Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології
Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies
2015, т. 13, № 1, сс. 99–115

PACS numbers: 07.85.Jy, 61.05.cc, 61.05.cf, 61.05.cp, 61.46.Hk, 61.72.Dd, 81.07.Bc

Дисперсионная чувствительность картины рассеяния к дефектам в зависимости от толщины кристаллических изделий нанотехнологий. I. Теоретическая модель

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

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

Построена обобщённая модель дисперсионно чувствительной дифрактометрии неидеальных кристаллов, позволяющая проводить анализ дифференциальных и интегральных картин рассеяния для произвольных эффективных толщин кристалла. Введён параметр, характеризующий эффект аномального роста относительного вклада диффузного рассеяния. Предложенная теоретическая модель может обеспечить решение обратной многопараметрической задачи восстановления характеристик сложных дефектных структур в монокристаллах, применяемых в современных нанотехнологиях.

Побудовано узагальнену модель дисперсійно чутливої дифрактометрії неідеальних кристалів, яка уможливлює проводити аналіз диференціальних і інтеґральних картин розсіяння для довільних ефективних товщин кристалу. Введено параметр, який характеризує ефект аномального росту відносного внеску дифузного розсіяння. Запропонована теоретична модель може забезпечити розв'язання оберненої багатопараметричної задачі відновлення характеристик складних дефектних структур у монокристалах, які застосовуються в сучасних нанотехнологіях.

The generalized model of dispersion-sensitive diffractometry of imperfect crystals is developed. It allows analysing the differential and integral scattering patterns for any effective thicknesses of the crystal. Parameter characterizing the effect of the abnormal increase of the relative contribution of diffuse scattering is introduced. The proposed theoretical model can provide a solution to the multiparametric inverse problem of recovering the characteristics of complex defect structures within the single crystals used in current nanotechnologies.

Ключевые слова: динамическая дифрактометрия, дисперсионный механизм, многопараметрическая диагностика, микродефекты.

(Получено 2 марта 2015 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Современные технологии давно уже исчерпали возможности, которые им предоставлял широкий спектр физических свойств идеальных объёмных кристаллов. Сегодня на первый план вышли материалы, в которых целенаправленно создаются дефекты кристаллического строения, придающие им новые уникальные свойства. Нанотехнологии позволяют создавать кристаллические тела обладающие, например, свойствами нуль-, одно- и двухмерных квантовых объектов. Для этого в достаточно совершенных кристаллах создаются квантовые точки, провода и ямы. При этом особое значение приобретают методы неразрушающего определения и контроля как исходной, так и целенаправленно созданной в кристаллах дефектной структуры. Среди таких методов наибольшей информативностью и экспрессностью обладают рентгенодифракционные методы.

Ограниченность традиционных подходов, рассматривающих рассеяние излучений реальными кристаллами, как в рамках кинематической, так и динамической теорий, связанная с неполным учётом (или полным не учётом) многократности рассеяния, была ранее проанализирована в работах [1–7]. В связи с открытием дисперсионной природы многообразности динамической картины рассеяния излучений кристаллами с дефектами, появилась дополнительная возможность повышения информативности, чувствительности и однозначности многопараметрической диагностики дефектов за счёт комбинированного подхода. Этот подход предусматривает восстановление характеристик микро- и макроскопических полей деформаций в кристаллах путём одновременной обработки экспериментальных данных, полученных в различных условиях динамической дифракции и различными рентгенодифракционными методами (дифференциальными, интегрально-дифференциальными и интегральными, соответственно на трёх- (ТКД), двух- (ДКД) и однокристальных дифрактометрах) [7–11]. До появления комбинированного подхода теоретическое рассмотрение данного вопроса обычно предполагало, что вариация всех возможных условий дифракции является излишним усложнением, которого следует по возможности избегать. Это привело к тому, что и методы, основанные на единственно приемлемой для комбинированного подхода обобщённой статистической динамической теории, учитывающей весь комплекс динамических эффектов, также развивались для весьма ограниченного набора условий дифракции.

Наиболее полно различные условия дифракции были вначале учтены в рамках вышеуказанной теории при рассмотрении полных интегральных интенсивностей (ПИИ) [4, 5, 12, 13]. Это позволило использовать комбинирование зависимостей ПИИ от различных условий динамической дифракции (ДД) при многопараметрической диагностике нескольких типов дефектов в монокристаллах. Однако полного понимания механизмов и возможностей повышения информативности и однозначности многопараметрической диагностики дефектов за счёт комбинированного подхода удалось достичь лишь при обобщении этого подхода на различные дифференциальные методики [4, 7–11, 14–16]. Для этого аналитические выражения обобщённой статистической динамической теории рассеяния излучений в кристаллах с дефектами «произвольных» размеров для дифференциальных ДКД- и ТКД-профилей, ранее полученные лишь для случая брэгг-дифракции в толстом кристалле [1, 2, 17–19], были распространены на все основные условия динамической дифракции и экспериментальные методики, включая трёхкристальное картографирование обратного пространства [9, 11, 14–16].

При этом было установлено, что различие зависимостей брэгговской и диффузной составляющих картины рассеяния, как от условий динамической дифракции, так и от типа дефектов, позволяет, с одной стороны, управлять при неизменной дефектной структуре образца соотношением когерентной и диффузной составляющих динамической картины рассеяния, а также отдельными вкладами в неё от различных типов дефектов, за счёт изменения только условий дифракции. С другой стороны, реализовать для данного образца необходимый полный набор независимых дифракционных экспериментов, проведённых в различных условиях динамической дифракции и при помощи различных рентгенодифракционных методик, с целью однозначного решения путём их комбинированной обработки обратной задачи диагностики многопараметрической дефектной структуры монокристаллов, используемых в современных нанотехнологиях.

Однако в рамках комбинированного подхода всё ещё остаётся открытым ряд практически важных вопросов, разрешению некоторых из них и посвящена данная работа. А именно, в первой части работы построена учитывающая дисперсионный механизм проявления дефектов в картине рассеяния [10] единая теоретическая модель дифференциальных и интегральных картин динамической дифракции как для проходящих, так и для дифрагированных когерентных и диффузных волн в неидеальных кристаллах произвольной толщины. Во второй части работы, выходящей отдельной статьёй [20], проведён анализ дифференциальных и интегральных картин динамической дифракции для различных эффективных толщин кристалла, а также уточнена дисперсионная [10] физическая природа эффекта аномального роста относительного вклада диффузного рассеяния (ДР) с ростом толщины динамически рассеивающего неидеального монокристалла.

2. КОГЕРЕНТНАЯ СОСТАВЛЯЮЩАЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ИНТЕНСИВНОСТИ ЛАУЭ- И БРЭГГ-ДИФРАКЦИИ

Учитывая, что выражения для когерентной и диффузной составляющих динамической картины рассеяния в дифференциальных подходах получены для кристаллов произвольной толщины, дальнейший анализ проведён как для дифференциальных, так и для интегральных интенсивностей динамической дифракции, но последние рассчитываются путём численного интегрирования соответствующих дифференциальных распределений. Для этого необходимы выражения для брэгговской и диффузной составляющих динамической картины рассеяния в кристаллах произвольной толщины без искусственных ограничений на размеры содержащихся в них дефектов.

В случае лауэ-дифракции выражения для коэффициентов прохождения (T_{B}) и отражения (R_{B}) когерентных волн в кристалле с дефектами можно записать в виде [14]:

$$T_{\mathrm{B}}(\Delta\theta)=\frac{\exp[-(\mu_0+\mathrm{M}_{\mathrm{DS}})\,t]}{4\left|y^2+1\right|^2}\times$$
$$\times\left\{\left|y+\sqrt{y^2+1}\right|^2\exp(-Ktw_{\mathrm{i}})+\left|y-\sqrt{y^2+1}\right|^2\exp(Ktw_{\mathrm{i}})-\right. \tag{1}$$
$$\left.-2\,\mathrm{Re}\left[\left(y+\sqrt{y^2+1}\right)\left(y-\sqrt{y^2+1}\right)^{*}\exp(iKtw_{\mathrm{r}})\right]\right\},$$

$$R_{\mathrm{B}}(\Delta\theta)=\frac{\exp[-(\mu_0+\mathrm{M}_{\mathrm{DS}})\,t]}{4\left|y^2+1\right|^2}\left|\varsigma_\delta\right|^2\{\exp(Ktw_{\mathrm{i}})+\exp(-Ktw_{\mathrm{i}})-2\cos(Ktw_{\mathrm{r}})\}, \tag{2}$$

где $y=(\tilde{\alpha}-\alpha_0)\sigma^{-1}b^{1/2}$, $\tilde{\alpha}=-\Delta\theta\sin 2\theta_{\mathrm{B}}$, $\Delta\theta\cong\left|\mathbf{K}-\mathbf{K}_{\mathrm{B}}\right|/K$ — отклонение волнового вектора $\mathbf{K}$ падающей волны от точного брэгговского направлении $\mathbf{K}_{\mathrm{B}}$, соответствующего углу Брэгга θ_{B}, $K=2\pi/\lambda$ — модуль волнового вектора падающей волны, λ — длина волны в вакууме, $2\alpha_0=\chi_0+\Delta\chi^{\delta}_{\mathrm{HH}}-b^{-1}(\chi_0+\Delta\chi^{\delta}_{00})$, $\delta=1,\ 2$, $w_{\mathrm{r}}=\mathrm{Re}w$, $w_{\mathrm{i}}=\mathrm{Im}w$, $w=W/\gamma_{\mathrm{H}}$, $W=\sigma b^{-1/2}(y^2+1)^{1/2}$, $\sigma^2=(CE\chi_{-\mathrm{H}}+\Delta\chi^{\delta}_{0\mathrm{H}})(CE\chi_{\mathrm{H}}+\Delta\chi^{\delta}_{\mathrm{H}0})$, $\varsigma_\delta=[(CE\chi_{\mathrm{H}}+\Delta\chi^{\delta}_{\mathrm{H}0})(CE\chi_{-\mathrm{H}}+\Delta\chi^{\delta}_{0\mathrm{H}})^{-1}]^{1/2}$, t — толщина кристалла, $b=\gamma_0/\gamma_{\mathrm{H}}$ — параметр асимметрии лауэ-дифракции, γ_0 и γ_{H} — направляющие косинусы соответственно проходящей и дифрагированной волн, поляризационный множитель $C = 1$ или $C = \cos 2\theta_B$ соответственно для σ- и π-поляризаций вектора индукции электрического поля $\mathbf{D}$ волны в кристалле, χ_G — фурье-компоненты поляризуемости средней решётки кристалла с дефектами, $E = e^{-L_G}$ — статический фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера [21], $\Delta\chi_{\mathbf{GG}'}(\mathbf{q}_{\delta\tau})$ — дисперсионные поправки к волновым векторам «сильных» брэгговских волн ($\mathbf{G}, \mathbf{G}' = \mathbf{0}, \mathbf{H}$; $\tau, \delta = 1, 2$), описывающие ослабление когерентных волн вследствие диффузного рассеяния с комплексным переданным импульсом в кристалле [1]

$$\mathbf{q}_{\delta\tau} = \mathbf{k} + i\mu_i^{\delta\tau}\mathbf{n}, \tag{3}$$

где вектор $\mathbf{k} = \mathbf{K}' - \mathbf{K} - \mathbf{H}$ описывает отклонение волнового вектора $\mathbf{K}'$ диффузно рассеянной волны от узла обратной решётки $\mathbf{H}$ в вакууме, $\mathbf{H}$ — вектор дифракции, $\mathbf{n}$ — внутренняя нормаль к входной поверхности кристалла. Интерференционный коэффициент поглощения, учитывающий поправки вследствие многократности диффузного рассеяния, для данного значения комплексного переданного импульса $\mathbf{q}_{\delta\tau}$ имеет вид:

$$\mu_i^{\delta\tau} = K\,\mathrm{Im}(\Delta'_{\delta\tau} - \Delta_\delta), \tag{4}$$

где Δ_δ и $\Delta'_{\delta\tau}$ — аккомодации волновых векторов «сильных» брэгговских и диффузно рассеянных волн соответственно, рассчитываемые для конкретной геометрии дифракции [14–16].

Следует отметить, что формулы (1)–(4) учитывают влияние дисперсионного механизма управляемого условиями дифракции и селективного по типу и характеристикам дефектов усиления на порядки величины проявления в картине многократного рассеяния дефектов кристаллов. Этот учёт приводит, во-первых, к изменению, а именно, к появлению интерференционного характера зависимостей как для брэгговской, так и для диффузной составляющих отражательной и поглощательной способностей кристалла от структурозависящего фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера в первом приближении теории возмущений, что и обеспечивает уже в этом приближении появление зависимости характера влияния дефектов на картину рассеяния от условий дифракции, а также дополнительно приводит к появлению во втором приближении теории возмущений зависимости картины рассеяния от нового структурочувствительного параметра — фактора экстинкции за счёт рассеяния на дефектах, который зависит от условий дифракции взаимосвязано с зависимостью от типа и характеристик дефектов. И, наконец, во-вторых, фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера за счёт дисперсионного механизма заменяется новым «динамическим» фактором, который также приобретает зависимости не только от характеристик дефектов, но и от условий дифракции, которые также оказываются взаимосвязанными друг с другом.

Нормальный коэффициент фотоэлектрического поглощения в (1) и (2) равен

$$\mu_0 = -\frac{K\chi_{i0}}{2}\left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_H}\right), \tag{5}$$

а нормальный коэффициент поглощения, обусловленный мнимой частью дисперсионных поправок из-за ДР на дефектах к волновым векторам «сильных» брэгговских волн, в случае дифракции по Лауэ определяется как

$$M_{DS} = -\frac{K}{2}\operatorname{Im}\left(\frac{\Delta\chi_{00}^{\delta}}{\gamma_0} + \frac{\Delta\chi_{HH}^{\delta}}{\gamma_H}\right), \tag{6}$$

где $\operatorname{Im}(\Delta\chi_{GG}^{\delta}) < 0$ $(\mathbf{G} = \mathbf{0}, \mathbf{H})$. В выражении (5) $\chi_{i0} < 0$ представляет 0-ую фурье-компоненту мнимой части комплексной поляризуемости кристалла $\chi(\mathbf{r}) = \chi_r(\mathbf{r}) + i\chi_i(\mathbf{r})$. Таким образом, величины μ_0, $M_{DS} > 0$ и определяют затухание волн при распространении вглубь кристалла соответственно под произвольными углами к отражающим плоскостям ($t_{abs} = \mu_0^{-1}$ — глубина абсорбции излучения) и под углами, близкими к углу Брэгга, когда существенны динамические эффекты.

Аналогично в случае дифракции по Брэггу коэффициенты прохождения (T_B) и отражения (R_B) когерентных волн с учётом дисперсионного механизма проявления дефектов имеют вид [16]:

$$\begin{gathered} T_B(\Delta\theta) = 4\left|y^2 - 1\right| e^{-(\mu_0 + M_{DS})t} \left\{\left|y + \sqrt{y^2 - 1}\right| e^{Ktw_i} + \right. \\ \left. + \left|y - \sqrt{y^2 - 1}\right| e^{-Ktw_i} - 2\operatorname{Re}\left(\left(y + \sqrt{y^2 - 1}\right)^{*}\left(y - \sqrt{y^2 - 1}\right) e^{iKtw_r}\right)\right\}^{-1}, \end{gathered} \tag{7}$$

$$\begin{gathered} R_B(\Delta\theta) = |\varsigma|\left(e^{Ktw_i} + e^{-Ktw_i} - 2\cos Ktw_r\right)\left\{\left|y + \sqrt{y^2 - 1}\right| e^{Ktw_i} + \right. \\ \left. + \left|y - \sqrt{y^2 - 1}\right| e^{-Ktw_i} - 2\operatorname{Re}\left(\left(y + \sqrt{y^2 - 1}\right)^{*}\left(y - \sqrt{y^2 - 1}\right) e^{iKtw_r}\right)\right\}^{-1}, \end{gathered} \tag{8}$$

где $2\alpha_0 = \chi_0 + \Delta\chi_{HH}^{\delta} + (\chi_0 + \Delta\chi_{00}^{\delta})/b$, $\varsigma = (CE\chi_H + \Delta\chi_{H0}^{\delta})(CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}^{\delta})^{-1}$, w_r и w_i — действительная и мнимая части величины

$$w = (\gamma_0 |\gamma_H|)^{-1/2}\sigma\sqrt{y^2 - 1}. \tag{9}$$

В отличие от геометрии Лауэ, тут изменился знак γ_H, что привело к переобозначению некоторых зависящих от него величин, например, параметра асимметрии дифракции в случае брэгг-дифракции $b = \gamma_0 / |\gamma_{\mathbf{H}}|$ и длины экстинкции $\Lambda = \lambda(\gamma_0|\gamma_{\mathbf{H}}|)^{1/2}\sigma^{-1}$, кроме того появились отрицательные значения в подкоренных выражениях в (7), (8) (т.е. появилась область полного отражения). При этом коэффициент фотоэлектрического поглощения и коэффициент поглощения из-за диффузного рассеяния на дефектах соответственно равны:

$$\mu_0 = -\frac{K\chi_{i0}}{2}\left(\frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{|\gamma_{\mathbf{H}}|}\right), \tag{10}$$

$$M_{\mathrm{DS}} = -\frac{K}{2}\operatorname{Im}\left(\frac{\Delta\chi_{00}^{\delta}}{\gamma_0} - \frac{\Delta\chi_{\mathbf{HH}}^{\delta}}{|\gamma_{\mathbf{H}}|}\right), \tag{11}$$

где значения величин $\Delta\chi_{\mathbf{GG}}^{\delta}$ $(\mathbf{G} = \mathbf{0}, \mathbf{H})$ также определяются для случая геометрии дифракции по Брэггу [16].

3. ДИФФУЗНАЯ СОСТАВЛЯЮЩАЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ИНТЕНСИВНОСТИ ЛАУЭ- И БРЭГГ-ДИФРАКЦИИ

Диффузно рассеянные волны возникают из-за рассеяния сильных брэгговских волн на флуктуационных полях статических смещений атомов кристалла, порождённых хаотически распределёнными дефектами. Благодаря процессам многократного перерассеяния на периодической «в среднем» части восприимчивости (потенциале) кристалла в достаточно толстых кристаллах они аналогично сильным брэгговским волнам формируют динамическое волновое поле, имеющее квазиблоховский характер [12] и учитывающее дисперсионный механизм проявления дефектов. В двухволновом случае дифракции по Лауэ для диффузной компоненты дифференциальной отражательной способности кристалла можно записать выражение [15]:

$$R_{\mathrm{D}}(\mathbf{k}) = \frac{c(1-c)v_{\mathrm{c}}t}{\gamma_0\left|y^2+1\right|\left|y'^2+1\right|}\left(\frac{CEK^2}{4\pi}\right)^2\left|\frac{CE\chi_{\mathbf{H}} + \Delta\chi_{\mathbf{H}0}}{CE\chi_{-\mathbf{H}} + \Delta\chi_{0\mathbf{H}}}\right| \times$$
$$\times\sum_{\delta\tau\lambda\sigma}(-1)^{\delta+\tau+\lambda+\sigma} X_{\mathbf{H}}^{\delta\tau}\sqrt{\varsigma'_{\delta\tau}}\left(X_{\mathbf{H}}^{\lambda\sigma}\sqrt{\varsigma'_{\lambda\sigma}}\right)^{*}\Pi_{\delta\tau\lambda\sigma}\left(\mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}_{\delta\tau}}\right)\left(\mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}_{\lambda\sigma}}\right)^{*},\ \delta,\tau,\lambda,\sigma = 1, 2, \tag{12}$$

где c — концентрация случайно распределённых ограниченных дефектов, v_{c} — объём элементарной ячейки кристалла, $\mathbf{u}_{\mathbf{q}}$ — фурье-компоненты полей статических смещений от дефектов [21], $y' = (\tilde{\alpha}' - \alpha'_0)b^{1/2}(\sigma')^{-1}$, $\tilde{\alpha}' = -\Delta\theta'\sin(2\theta_{\mathrm{B}})$, $\Delta\theta'$ — отклонение волнового вектора диффузно рассеянной волны от точного брэгговского направления в вакууме, $2\alpha'_0 = \chi_0 + \Delta\chi'^{\delta\tau}_{\mathbf{HH}} - b^{-1}(\chi_0 + \Delta\chi'^{\delta\tau}_{00})$, $\sigma' = (CE\chi_{-\mathbf{H}} +$

$+\Delta\chi_{0\mathbf{H}}^{\prime\delta\tau})(CE\chi_{\mathbf{H}}+\Delta\chi_{\mathbf{H}0}^{\prime\delta\tau})$, $\varsigma_{\delta\tau}^{\prime}=(CE\chi_{\mathbf{H}}+\Delta\chi_{\mathbf{H}0}^{\prime\delta\tau})(CE\chi_{-\mathbf{H}}+\Delta\chi_{0\mathbf{H}}^{\prime\delta\tau})^{-1}$, $\Delta\chi_{\mathbf{GG}'}^{\prime\delta\tau}$ ($\mathbf{G}$, $\mathbf{G}'=\mathbf{0}$, $\mathbf{H}$) — дисперсионные поправки к волновым векторам диффузно рассеянных волн, соответствующих δ-му листу дисперсионной поверхности для когерентных волн,

$$X_{\mathbf{H}}^{\delta\tau}=\frac{\chi_{\mathbf{H}}c^{\prime(\delta\tau)}}{c^{(\delta)}\varsigma_{\delta\tau}^{\prime}}-\chi_{-\mathbf{H}}, \tag{13}$$

$$c^{(\delta)}=-\frac{-2\gamma_0\Delta_\delta+\chi_0+\Delta\chi_{00}^{\delta}}{CE\chi_{-\mathbf{H}}+\Delta\chi_{0\mathbf{H}}^{\delta}},\ c^{\prime(\delta\tau)}=-\frac{-2\gamma_0\Delta_{\delta\tau}^{\prime}+\chi_0+\Delta\chi_{00}^{\prime\delta\tau}}{CE\chi_{-\mathbf{H}}+\Delta\chi_{0\mathbf{H}}^{\prime\delta\tau}},\ \delta,\tau=1,2. \tag{14}$$

Множитель поглощения

$$\Pi_{\delta\tau\lambda\sigma}=\frac{\exp[-iKt(\Delta_\delta-\Delta_\lambda^{*})]-\exp[-iKt(\Delta_{\delta\tau}^{\prime}-\Delta_{\lambda\sigma}^{\prime *})]}{iKt(\Delta_{\delta\tau}^{\prime}-\Delta_{\lambda\sigma}^{\prime *}-\Delta_\delta+\Delta_\lambda^{*})} \tag{15}$$

играет ключевую роль в описании эффектов аномального поглощения и аномального прохождения интенсивности ДР в «толстых» кристаллах. В приближении «толстого» кристалла из 16-ти слагаемых в выражении (12) существенно отличными от нуля остаются только четыре, которые отвечают квазиблоховским диффузным волнам с аномально слабым поглощением (известный эффект Бормана для диффузных волн [12, 15]). В этом случае, все остальные слагаемые дают незначительный вклад в сумму в связи с быстрым убыванием множителя $\Pi_{\delta\tau\lambda\sigma}$, обусловленным аномально сильным поглощением.

Если выражение (12) переписать, вводя величину $R_{\mathrm{D}}^{\delta\tau\lambda\sigma}(\mathbf{k})$, в виде суммы

$$R_{\mathrm{D}}(\mathbf{k})=\sum_{\delta\tau\lambda\sigma}R_{\mathrm{D}}^{\delta\tau\lambda\sigma}(\mathbf{k}), \tag{16}$$

то коэффициент прохождения диффузно рассеянных волн в случае дифракции по Лауэ получается из (12) заменой $X_{\mathbf{H}}^{\delta\tau}$ на $(\varsigma_{\delta\tau}^{\prime})^{-1}X_{0}^{\delta\tau}=(c^{\prime(\delta\tau)}\varsigma_{\delta\tau}^{\prime})^{-1}X_{\mathbf{H}}^{\delta\tau}$, т.е.

$$T_{\mathrm{D}}(\mathbf{k})=\sum_{\delta\tau\lambda\sigma}R_{\mathrm{D}}^{\delta\tau\lambda\sigma}(\mathbf{k})\frac{1}{\varsigma_{\delta\tau}^{\prime}c^{\prime(\delta\tau)}}\left(\frac{1}{\varsigma_{\lambda\sigma}^{\prime}c^{\prime(\lambda\sigma)}}\right)^{*}. \tag{17}$$

Для случая дифракции по Брэггу дифференциальный коэффициент отражения для диффузных волн имеет вид [16]:

$$R_{\mathrm{D}}(\mathbf{k})=\frac{c(1-c)\nu_{\mathrm{c}}t}{\gamma_0}\left(\frac{CEK^2}{4\pi}\right)^2\sum_{\delta\tau\lambda\sigma}\frac{(-1)^{\delta+\tau+\lambda+\sigma}}{|U|^2|U'|^2}X_{\mathbf{H}}^{\delta\tau}(X_{\mathbf{H}}^{\lambda\sigma})^{*}\Pi_{\delta\tau\lambda\sigma}(\mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}_{\delta\tau}})(\mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}_{\lambda\sigma}})^{*}, \tag{18}$$

$$|U|^2 = \left|y + \sqrt{y^2 - 1}\right| e^{Ktw_\mathrm{i}} + \left|y - \sqrt{y^2 - 1}\right| e^{-Ktw_\mathrm{i}} -$$
$$-2\,\mathrm{Re}([y + \sqrt{y^2 - 1}]^* [y - \sqrt{y^2 - 1}] e^{iKtw_\mathrm{r}}),$$

$$|U'|^2 = \left|y' + \sqrt{y'^2 - 1}\right| e^{Ktw'_\mathrm{i}} + \left|y' - \sqrt{y'^2 - 1}\right| e^{-Ktw'_\mathrm{i}} -$$
$$-2\,\mathrm{Re}([y' + \sqrt{y'^2 - 1}]^* [y' - \sqrt{y'^2 - 1}] e^{iKtw'_\mathrm{r}}),$$

w'_r и w'_i — соответственно действительная и мнимая части величины

$$w' = (\gamma_0 |\gamma_\mathbf{H}|)^{-1/2} \sigma' \sqrt{y'^2 - 1}, \tag{19}$$

$$\Pi_{\delta\tau\lambda\sigma} = \frac{\exp[iKt(\Delta_\delta - \Delta_\lambda^* - \Delta'_{\delta\tau} + \Delta'^*_{\lambda\sigma})] - 1}{iKt(\Delta_\delta - \Delta_\lambda^* - \Delta'_{\delta\tau} + \Delta'^*_{\lambda\sigma})}. \tag{20}$$

Дифференциальный коэффициент прохождения $T_\mathrm{D}(\mathbf{k})$ для диффузно рассеянных волн получается из (18) заменой $X_\mathbf{H}^{\delta\tau}$ на величину

$$X_0^{\delta\tau} = \frac{X_\mathbf{H}^{\delta\tau}}{c'^{(\delta\tau)}} = \frac{\chi_\mathbf{H}}{c^{(\delta)}} - \frac{\varsigma'_{\delta\tau}\chi_{-\mathbf{H}}}{c'^{(\delta\tau)}}. \tag{21}$$

Тогда, учитывая (16), для коэффициента прохождения диффузно рассеянных волн можно записать:

$$T_\mathrm{D}(\mathbf{k}) = \sum_{\delta\tau\lambda\sigma} R_\mathrm{D}^{\delta\tau\lambda\sigma}(\mathbf{k}) \frac{1}{c'^{(\delta\tau)}} \left(\frac{1}{c'^{(\lambda\sigma)}}\right)^*; \tag{22}$$

$R_\mathrm{D}^{\delta\tau\lambda\sigma}(\mathbf{k})$ находится из (18). При дифракции по Брэггу динамический множитель $\Pi_{\delta\tau\lambda\sigma}$ (20) также описывает эффекты аномального поглощения и аномального прохождения в интенсивности ДР (18) и (22).

Выражения (12), (17) и (18), (22) записаны для области диффузного рассеяния Хуаня–Кривоглаза, т.е. для значений модуля переданного импульса $k \le k_\mathrm{m}$ (при всех значениях δ, τ, λ, σ). Для этой области в указанных выражениях можно выделить функцию

$$F(\mathbf{q}_{\delta\tau}, \mathbf{q}_{\lambda\sigma}) = F^\mathrm{H}(\mathbf{q}_{\delta\tau}, \mathbf{q}_{\lambda\sigma}) = (\mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}_{\delta\tau}})(\mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}_{\lambda\sigma}})^*.$$

Граница между областями диффузного рассеяния Хуаня–Кривоглаза (H) и Стокса–Вильсона (SW) определяется в обратном пространстве сферой радиуса $k_\mathrm{m} = 1/R_\mathrm{eff}$, где R_eff — эффективный радиус дефекта [9, 11]. В общем случае при рассмотрении ДР необходимо учитывать как область рассеяния Хуаня–Кривоглаза ($k \le k_\mathrm{m}$), так и область рассеяния Стокса–Вильсона ($k > k_\mathrm{m}$). При переходе в (18) и (22) к области Стокса–Вильсона каждую из величин $\mathbf{H}\mathbf{u}_\mathbf{q}$ при значениях модуля соответствующего переданного импульса $k > k_\mathrm{m}$ следует умножить дополнительно на функцию типа k_m/q (см. [15]), точнее, использовать функцию F в виде

$$F(\mathbf{q}_{\delta\tau}, \mathbf{q}_{\lambda\sigma}) = F^{\mathrm{SW}}(\mathbf{q}_{\delta\tau}, \mathbf{q}_{\lambda\sigma}) = \left(\frac{\sqrt{k_\mathrm{m}^2 + (\mu_\mathrm{i}^{\delta\tau})^2}\,\mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}_{\delta\tau}}}{|\mathbf{q}_{\delta\tau}|}\right)\left(\frac{\sqrt{k_\mathrm{m}^2 + (\mu_\mathrm{i}^{\lambda\sigma})^2}\,\mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}_{\lambda\sigma}}}{|\mathbf{q}_{\lambda\sigma}|}\right)^*. \quad (23)$$

Функцию F можно записать одновременно для обеих областей ДР:

$$F(\mathbf{q}_{\delta\tau}, \mathbf{q}_{\lambda\sigma}) = (f_{q_{\delta\tau}}\mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}_{\delta\tau}})(f_{q_{\lambda\sigma}}\mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}_{\lambda\sigma}})^*, \quad (24)$$

где

$$f_{q_{\delta\tau}} = \begin{cases} 1 \text{ при } k \le k_\mathrm{m}, \\ \sqrt{k_\mathrm{m}^2 + (\mu_\mathrm{i}^{\delta\tau})^2}\, q_{\delta\tau}^{-1} \text{ при } k > k_\mathrm{m}, \end{cases} \quad (25)$$

учитывает различные области рассеяния и обеспечивает непрерывность сшивки интенсивностей ДР на границе между ними, а $\mathbf{u}_\mathbf{q}$ выражается в явном виде через параметры дефектов [9, 11, 21]. Тогда дифференциальные коэффициенты отражения и прохождения диффузно рассеянных волн примут вид

$$R_\mathrm{D}(\mathbf{k}) = \sum_{\delta\tau\lambda\sigma} R_{\delta\tau\lambda\sigma}^{\mathrm{L,B}} F(\mathbf{q}_{\delta\tau}, \mathbf{q}_{\lambda\sigma}),\ T_\mathrm{D}(\mathbf{k}) = \sum_{\delta\tau\lambda\sigma} T_{\delta\tau\lambda\sigma}^{\mathrm{L,B}} F(\mathbf{q}_{\delta\tau}, \mathbf{q}_{\lambda\sigma}), \quad (26)$$

где коэффициенты $R_{\delta\tau\lambda\sigma}^{\mathrm{L}}$ и $T_{\delta\tau\lambda\sigma}^{\mathrm{L}}$ в случае дифракции по Лауэ находятся путём сравнения выражений (26) с (12) и (17), а коэффициенты $R_{\delta\tau\lambda\sigma}^{\mathrm{B}}$ и $T_{\delta\tau\lambda\sigma}^{\mathrm{B}}$ в случае брэгг-дифракции — с (18) и (22).

Полные дифференциальные коэффициенты прохождения и отражения определяются суммой соответствующих коэффициентов для брэгговских и диффузно рассеянных волн:

$$T(\mathbf{k}) = T_\mathrm{B}(\mathbf{k}) + T_\mathrm{D}(\mathbf{k}),\ R(\mathbf{k}) = R_\mathrm{B}(\mathbf{k}) + R_\mathrm{D}(\mathbf{k}). \quad (27)$$

При идеальной разрешающей способности трёхкристального дифрактометра (ТКД) для когерентных составляющих в (27) следует использовать выражения:

$$T_\mathrm{B}(\mathbf{k}) = T_\mathrm{B}(\Delta\theta)\delta(\Delta\theta')\delta(\varphi),\ R_\mathrm{B}(\mathbf{k}) = R_\mathrm{B}(\Delta\theta)\delta(\Delta\theta')\delta(\varphi), \quad (28)$$

где $\delta(x)$ — δ-функция Дирака.

Для более полного учёта инструментальных факторов в (27) необходимо проводить суммирование по σ- и π-поляризациям, различие между которыми учитывается поляризационным множителем C, а также дополнительное интегрирование, учитывающее расходимость и немонохроматичность падающего на образец пучка рентгеновского излучения, и влияние систем монохроматора и анализатора на конечный результат (см., например, [23]). При этом учёт основных инструментальных факторов требует при вычислении интенсивности ДР, регистрируемой на ТКД, величину F в (26) интегрировать по вертикальной расходимости (по составляющей переданного импульса $\mathbf{k}$, перпендикулярной плоскости дифракции, т.е. в нашем случае — по k_y), а для интенсивности, регистрируемой на высокоразрешающем ДКД с широко открытым окном детектора, проводить интегрирование по сфере Эвальда (по составляющей $\mathbf{k}$, касательной к этой сфере, как и для дисперсионных поправок). В случае ПИИ в (27) необходимо провести интегрирование брэгговской (с учётом инструментальных факторов) и диффузной составляющих по всем компонентам вектора $\mathbf{k}$.

Как уже отмечалось (см. (6), (11)), мнимая часть дисперсионных поправок $\Delta\chi_{\mathbf{GG}'} = P_{\mathbf{GG}'} - i\mu_{\mathbf{GG}'}/K$ $(\mathbf{G}, \mathbf{G} = \mathbf{0}, \mathbf{H})$ к волновым векторам сильных брэгговских волн определяет экстинкцию этих волн за счёт их рассеяния на дефектах и перехода в диффузный фон. Можно ввести соответствующий коэффициент экстинкции [11]:

$$\mu_{\rm ds}(k_0) \approx \mu_{\rm HH}(k_0) \approx \frac{\gamma_{\rm H}}{\gamma_0}\mu_{00}(k_0) \approx KP_{\rm HH}(k_0) \approx \frac{\gamma_{\rm H}}{\gamma_0}KP_{00}(k_0), \tag{29}$$

где величина $k_0 = K\Delta\theta\sin2\theta_{\rm B}$ определяет отклонение конца вектора диффузно рассеянной волны $'$ от сферы Эвальда; тут были учтены как связь между действительными и мнимыми частями дисперсионных поправок через соотношения Крамерса–Кронига, так и малость величин $\mu_{0\rm H}(k_0) \approx \mu_{\rm H0}(k_0) \approx 0$ и $P_{0\rm H}(k_0) \approx P_{\rm H0}(k_0) \approx 0$. В случае присутствия в кристалле нескольких типов дефектов и выполнения принципа суперпозиции вызванных ими полей упругих деформаций коэффициент экстинкции брэгговских волн из-за ДР можно представить в виде суммы вкладов от каждого типа дефекта α (индекс α учитывает не только тип дефекта, но и распределение дефектов каждого типа по размерам и ориентациям):

$$\mu_{\rm ds}(k_0) = \sum_\alpha \mu_{\rm ds}^\alpha(k_0). \tag{30}$$

Заметим, что аналогичные суммы появятся также в выражениях для диффузной составляющей дифференциальной интенсивности рассеяния (26), где коэффициенты $R_{\delta\tau\lambda\sigma}^{\rm L,B}$, $T_{\delta\tau\lambda\sigma}^{\rm L,B}$ и F зависят от конкретного типа дефекта α через его концентрацию c_α и радиус R_α, а также в выражении для показателя экспоненты статического фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера:

$$L_{\rm H} = \sum_\alpha L_{\rm H}^\alpha .$$

4. ОБУСЛОВЛЕННЫЙ ДИСПЕРСИОННЫМ МЕХАНИЗМОМ ПРОЯВЛЕНИЯ ДЕФЕКТОВ ЭФФЕКТ АНОМАЛЬНОГО РОСТА ОТНОСИТЕЛЬНОГО ВКЛАДА ДИФФУЗНОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ

Из выражений кинематической теории рассеяния излучений в неидеальных кристаллах [4, 21] следует, что всегда выполняются следующие равенства для интегрального коэффициента отражения ($R_{\rm i}$) и его брэгговской ($R_{\rm iB}$) и диффузной ($R_{\rm iD}$) составляющих:

$$R_{\rm i} = R_{\rm iB} + R_{\rm iD} = R_{\rm ip}^{\rm kin}, \quad (31)$$

$$R_{\rm iD}/R_{\rm iB} = (1 - e^{-2L_{\rm H}})/e^{-2L_{\rm H}} \approx 2L_{\rm H} \text{ при } L_{\rm H} << 1, \quad (32)$$

где $R_{\rm ip}^{\rm kin}$ — кинематический интегральный коэффициент отражения идеального кристалла.

Таким образом, при кинематическом рассеянии полная интегральная интенсивность не зависит от степени искаженности кристаллической решётки (см. (31)), а единственным структурночувствительным фактором является второй параметр ($R_{\rm iD}/R_{\rm iB}$), не зависящий для выбранного рефлекса от изменений остальных условий дифракции (см. (32)). При этом в случае кинематического рассеяния практически вся информация о дефектах содержится в дифференциальных угловых распределениях ДР, а когерентная составляющая этих распределений лишь уменьшается пропорционально интегральному фактору $e^{-2L_{\rm H}}$.

Как показано в [1–3, 10, 14], полный учёт всех эффектов многократности и, следовательно, дисперсионного механизма проявления дефектов в брэгговском и диффузном рассеянии при их самосогласованном описании делает динамическое когерентное рассеяние не менее чувствительным к характеристикам дефектов, чем ДР. Причём эти составляющие полной картины рассеяния по-разному зависят как от параметров дефектов, так и от условий дифракции. Последнее и обеспечивает радикальное повышение информативности и чувствительности диагностики при переходе от кинематической к динамической картине рассеяния, что экспериментально проявляется как чувствительная к дефектам многообразность динамической картины рассеяния в различных условиях дифракции [4–8, 10].

Как можно видеть из приведённых в предыдущих разделах выражений обобщённой динамической теории рассеяния излучений неидеальными кристаллами, в предельном случае кинематически тонкого кристалла когерентная и диффузная составляющие нарастают с глубиной линейно. При достижении глубин, порядка глубины экстинкции брэгговская составляющая картины динамического рассеяния оказывается полностью сформированной и выходит на максимум. С дальнейшим ростом толщины поглощающего кристалла происходит переход к динамически тонкому, а затем и к «толстому» кристаллам. В последнем предельном случае интенсивность когерентной составляющей в случае дифракции по Лауэ уменьшается, а при дифракции по Брэггу выходит на постоянное значение. В диффузном рассеянии линейный множитель продолжает преобладать вплоть до глубины абсорбции, после которой превалирующим становиться вклад экспоненциального множителя, определяемого фотоэлектрическим, интерференционным и эффективным поглощениями диффузно рассеянных волн.

Переходная область толщин между предельными случаями «тонкого» и «толстого» кристаллов изучена плохо, хотя именно в ней следует ожидать максимальную чувствительность к дефектам картины динамического рассеяния, поскольку именно в этой области максимальна роль эффекта аномального роста диффузной составляющей (см., например, [4–8, 10]), обусловленного изменением соотношения вкладов брэгговской и диффузной компонент при изменении эффективной толщины кристалла ($\mu_0 t$). Этот эффект является одной из основных причин повышения чувствительности к дефектам и информативности динамической картины рассеяния по сравнению с кинематической. Его анализ открывает возможность целенаправленного выбора условий дифракции, максимально обеспечивающих чувствительность и информативность динамической дифрактометрии при решении обратной многопараметрической задачи восстановления параметров сложных дефектных структур в монокристаллах, применяемых в современных нанотехнологиях.

5. ВЫВОДЫ

Построена обобщённая модель динамической дифракции в неидеальных кристаллах для коэффициентов прохождения и отражения когерентной и диффузной составляющих дифференциальных и интегральных картин рассеяния в несовершенных кристаллах произвольной толщины. Предложено единое для произвольных толщин кристалла описание эффекта аномального роста относительного вклада диффузного рассеяния с толщиной в динамически тонком и дальнейшего его уменьшения в динамически толстом кристаллах.

Предложенная теоретическая модель, которая учитывает дисперсионную повышенную чувствительность к дефектам и информативность динамической картины рассеяния по сравнению с кинематической, обеспечивает возможность проведения целенаправленных комбинированных измерений и обработки данных одно-, двух- и трёхкристальной дифрактометрии, получаемых в целенаправленно выбранных и экспериментально реализуемых условиях динамической дифракции, при практическом решении обратной многопараметрической задачи восстановления параметров сложных дефектных структур в монокристаллических изделиях современных нанотехнологий.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, E. G. Len, and E. V. Pervak, *phys. status solidi (b)*, **227**: 429 (2001).
2. S. I. Olikhovskii, V. B. Molodkin, E. N. Kislovskii, E. G. Len, and E. V. Pervak, *phys. status solidi (b)*, **231**: 199 (2002).
3. E. N. Kislovskii, S. I. Olikhovskii, V. B. Molodkin, V. V. Nemoshkalenko, V. P. Krivitsky, E. G. Len, E. V. Pervak, G. E. Ice, and B. C. Larson, *phys. status solidi (b)*, **231**: 213 (2002).
4. 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**: 305 (2008).
5. А. П. Шпак, М. В. Ковальчук, В. Л. Носик, В. Б. Молодкин, В. Ф. Мачулин, И. М. Карнаухов, В. В. Молодкин, Е. Г. Лень, Дж. Айс, Р. И. Барабаш, Е. В. Первак, *Металлофиз. новейшие технол.*, **31**, № 5: 615 (2009).
6. А. П. Шпак, М. В. Ковальчук, В. Б. Молодкин, В. Л. Носик, С. В. Дмитриев, Е. Г. Лень, С. И. Олиховский, А. И. Низкова, В. В. Молодкин, Е. В. Первак, А. А. Катасонов, Л. И. Ниничук, А. В. Мельник, *Успехи физики металлов*, **10**, № 3: 229 (2009).
7. В. Б. Молодкин, М. В. Ковальчук, В. Ф. Мачулин, Э. Х. Мухамеджанов, С. В. Лизунова, С. И. Олиховский, Е. Г. Лень, Б. В. Шелудченко, С. В. Дмитриев, Е. С. Скакунова, В. В. Молодкин, В. В. Лизунов, В. П. Кладько, Е. В. Первак, *Успехи физики металлов*, **12**, № 3: 295 (2011).
8. V. B. Molodkin, M. V. Kovalchuk, A. P. Shpak, S. I. Olikhovskii, Ye. M. Kyslovskyy, A. I. Nizkova, E. G. Len, T. P. Vladimirova, E. S. Skakunova, V. V. Molodkin, G. E. Ice, R. I. Barabash, and I. M. Karnaukhov, *Diffuse Scattering and the Fundamental Properties of Materials* (Eds. R. I. Barabash, G. E. Ice, and P. E. A. Turchi) (New Jersey: Momentum Press: 2009), p. 391.
9. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. G. Len, B. V. Sheludchenko, S. V. Lizunova, Ye. M. Kyslovs'kyy, T. P. Vladimirova, E. V. Kochelab, O. V. Reshetnyk, V. V. Dovganyuk, I. M. Fodchuk, T. V. Lytvynchuk, V. P. Klad'ko, and Z. Świątek, *phys. status solidi (a)*, **208**, No. 11: 2552 (2011).
10. 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); http://ufm.imp.kiev.ua/ru/abstract/v15/i02/055.html.
11. E. N. Kislovskii, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. G. Len, B. V. Sheludchenko, S. V. Lizunova, T. P. Vladimirova, E. V. Kochelab, O. V. Reshetnik, V. V. Dovganyuk, I. M. Fodchuk, T. V. Litvinchuk, and V. P. Klad'ko, *J. Surface Investigation. X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, **7**, No. 3: 523 (2013).
12. Л. И. Даценко, В. Б. Молодкин, М. Е. Осиновский, *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами* (Киев: Наукова думка: 1988).

13. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, *Успехи физики металлов*, **5**, № 1: 51 (2004).
14. В. Б. Молодкін, С. Й. Оліховський, Б. В. Шелудченко, Є. Г. Лень, М. Т. Когут, *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*, **6**, № 3: 785 (2008).
15. В. Б. Молодкін, С. Й. Оліховський, Б. В. Шелудченко, Є. Г. Лень, М. Т. Когут, *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*, **6**, № 3: 807 (2008).
16. В. Б. Молодкін, С. Й. Оліховський, Б. В. Шелудченко, Є. Г. Лень, М. Т. Когут, *Металлофиз. новейшие технол.*, **30**, № 9: 1173 (2008).
17. С. Й. Оліховський, В. Б. Молодкін, Є. М. Кисловський, О. В. Решетник, Т. П. Владімірова, Є. Г. Лень, Дж. Е. Айс, Р. О. Барабаш, Р. Келер, Д. О. Григор'єв, *Металлофиз. новейшие технол.*, **27**, № 7: 947 (2005).
18. А. П. Шпак, В. Б. Молодкін, С. Й. Оліховський, Е. Н. Кисловский, О. В. Решетник, Т. П. Владимирова, Р. И. Барабаш, Д. О. Григорьев, *Металлофиз. новейшие технол.*, **27**, № 9: 1223 (2005).
19. Є. М. Кисловський, О. В. Решетник, Т. П. Владімірова, В. Б. Молодкін, С. Й. Оліховський, Б. В. Шелудченко, Р. Ф. Середенко, О. С. Скакунова, *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 5: 701 (2007).
20. 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, *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*, **13** (2015) (в печати).
21. M. A. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin: Springer: 1996).
22. В. Б. Молодкин, Е. А. Тихонова, *Физ. мет. металловед.*, **24**, № 3: 385 (1967).
23. О. С. Скакунова, С. Й. Оліховський, В. Б. Молодкін, Є. Г. Лень, Є. М. Кисловський, О. В. Решетник, Т. П. Владімірова, Є. В. Кочелаб, В. В. Лізунов, С. В. Лізунова, В. Л. Маківська, М. Г. Толмачов, Л. М. Скапа, Я. В. Василик, К. В. Фузік, *Металлофиз. новейшие технол.*, **37**, № 3: 409 (2015).

REFERENCES

1. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, E. G. Len, and E. V. Pervak, *phys. status solidi (b)*, **227**: 429 (2001).
2. S. I. Olikhovskii, V. B. Molodkin, E. N. Kislovskii, E. G. Len, and E. V. Pervak, *phys. status solidi (b)*, **231**: 199 (2002).
3. E. N. Kislovskii, S. I. Olikhovskii, V. B. Molodkin, V. V. Nemoshkalenko, V. P. Krivitsky, E. G. Len, E. V. Pervak, G. E. Ice, and B. C. Larson, *phys. status solidi (b)*, **231**: 213 (2002).
4. A. P. Shpak, M. V. Koval'chuk, I. M. Karnaukhov, V. V. Molodkin, E. G. Len, A. I. Nizkova, S. I. Olikhovskii, B. V. Sheludchenko, G. E. Ice, and R. I. Barabash, *Uspehi Fiziki Metallov*, **9**: 305 (2008) (in Russian).
5. A. P. Shpak, M. V. Koval'chuk, V. L. Nosik, V. B. Molodkin, V. F. Machulin, I. M. Karnaukhov, V. V. Molodkin, E. G. Len, G. E. Ice, R. I. Barabash, and E. V. Pervak, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **31**, No. 5: 615 (2009) (in Russian).
6. A. P. Shpak, M. V. Koval'chuk, V. B. Molodkin, V. L. Nosik, S. V. Dmitriev, E. G. Len, S. I. Olikhovskii, A. I. Nizkova, V. V. Molodkin, E. V. Pervak, A. A. Katasonov, L. I. Ninichuk, and A. V. Mel'nik, *Uspehi Fiziki Metallov*, **10**, No. 3: 229 (2009) (in Russian).

7. V. B. Molodkin, M. V. Koval'chuk, V. F. Machulin, E. Kh. Mukhamedzhanov, S. V. Lizunova, S. I. Olikhovskii, E. G. Len, B. V. Sheludchenko, S. V. Dmitriev, E. S. Skakunova, V. V. Molodkin, V. V. Lizunov, V. P. Klad'ko, and E. V. Pervak, *Uspehi Fiziki Metallov*, **12**, No. 3: 295 (2011) (in Russian).
8. V. B. Molodkin, M. V. Kovalchuk, A. P. Shpak, S. I. Olikhovskii, Ye. M. Kyslovskyy, A. I. Nizkova, E. G. Len, T. P. Vladimirova, E. S. Skakunova, V. V. Molodkin, G. E. Ice, R. I. Barabash, and I. M. Karnaukhov, *Diffuse Scattering and the Fundamental Properties of Materials*, (Eds. R. I. Barabash, G. E. Ice, and P. E. A. Turchi) (New Jersey: Momentum Press: 2009), p. 391.
9. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. G. Len, B. V. Sheludchenko, S. V. Lizunova, Ye. M. Kyslovs'kyy, T. P. Vladimirova, E. V. Kochelab, O. V. Reshetnyk, V. V. Dovganyuk, I. M. Fodchuk, T. V. Lytvynchuk, V. P. Klad'ko, and Z. Świątek, *phys. status solidi (a)*, **208**, No. 11: 2552 (2011).
10. 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); http://ufm.imp.kiev.ua/en/abstract/v15/i02/055.html.
11. E. N. Kislovskii, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. G. Len, B. V. Sheludchenko, S. V. Lizunova, T. P. Vladimirova, E. V. Kochelab, O. V. Reshetnik, V. V. Dovganyuk, I. M. Fodchuk, T. V. Litvinchuk, and V. P. Klad'ko, *J. Surface Investigation. X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, **7**, No. 3: 523 (2013).
12. L. I. Datsenko, V. B. Molodkin, and M. E. Osinovskiy, *Dinamicheskoe Rasseyanie Rentgenovskikh Luchey Real'nymi Kristallami (Dynamical X-Ray Scattering by Real Crystals)* (Kiev: Naukova Dumka: 1988) (in Russian).
13. A. P. Shpak, V. B. Molodkin, and A. I. Nizkova, *Uspehi Fiziki Metallov*, **5**, No. 1: 51 (2004) (in Russian).
14. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, B. V. Sheludchenko, E. G. Len, and M. T. Kogut, *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*, **6**, No. 3: 785 (2008) (in Ukrainian).
15. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, B. V. Sheludchenko, E. G. Len, and M. T. Kogut, *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*, **6**, No. 3: 807 (2008) (in Ukrainian).
16. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, B. V. Sheludchenko, E. G. Len, and M. T. Kogut, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **30**, No. 9: 1173 (2008) (in Ukrainian).
17. S. I. Olikhovskii, V. B. Molodkin, E. N. Kislovskii, O. V. Reshetnyk, T. P. Vladimirova, E. G. Len, G. E. Ice, R. O. Barabash, R. Keler, and D. O. Hryhor'yev, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **27**, No. 7: 947 (2005) (in Ukrainian).
18. A. P. Shpak, V. B. Molodkin, S. J. Olikhovs'ky, Ye. M. Kyslovs'ky, O. V. Reshetnyk, T. P. Vladimirova, R. I. Barabash, and D. O. Grigoriev, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **27**, No. 9: 1223 (2005) (in Ukrainian).
19. E. M. Kyslovskyy, O. V. Reshetnyk, T. P. Vladimirova, V. B. Molodkin, S. J. Olikhovskii, B. V. Sheludchenko, R. F. Seredenko, and O. S. Skakunova, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **29**, No. 5: 701 (2007) (in Ukrainian).
20. V. V. Lizunov, E. V. Kochelab, E. S. Skakunova, E. G. Len, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, N. G. Tolmachev, B. V. Sheludchenko, S. V. Lizunova, and

L. N. Skapa, *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*, **13** (2015) (to be published) (in Russian).

21. M. A. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin: Springer: 1996).
22. V. B. Molodkin and E. A. Tikhonova, *Fiz. Met. Metalloved.*, **24**, No. 3: 385 (1967) (in Russian).
23. O. S. Skakunova, S. I. Olikhovskii, V. B. Molodkin, E. G. Len, E. N. Kislovskii, O. V. Reshetnyk, T. P. Vladimirova, Ye. V. Kochelab, V. V. Lizunov, S. V. Lizunova, V. L. Makivs'ka, M. H. Tolmachov, L. M. Skapa, Ya. V. Vasylyk, and K. V. Fuzik, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **37**, No. 3: 409 (2015) (in Ukrainian).