кристалле, и его учёт впервые позволит количественно адекватно разделять их вклад в интенсивность и существенно повышать информативность и надёжность диагностики.

Expressions for the dynamical Krivoglaz–Debye–Waller factor with taking into account the dispersion mechanism of defects' influence on the multiple-scattering pattern are obtained. An essential distinction between the dynamical and kinematical factors is shown that is important to take into account for construction of self-consistent dynamical scattering theory. Dependence of the dynamical factor on diffraction conditions is ascertained. This dependence causes additional influence of diffraction conditions on the character of the scattering-pattern dependence on defect types in a crystal. An account of this influence allows to separate quantitatively and adequately the defects' contribution to the intensity and, correspondingly, substantially improve the informativity and reliability of diagnostics.

Одержано вирази для динамічного фактору Кривоглаза–Дебая–Валлера з врахуванням дисперсійного механізму прояву дефектів у картині багатократного розсіяння. Показано істотну відмінність динамічного і кінематичного факторів, що важливо врахувати при побудові самоузгодженої

динамічної теорії розсіяння. Встановлено залежність динамічного фактора від умов дифракції. Така залежність обумовлює додатковий вплив умов дифракції на характер залежності картини розсіяння від характеристик і типу дефектів у кристалі, а його врахування вперше уможливить кількісно адекватно розділяти їхній внесок в інтенсивність і істотно підвищувати інформативність і надійність діагностики.

Ключевые слова: фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера, дисперсионный механизм, динамическая дифракция.

(Получено 15 июля 2015 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Одной из центральных проблем физики твёрдого тела является установление связей между свойствами материалов и характеристиками дефектов в них. Классическая кристаллография базируется на теории дифракции в кристаллах с идеально периодической структурой и по этой причине характеризует лишь только эту идеальную структуру и не позволяет диагностировать характеристики дефектов. Однако, как стало очевидным в последнее время, комплекс необходимых свойств разрабатываемых новых материалов определяется не столько исходной структурой их периодических решёток, сколько характеристиками наведённых в них современными технологиями отклонений от периодичности, т.е. дефектов различных типов и искусственной наноразмерной сверхструктуры. Поэтому, создание новых методов количественной неразрушающей диагностики характеристик дефектов в кристаллах, определяющих их свойства, обеспечивает возможность контроля и повышения качества разрабатываемых материалов.

Одними из наиболее эффективных с этой точки зрения являются дифракционные методы диагностики, позволяющие по картинам рассеяния разных излучений (рентгеновских лучей, нейтронов и заряженных частиц) в кристаллах восстановить статистические структурные характеристики материалов, определяющие их физические свойства. В основу этих методов положены знания о характере влияния несовершенств структуры на картину рассеяния, в частности, за счёт фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера. Однако в последнее время в Институте металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины открыт новый существенно более эффективный механизм проявления дефектов в картине рассеяния, который в отличие от традиционного, названного авторами амплитудным, назван дисперсионным, т.к. первый реализуется за счёт влияния несовершенств структуры на амплитуды волновых функций, а второй — на её волновой вектор (закон дисперсии). Это требует пересмотра теории фактора Кривоглаза–

Дебая–Валлера с учётом дисперсионного механизма.

2. КИНЕМАТИЧЕСКИЙ ФАКТОР КРИВОГЛАЗА–ДЕБАЯ–ВАЛЛЕРА

Кинематическая теория М. А. Кривоглаза даёт следующие результаты для полной интегральной интенсивности рассеяния (ПИИР) в кристаллах с дефектами (R_i) [1]:

$$R_i = R_{iB} + R_{iD},$$

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

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

$$R_{ip} = C^2 Q t / \gamma_0,$$

$$Q = (\pi |\chi_{Hr}|)^2 / \lambda \sin(2\theta_B),$$

где R_{ip} — интегральная интенсивность рассеяния в идеальном кристалле, χ_{Hr} — вещественная часть фурье-компоненты поляризуемости кристалла, θ_B — угол Брэгга, λ — длина волны используемого излучения, t — толщина кристалла, C — поляризационный множитель ($C = 1$ для σ -поляризации, $C = \cos(2\theta_B)$ для π -поляризации). Следует особо подчеркнуть, что в выражениях (1) и (2) для брэгговской (R_{iB}) и диффузной (R_{iD}) составляющих ПИИР зависящим от условий дифракции при фиксированном отражении (H) является только множитель R_{ip} , который в силу своей природы не зависит от структуры дефектов в кристалле. При этом от характеристик структуры дефектов кристаллической решётки зависят лишь множители, в которые входит фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера ($E = e^{-2L}$), определяемый независимо от условий дифракции для каждого рефлекса.

В кинематической теории рассеяния фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера описывается следующими выражениями: для дислокационных петель

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

где c — относительная концентрация петель, R_0 — радиус петли, H — модуль вектора дифракции, $|\mathbf{b}|$ — модуль вектора Бюргера петли, v_c — объём элементарной ячейки; для сферических кластеров

$$L_{kin} = 0,5 c n_0 \eta^2 (1 - \eta^2 / 100) \text{ при } \eta^2 \ll 10, \quad (4)$$

$$L_{kin} = c n_0 \eta^{3/2} \text{ при } \eta^2 \gg 10, \quad (5)$$

где c — концентрация кластеров, $n_0 = (4/3)\pi R_0^3 / v_c$, R_0 — радиус кластера, $\eta = \alpha_0 n_0^{1/3} h$, $\alpha_0 = \Gamma \varepsilon (6\pi^2 / v_0)^{1/3}$, v_0 — количество атомов в элемен-

тарной ячейке, ε — относительная деформация на границе кластера, $h = Ha/2\pi$, $\Gamma = (1 + \nu)/(3(1 - \nu))$, $\nu = 0,211$ — коэффициент Пуассона.

3. ДИНАМИЧЕСКИЙ ФАКТОР КРИВОГЛАЗА–ДЕБАЯ–ВАЛЛЕРА

В случае динамически рассеивающего кристалла с дефектами кроме фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера появляется ещё один структурно чувствительный параметр $\mu_{ds}(\Delta\theta)$, впервые введённый в [2] и, независимо, в [3]. Параметр $\mu_{ds}(\Delta\theta)$ является интегральной по сфере Эвальда при фиксированном $\Delta\theta$ интенсивностью диффузного рассеяния и описывает экстинкцию волн из-за их рассеяния на дефектах и ухода в диффузные волны, которые, в свою очередь также рассеиваются динамически на периодической «в среднем» составляющей восприимчивости кристалла и имеют блоховский характер. Кроме того, интеграл от $\mu_{ds}(\Delta\theta)$ по отклонениям падающего луча от точного условия Вульфа–Брэгга $\Delta\theta$, т.е. величина $\int \mu_{ds}(\Delta\theta)d(\Delta\theta)$, представляет собой относительную долю в полной интегральной интенсивности (R_i) динамического диффузного рассеяния, т.е. по аналогии с кинематической теорией динамический фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера.

Выражение для $\mu_{ds}(\Delta\theta)$ в случае геометрии дифракции по Брэггу имеет вид [4]

$$\mu_{ds}(k_0) = cC^2 m_0 J(k_0), \quad (6)$$

где c — концентрация дефектов, $m_0 = 2\pi\nu_c(H|\chi_{\text{Hr}}|/2\lambda)^2$, \mathbf{H} — вектор обратной решётки, $k_0 = K\Delta\theta\sin(2\theta_B)$,

$$J(k_0) = \begin{cases} J_{\text{H}}(k_0) + J_{\text{H-SW}}(k_0) + J_{\text{H}}^*(k_0) & \text{при } |k_0| < k_m, \\ J_{\text{SW}}(k_0) & \text{при } |k_0| \geq k_m. \end{cases} \quad (7)$$

Здесь

$$J_{\text{H}}(k_0) = b_2 \ln \left(e \frac{k_m^2 + \mu_i^2}{k_0^2 + \mu_i^2} \right) + (b_3 k_0^2 + b_4 \mu_i^2) \left(\frac{1}{k_m^2 + \mu_i^2} - \frac{1}{k_0^2 + \mu_i^2} \right),$$

$$J_{\text{H-SW}}(k_0) = \frac{k_m^2}{k_m^2 + \mu_i^2} \left(b_2 - \frac{1}{2} \frac{b_3 k_0^2 + b_4 \mu_i^2}{k_m^2 + \mu_i^2} \right),$$

$$J_{\text{SW}}(k_0) = \frac{k_m^2}{k_0^2 + \mu_i^2} \left(b_2 - \frac{1}{2} \frac{b_3 k_0^2 + b_4 \mu_i^2}{k_0^2 + \mu_i^2} \right),$$

$$J_{\text{H}}^*(k_0) = \text{sgn}(\Delta\theta) \text{sgn}(\varepsilon) b_1 (\sqrt{k_m^2 + \mu_i^2} - \sqrt{k_0^2 + \mu_i^2}),$$

где $k_m = 2\pi/R_{\text{eff}}$ — граница раздела между областями диффузного рассеяния Хуаня и Стокса–Вильсона, $b_1 = B_1 + B_2/3$, $b_2 = B_1 + (B_2 \cos^2 \theta_B) / 2$, $b_3 = \cos^2 \theta_B (1 - 2\text{tg}^2 \theta_B) / 2$, $b_4 = B_2((\cos^2 \theta_B) / 2 - 1)$, а интерференционный коэффициент поглощения μ_i в геометрии Брэгга при асимптотике $\Delta\theta', \Delta\theta \gg$ полуширины брэгговского пика имеет вид

$$\mu_i = \mu_0(1 + \gamma_0 / |\gamma_H|) / 2\gamma_0. \quad (8)$$

Тут γ_0 и γ_H — направляющие косинусы падающего и дифрагированного лучей соответственно, μ_0 — нормальный коэффициент фотоэлектрического поглощения

Значения коэффициентов B_1 и B_2 определяются типом дефектов, так, для хаотически ориентированных дислокационных петель

$$B_1 = \frac{4}{15} \left(\frac{\pi |\mathbf{b}| R_0^2}{v_c} \right)^2, \quad B_2 = \beta B_1, \quad \beta = \frac{(3v^2 + 6v - 1)(1 - v)^2}{4}, \quad R_{\text{eff}} = R_0 \sqrt{H|\mathbf{b}|},$$

а для кластеров

$$B_1 = 0, \quad B_2 = 4\pi A_{\text{cl}} / v_c, \quad A_{\text{cl}} = \Gamma \epsilon R_0^3, \quad R_{\text{eff}} = R_0 \sqrt{H A_{\text{cl}}}.$$

Для нахождения динамического фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера L_{ds} необходимо вычислить интеграл

$$L_{\text{ds}} = \frac{c v_c H^2}{16\pi^3} \int |\nu_q|^2 d\mathbf{k} = \frac{c v_c H^2}{16\pi^3} \int_{-\infty}^{\infty} J(k_0) dk_0. \quad (9)$$

Подставляя (7) в (9) и пренебрегая угловой зависимостью интерференционного коэффициента поглощения, можно получить аналитическое выражение для (9) в случае дефектов небольших размеров:

$$L_{\text{ds}} = \frac{c v_c H^2}{16\pi^3} (2I_{\text{H-SW}}(k_m) + I_{\text{SW}}), \quad (10)$$

где

$$\begin{aligned} I_{\text{H-SW}}(x) &= b_2 x \ln \left(e^3 \frac{k_m^2 + \mu_i^2}{x^2 + \mu_i^2} \right) + \mu_i (b_3 - b_4 - 2b_2) \text{arctg} \frac{x}{\mu_i} + \\ &+ \frac{x(k_m^2 + 2\mu_i^2)(b_3 x^2 + 3b_4 \mu_i^2)}{6(k_m^2 + \mu_i^2)^2} + x \left(\frac{k_m^2 b_2}{k_m^2 + \mu_i^2} - b_3 \right), \\ I_{\text{SW}} &= \frac{k_m^2}{2\mu_i} \left(\frac{\pi}{2} - \text{arctg} \frac{k_m}{\mu_i} \right) (4b_2 - b_3 - b_4) + \frac{k_m^3 (b_4 - b_3)}{2(k_m^2 + \mu_i^2)}. \end{aligned}$$

В случае геометрии дифракции по Лауэ динамический фактор Кри-

воглаза–Дебая–Валлера имеет вид (10) с коэффициентами b_i в виде

$$b_2 = B_1 + \frac{1}{2} B_2 \sin^2 \theta_B, b_3 = B_2 \left(\frac{1}{2} \sin^2 \theta_B - \cos^2 \theta_B \right), b_4 = \frac{1}{2} B_2 \sin^2 \theta_B,$$

и с интерференционным коэффициентом поглощения (при тех же асимптотиках $\Delta\theta', \Delta\theta \gg$ полуширины брэгговского пика)

$$\mu_i = \frac{KCE\chi_{\text{Hr}}\chi_{\text{Hi}}}{\gamma_0\sqrt{\chi_{\text{Hr}}^2 - \chi_{\text{Hi}}^2}}, \quad (11)$$

где χ_{Hi} — мнимая часть Фурье-компоненты поляризуемости кристалла.

Для дефектов больших размеров необходимо учитывать ориентационную зависимость интерференционного коэффициента поглощения, и находить фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера путём численного интегрирования выражения (9). Зависимость интерференционного коэффициента поглощения от угловой переменной задаётся выражением:

$$\mu_i = \frac{\mu_0}{2\gamma_0} \frac{1+b}{2} \left(1 + \frac{r(\Delta\theta)}{|g|} \right), \quad (12)$$

$$r(x) = \sqrt{[\sqrt{u^2(x) + v^2(x)} - u(x)] / 2},$$

$$u(x) = z^2(x) - g^2 + \kappa^2 - 1,$$

$$v(x) = 2(z(x)g - p), z(x) = \frac{x \sin(2\theta_B)}{C|\chi_{\text{Hr}}|} \sqrt{b}, g = -|\chi_{0i}| \frac{1+1/b}{2C|\chi_{\text{Hr}}|} \sqrt{b}, \kappa = \frac{|\chi_{\text{Hi}}|}{|\chi_{\text{Hr}}|},$$

где $p = \pm \kappa$ для centrosymmetric кристаллов, а $b = \gamma_0/|\gamma_{\text{H}}|$ — параметр асимметрии дифракции.

Однако форма зависимости μ_i является достаточно типичной для различных условий дифракции (рис. 1.), что позволяет аппроксимировать интерференционный коэффициент параболой в области малых угловых отклонений, а для больших отклонений воспользоваться асимптотическими выражениями (8) или (11).

Для определения точек, через которые следует проводить параболу необходимо найти решения уравнения

$$\frac{\partial \mu_i}{\partial (\Delta\theta)} = 0,$$

откуда для точки минимума получим

$$\theta_m = -\frac{(1+b)\chi_{0i}\chi_{\text{Hr}}}{2b\chi_{\text{Hi}} \sin(2\theta_B)}.$$

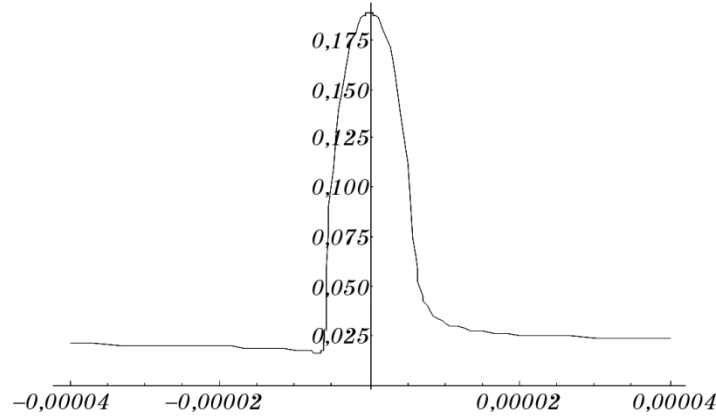


Рис. 1. Угловая зависимость интерференционного коэффициента μ_i .
Fig. 1. Angular dependence of the interference coefficient, μ_i .

Таким образом, приближенный интерференционный коэффициент μ_i будет даваться выражением (12) с $r(x)$ в виде:

$$r(x) = \begin{cases} r(0) - \frac{r(0) - r(\theta_m)}{\theta_m^2} x^2, & x^2 \leq \theta_m^2, \\ |g|, & x^2 > \theta_m^2, \end{cases}$$

$$r(\theta_m) = |g|.$$

В результате выражение для фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера с учётом угловой зависимости интерференционного коэффициента поглощения в области полного отражения будет следующим:

$$L_{ds} = \frac{cv_c H^2}{16\pi^3} (I_{dsi} + 2(I_{H-SW}(k_m) - I_{H-SW}(k_{0m})) + I_{SW}),$$

где

$$I_{dsi} = 2b_2 k_{0m} \ln \left(e^9 \frac{k_m^2 + \tilde{\mu}_m^2}{k_{0m}^2 + \tilde{\mu}_m^2} \right) + \sum_{i=1}^5 \alpha_i \int_0^{k_{0m}} I_{si}(k_0) dk_0,$$

$$k_{0m} = K\theta_m \sin(2\theta_B), \alpha_1 = 8b_2\mu_1\mu_2 + 2b_3, \alpha_2 = -3k_m^2(2b_2 + b_4) - 8b_2\mu_1^2,$$

$$\alpha_3 = 4b_2(2\mu_1\mu_2 - 1) - 2b_3, \alpha_4 = -8b_2\mu_1^2, \alpha_5 = -k_m^2, I_{s1} = k_0^2 I_{s2},$$

$$I_{s2} = (k_m^2 + \tilde{\mu}^2)^{-1}, I_{s3} = k_0^2 I_{s4}, I_{s4} = (k_0^2 + \tilde{\mu}^2)^{-1}, I_{s5} = (b_3 k_0^2 - b_4 k_m^2) I_{s2}^2,$$

$$\tilde{\mu} = \mu_1 - \mu_2 k_0^2, \mu_1 = \frac{\mu_0}{2\gamma_0} \frac{(1+b)}{2} \left(1 + \frac{r(0)}{|g|} \right), \mu_2 = \frac{\mu_0}{2\gamma_0} \frac{(1+b)}{2} \frac{r(0) - |g|}{|g| k_{0m}^2},$$

4. АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Для начала сопоставим кинематический (3)–(5) и динамический факторы (10) для небольших дефектов. На рисунке 2 показана зависимость отношения динамического фактора к кинематическому от радиуса дислокационных петель, а на рис. 3 — от радиуса сфери-

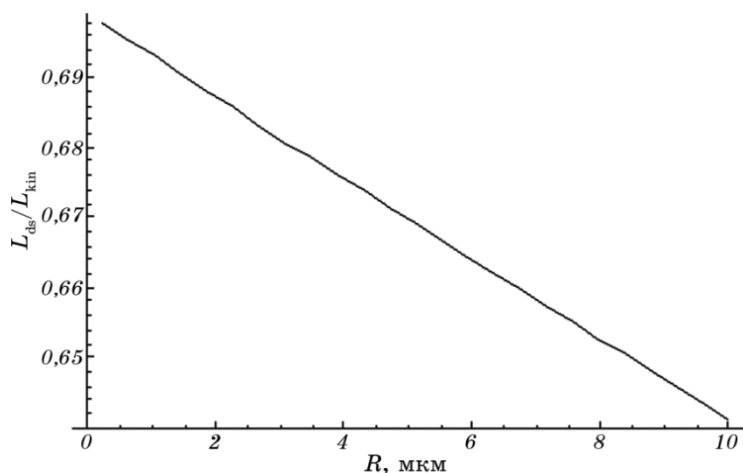


Рис. 2. Отношение динамического фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера к кинематическому; отражение Si(440), излучение CuK_{α} , дислокационные петли.

Fig. 2. The ratio of the dynamical Krivoglaz–Debye–Waller factor to kinematical one; Si(440) reflection, CuK_{α} radiation, dislocation loops.

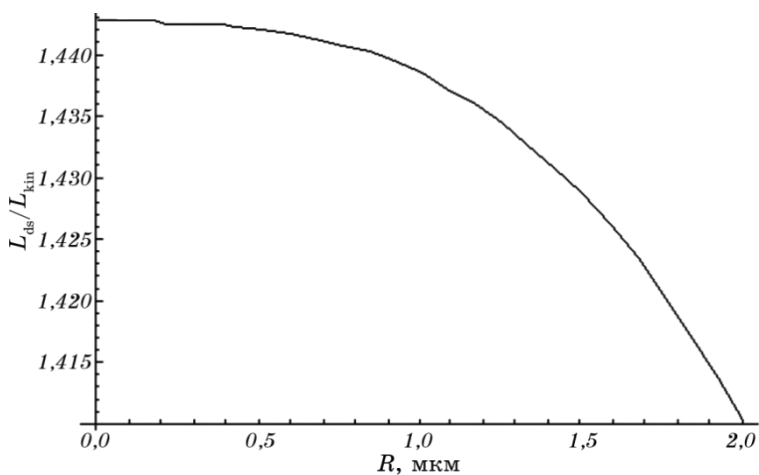


Рис. 3. То же, что на рис. 2, но для сферических кластеров.

Fig. 3. The same as in Fig. 2, but for spherical clusters.

ческих кластеров.

Как видно из рисунков, имеется существенное различие между факторами Кривоглаза–Дебая–Валлера для динамического и кинематического случаев даже в области очень малых дефектов. Можно получить точную оценку такого различия при асимптотически малых размерах дефектов ($R \rightarrow 0$). Так, для дислокационных петель:

$$L_{ds}(R \rightarrow 0) = [(\cos^2 \theta_B + 8/3)\beta + 10] L_{kin}/15 \cong 0,699L_{kin},$$

для сферических кластеров:

$$L_{ds}(R \rightarrow 0) = \sqrt[3]{v_0} (\cos^2 \theta_B + 8/3)L_{kin}/(4\sqrt{2}\pi) \cong 1,443L_{kin}.$$

Как видно из приведённых сравнений, динамический фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера невозможно асимптотически свести к кинематическому. Такая ситуация принципиальных различий данных факторов обусловлена тем, что в кинематическом случае рассматривается только амплитудный, а в динамическом также и дисперсионный [5] механизмы проявления несовершенств структуры в картине рассеяния.

Различия на рисунках 2 и 3 продемонстрированы для приближения небольших дефектов (10), когда ориентационной зависимостью интерференционного коэффициента поглощения можно пренебречь. Однако в случае присутствия в кристалле дефектов больших размеров, необходимо использовать точное выражение (9) с учётом (12) для корректного описания интенсивности дифракции при существенных эффектах многократности диффузного рассеяния на периодической составляющей возмущения. На рисунках 4 и 5 показаны отношения точного динамического и кинематического, а также приближенного динамического и кинематического факторов для дислокационных петель и сферических кластеров соответственно.

Как видно из рис. 4 и 5, учёт точной формы интерференционного коэффициента поглощения приводит к ещё большим отличиям между кинематическим и динамическим факторами Кривоглаза–Дебая–Валлера. Динамический фактор уменьшается относительно кинематического, особенно в случае больших дефектов. Такое поведение динамического фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера обусловлено дисперсионными эффектами в диффузном рассеянии на периодической составляющей восприимчивости кристалла.

Также следует обратить внимание на то, что динамический фактор, в отличие от кинематического, зависит от условий дифракции, причём эта зависимость различна для разных типов и размеров дефектов (рис. 6, 7).

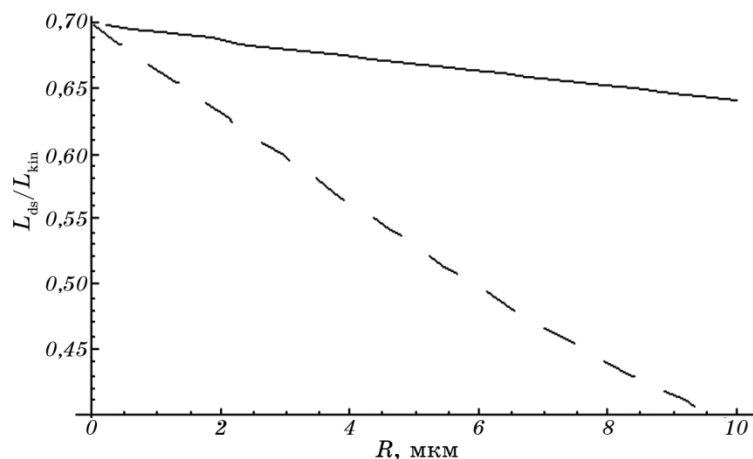


Рис. 4. Отношение точного (пунктирная линия) и приближённого (сплошная линия) динамического фактора к кинематическому; отражение Si(440), излучение CuK_{α} , дислокационные петли.

Fig. 4. The ratio of the precise (dashed line) and approximating dynamical factor to kinematical one (solid line); Si(440) reflection, CuK_{α} radiation, dislocation loops.

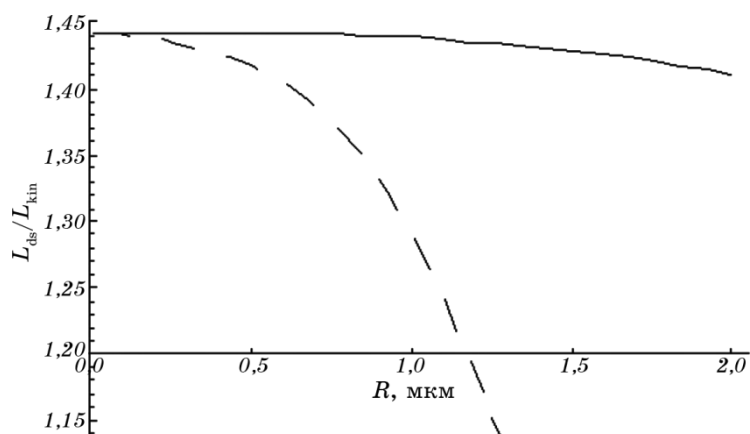


Рис. 5. То же, что на рис. 4, но для сферических кластеров.

Fig. 5. The same as in Fig. 4, but for spherical clusters.

5. ВЫВОДЫ

Таким образом, для одного и того же образца динамический фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера L_{ds} при различных условиях дифракции принимает различные значения.

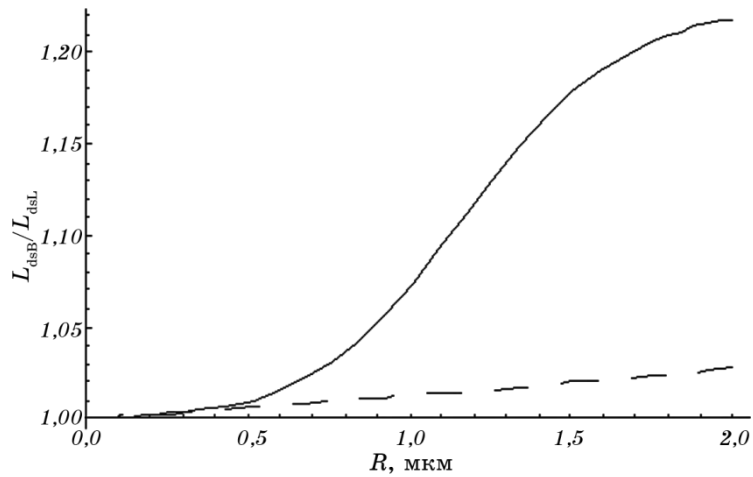


Рис. 6. Зависимость отношения динамических факторов в геометриях Брэгга и Лауэ от размеров дефектов для дислокационных петель (пунктирная линия) и сферических кластеров (сплошная линия).

Fig. 6. The ratio of the dynamical factors in the Bragg and Laue geometries *vs.* the size of defects for dislocation loops (dotted line) and spherical clusters (solid line).

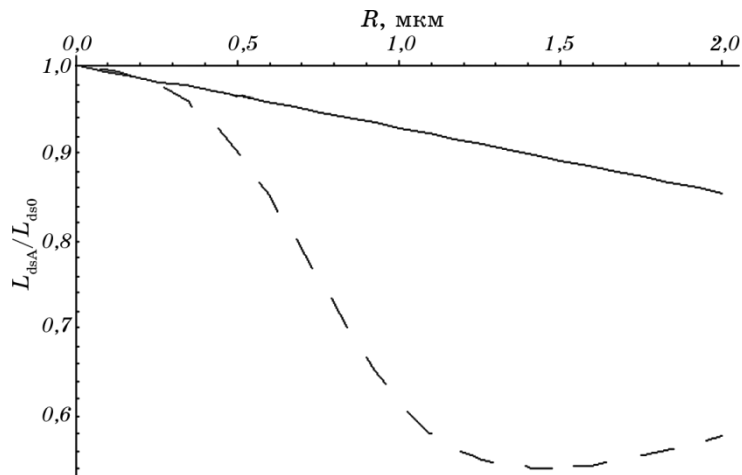


Рис. 7. Зависимость отношения динамического фактора при значении азимутального (толщинного) угла $\varphi = 2\pi/5$ к динамическому фактору при $\varphi = 0$ от размеров дефектов для дислокационных петель (сплошная линия) и сферических кластеров (пунктирная линия); геометрия Лауэ.

Fig. 7. The ratio of the dynamical factor at the azimuthal (thickness) angle $\varphi = 2\pi/5$ to the dynamical factor at $\varphi = 0$ *vs.* the size of defects for dislocation loops (solid line) and spherical clusters (dotted line); Laue geometry.

Динамический фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера L_{ds} , кроме принятия различных между собой значений для геометрий дифракции по Брэггу и Лауэ, случаев тонкого и толстого кристаллов, для разных длин волн излучения, значений азимутального угла и т.п., может отличаться и от величины кинематического фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера L_{kin} . Другими словами, L_{ds} приобретает свойство многообразности. Эта многообразность аналогична установленной ранее многообразности динамической картины рассеяния и имеет одинаковую с ней природу — дисперсионную, а именно, появляется за счёт обусловленного эффектами многократности рассеяния (блоховского характера диффузных волн) возникновения в законе дисперсии и, следовательно, в коэффициентах преломления и поглощения взаимосвязанных зависимостей от характеристик дефектов и условий дифракции.

Следует подчеркнуть, что отличие значения фактора L_{ds} от значения кинематического фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера может достигать нескольких порядков, что может приводить даже к изменению принадлежности дефекта к определённому типу по классификации Кривоглаза. Так, дефект, ведущий себя в случае кинематического рассеяния как дефект 1-го класса по Кривоглазу, при динамическом рассеянии может вести себя как дефект 2-го класса по Кривоглазу и наоборот. Например, при кинематическом рассмотрении наличие в кристалле дислокаций полностью снимает когерентное рассеяние. При динамическом подходе учёт эффектов многократности рассеяния, т.е. учёт блоховского характера распространяющихся в кристалле волн, приводит к эффективному обрезанию вклада далёких дислокаций в характеристики рассеяния и в результате даже при достаточно высокой концентрации дислокаций в кристалле сохраняются когерентные пики.

Таким образом, в случае динамического рассеяния необходимо использовать динамический (перенормированный) фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера L_{ds} вместо традиционно используемого кинематического фактора L_{kin} . Однако для точного количественного описания взаимосвязи динамического фактора L_{ds} и характеристик дефектной структуры необходимо построение строгой теории, основанной на последовательном учёте стоячего характера волновых полей, возникающих в кристалле при динамической дифракции, и, следовательно, на строгом учёте дисперсионного механизма влияния дефектов на динамические особенности фактора L_{ds} .

Работа выполнена при финансовой поддержке НАН Украины (договор № 28/15-Н).

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. М. А. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin:

- Springer: 1996).
2. В. Б. Молодкин, Е. А. Тихонова, *Физ. мет. металловед.*, **24**, № 3: 385 (1967).
 3. P. H. Dederichs, *Phys. Rev. B*, **1**, No. 4: 1306 (1970).
 4. С. Й. Оліховський, Є. М. Кисловський, В. Б. Молодкін, Є. Г. Лень, Т. П. Владімірова, О. В. Решетник, *Металлофиз. новітні технології*, **22**, № 6: 3 (2000).
 5. 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, В. В. Молодкин, Е. В. Фузик, *Успехи физики металлов*, **15**, № 2: 55 (2014).

REFERENCES

1. M. A. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin: Springer: 1996).
2. V. B. Molodkin and E. A. Tikhonova, *Fiz. Met. Metalloved.*, **24**, No. 3: 385 (1967) (in Russian).
3. P. H. Dederichs, *Phys. Rev. B*, **1**, No. 4: 1306 (1970).
4. S. J. Olikhovs'ky, Ye. M. Kislovs'ky, V. B. Molodkin, Ye. G. Len', T. P. Vladimirova, and O. V. Reshetnyk, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **22**, No. 6: 3 (2000) (in Ukrainian).
5. V. V. Lizunov, V. B. Molodkin, S. V. Lizunova, N. G. Tolmachev, O. S. Skakunova, S. V. Dmitriev, B. V. Sheludchenko, S. M. Brovchuk, L. M. Skapa, R. V. Lekhnyak, V. V. Molodkin, and K. V. Fuzik, *Uspehi Fiziki Metallov*, **15**, No. 2: 55 (2014) (in Russian).