

ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ЭКСПЕРИМЕНТА И ДИАГНОСТИКИ

PACS numbers: 61.05.cc, 61.05.cf, 61.05.cp, 61.72.Dd, 61.72.Lk, 81.40.Ef

Эвристическая модель деформационной зависимости полной интегральной интенсивности динамической дифракции для диагностики монокристаллов с дефектами нескольких типов

В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, В. В. Лизунов, В. В. Молодкин,
С. В. Дмитриев, Л. И. Макаренко, О. С. Кононенко, И. И. Демчик,
Н. П. Ирха

*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,
бульв. Академика Вернадского, 36,
03142 Киев, Украина*

С целью разработки подхода для диагностики несовершенств монокристаллов методом деформационной зависимости (ДЗ) полной интегральной интенсивности динамической дифракции (ПИИДД) предложена соответствующая эвристическая модель, справедливая в случаях, когда диффузная составляющая ПИИДД может быть соизмеримой с её когерентной составляющей или существенно превышать её. При этом измерения ДЗ ПИИДД при различных условиях дифракции и в разных областях деформации позволяют определять как параметры дефектной структуры, так и необходимые, изменяющиеся за счёт дефектов характеристики ДЗ. В результате была создана упрощённая модель диагностики хаотически распределённых дефектов методом ДЗ ПИИДД при отсутствии сегодня строгой теоретической модели, необходимой для этого случая, но без использования при этом эталонных образцов.

Ключевые слова: интегральная динамическая дифрактометрия, диффузное рассеяние, микродефекты.

Corresponding author: Vadym Borysovych Molodkin
E-mail: V.Molodkin@gmail.com

*G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine*

Citation: V. B. Molodkin, H. I. Nyzkova, V. V. Lizunov, V. V. Molodkin, S. V. Dmitriev, L. I. Makarenko, O. S. Kononenko, I. I. Demchyk, and N. P. Irkha, Heuristic Model of Deformation Dependence of Total Integrated Intensity of Dynamical Diffraction for Diagnostics of Single Crystals with Defects of Several Types, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, 40, No. 9: 1133–1147 (2018) (in Russian), DOI: 10.15407/mfint.40.09.1133.

З метою розробки підходу для діагностики недосконалостей монокристалів методом деформаційних залежностей (ДЗ) повної інтегральної інтенсивності динамічної дифракції (ПІДД) запропоновано відповідний евристичний модель, який є справедливим у випадках, коли дифузна складова ПІДД може бути порівнянною з її когерентною складовою або значно перевищувати її. При цьому вимірювання ДЗ ПІДД за різних умов дифракції та в різних областях деформації уможливають визначати як параметри дефектної структури, так і необхідні характеристики ДЗ, що змінюються за рахунок дефектів. В результаті було створено спрощений модель діагностики хаотично розподілених дефектів методом ДЗ ПІДД за відсутності сьогодні точного теоретичного моделю, потрібного для цього випадку, але без використання при цьому еталонних зразків.

Ключові слова: інтегральна динамічна дифрактометрія, дифузне розсіяння, мікродефекти.

For the development of approach to diagnostics of single crystals with microdefects by the method of deformation dependences (DD) of the total integrated intensity of dynamical diffraction (TIIDD), the corresponding heuristic model is created. The proposed model is correct in cases, when the diffuse component of the TIIDD is comparable with its coherent component or substantially exceeds it. The measurement of the DD TIIDD under various diffraction conditions and in different deformation regions makes it possible to determine both the defect-structure parameters and the required DD characteristics, which are changed due to microdefects. As a result, in the absence of the rigorous theory for this case, a simplified model without the use of reference samples for diagnostics of chaotically distributed microdefects by the DD TIIDD method is created.

Key words: integrated dynamical diffractometry, diffuse scattering, microdefects.

(Получено 17 июня 2018 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Создание материалов с новыми, необходимыми для практического применения свойствами часто достигается путём формирования в них уникальных структурных и фазовых состояний, а значит, требует соответствующего повышения уровня функциональных возможностей экспериментальной диагностической базы для контроля структурного совершенства разрабатываемых материалов. При этом важнейшую роль играют дифрактометрические методы, позволяющие проводить неразрушающую диагностику изделий.

Ранее было показано, что чувствительность к характеристикам дефектов зависимостей картины динамического рассеяния от условий дифракции, возникающая за счёт дисперсионного механизма влияния дефектов на картину и эффекта аномального роста вклада диф-

фузного рассеяния, позволяет существенно повысить чувствительность и информативность диагностики (см., например, работы [1, 2]).

При этом особый интерес вызывает применение методов полной интегральной интенсивности динамической дифракции (ПИИДД), вследствие их высокой чувствительности и экспрессности, в частности, метода деформационных зависимостей (ДЗ) ПИИДД. При этом измеряется именно полная, т.е. сумма когерентной и диффузной составляющих интегральной интенсивности, что позволяет количественно определять характеристики микродефектов.

В работах [3, 4] рассматривалось применение ДЗ ПИИДД для определения параметров дефектной структуры кристаллов кремния. Однако в этих статьях были рассмотрены кристаллы с толщинами заметно меньшими длины абсорбции и содержащие относительно малое количество дефектов, следствием чего являлась малая величина диффузной составляющей ПИИДД и, соответственно, эффекта её аномального роста. В работе [5] были экспериментально изучены диагностические возможности метода ДЗ ПИИДД для монокристаллов, содержащих большее количество дефектов, т.е. когда диффузная составляющая ПИИДД соизмерима с её когерентной составляющей или существенно превышает её. Было показано, что в таких случаях ДЗ ПИИДД аномально чувствительны и уникально информативны при их использовании для определения характеристик микродефектов в многопараметрических монокристаллических системах.

Однако строгое теоретическое описание ДЗ ПИИДД в кристаллах с дефектами отсутствует. На сегодня создана теория, описывающая влияние упругой деформации только на интегральную интенсивность динамической дифракции (ИИДД), применимая лишь для бездефектного кристалла (см. работы [6–8]). Обобщение данной теории на случай кристаллов с искажённой структурой приводит к необходимости работы со сложным математическим аппаратом, что ставит под сомнение целесообразность её использования для диагностики дефектов на практике. Таким образом, для обеспечения возможности проведения диагностики несовершенств структуры монокристаллов методами ДЗ ПИИДД необходимо создание простых полуфеноменологических моделей ДЗ ПИИДД в кристаллах с дефектами.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

В работах [3, 4] с использованием теории, созданной в работах [6–8] для ДЗ ИИДД в кристаллах без дефектов, был проанализирован характер изменения ДЗ ИИДД с толщиной кристаллов и с вариацией других условий дифракции. На этой основе, а также при использовании ряда экспериментов с дефектными кристаллами и результа-

тов теории ПИИДД в кристаллах с дефектами без изгиба в отмеченных статьях была построена полуэмпирическая аналитическая модель ДЗ ПИИДД в кристаллах с дефектами, пригодная для диагностики параметров структурных дефектов в кристаллах.

Модель, предложенная в работах [3, 4], имеет вид:

$$R_{ib} = R_{icoh} (1 + \alpha BT + \beta B^2 T^2) \left(1 + \gamma \frac{M_0}{r} \right) \exp \left[-\delta \frac{M_0^2}{r^2} \right] + R_{id} (1 + \alpha' BT) \left(1 + \gamma' \frac{M_0}{r} \right) \exp \left[-\delta' \frac{M_0^2}{r^2} \right], \quad (1)$$

$$B = \frac{\lambda^2 \sin \psi [1 + \gamma_0 \gamma_1 (1 + \nu)]}{2\pi |\chi_{hr}|^2 rd}, \quad T = \frac{\pi t |\chi_{hr}|}{\lambda \sqrt{\gamma_0 \gamma_1}}, \quad M_0 = \frac{\chi_{i0} (1 + \tilde{\beta}) t}{\sqrt{|\tilde{\beta}|} C |\chi_{hr}|}, \quad (2)$$

где R_{icoh} — когерентная составляющая полной интегральной отражательной способности неизогнутого кристалла, R_{id} — диффузная составляющая полной интегральной отражательной способности неизогнутого кристалла, r — радиус кривизны упругого изгиба, $D = BT$ — эффективная деформация, $\tilde{\beta} = \gamma_0 / \gamma_1$, ψ — угол между отражающей поверхностью и нормалью к поверхности кристалла, λ — длина волны рентгеновского излучения, $\gamma_0 = \cos(\theta_B + \psi)$, $\gamma_1 = \cos(\theta_B - \psi)$, θ_B — угол Брэгга, ν — коэффициент Пуассона, χ_{hr} — действительная часть фурье-компоненты восприимчивости кристалла, χ_{i0} — мнимая часть фурье-компоненты восприимчивости кристалла, C — поляризационный множитель, $d = a (h^2 + k^2 + l^2)^{-1/2}$, a — постоянная решётки, h, k, l — индексы Миллера, t — толщина кристалла [6].

Полученные выражения для ДЗ ПИИДД в кристаллах с дефектами учитывают ДЗ отражательных и поглощательных способностей кристаллов, вклад которых определяется соответственно параметрами модели α, β и γ, δ для брэгговской, а также α', β' и γ', δ' для диффузной составляющих ПИИДД. Для определения множителей модели в работах [3, 4] использована теория ДЗ ИИДД в кристаллах без дефектов [6–8], результаты теории ПИИДД в кристаллах с дефектами без изгиба [9] или со слабым изгибом [10], а также результаты измерений ДЗ ПИИДД для эталонных образцов с известными характеристиками дефектности [11, 12].

В работе [3] было установлено, что достаточно точное описание ДЗ достигается с фиксированными параметрами и единого вида выражениями только отдельно для каждого из определённых узких диапазонов радиусов кривизны деформации. Однако эти параметры оказываются избирательно зависящими от каждого набора характеристик условий дифракции (длины волны, толщины кристаллов, индексов отражения, геометрии дифракции и др.).

Также было показано, что эвристически построить модель ДЗ ПИИДД в кристаллах с дефектами как основу диагностического метода оказалось возможным только благодаря наличию при динамической дифракции дисперсионного механизма, и, следовательно, при факторизации влияния дефектов и параметра деформации отдельно на когерентную и на диффузную составляющие ПИИДД нефакторизованности их влияния на суммарную (полную) ИИДД.

В работе [3] показано, что для целого ряда рассмотренных случаев при фиксированных условиях дифракции образцы, которые отличаются только дефектной структурой, описываются одинаковой моделью и одними и теми же множителями для ДЗ.

В работе [4] было количественно проанализировано различие ДЗ когерентной (R_{coh}) и диффузной (R_{id}) составляющих ПИИДД как между собой, так и для каждого из нескольких типов дефектов, одновременно присутствующих в монокристаллическом образце. Это открыло принципиальную возможность определения параметров дефектов разного типа при использовании (наряду с вариацией условий дифракции) различных участков ДЗ ПИИДД с резкой ДЗ отношения $R_{\text{coh}}/R_{\text{id}}$ (вклада диффузной составляющей). Показано, что при изменении условий Лауэ-дифракции от соответствующих приближению толстого кристалла к соответствующим приближению тонкого кристалла и при расширении области изменения степени упругой деформации появляется возможность управления интервалом и характером изменения отношения $R_{\text{coh}}/R_{\text{id}}$, а в результате — чувствительностью ДЗ ПИИДД к типу и характеристикам микродефектов.

Основным недостатком созданных моделей является необходимость для получения параметров α' , β' , γ' , δ' для каждой новой условий дифракции предварительно проводить соответствующие экспериментальные измерения ДЗ ПИИДД для эталонных кристаллов с известной дефектной структурой и полагать эти параметры независимыми от характеристик дефектов, что не всегда оказывается справедливым.

В настоящей работе предлагается другой подход, не требующий дополнительных предварительных экспериментов ни для каких эталонных образцов, кроме исследуемого образца. Данный подход состоит в варьировании условий дифракции и областей деформации. Этого оказывается достаточным, чтобы определять как параметры дефектной структуры, так и необходимые изменяющиеся за счёт дефектов характеристики деформационной зависимости.

Для реализации предложенного подхода сначала необходимо определить коэффициенты α , β , γ и δ для идеального кристалла, методом, аналогичным использованному в работе [3], но с другой моделью для ДЗ поглощательной способности ИИДД. Для описания ДЗ ИИДД для бездефектного упруго изогнутого кристалла в насто-

ТАБЛИЦА 1. Коэффициенты модели (3) и добротность подгонки для кристалла кремния $t = 430$ мкм.**TABLE 1.** The coefficients of the model (3) and the quality factor of the fitting for a silicon crystal $t = 430$ μm .

BT	α	β	$\gamma, \text{мкм}^\delta$	δ	КДП
$0 \leq BT \leq 0,4$	0,277	1,241	$2,1 \cdot 10^{13}$	2	0,0000331
$0,5 \leq BT \leq 1$	0,303	1,246	$9,89 \cdot 10^{10}$	1,669	0,000607
$1 \leq BT \leq 1,4$	0,339	1,251	$3,504 \cdot 10^9$	1,449	0,00058
$1,4 \leq BT \leq 1,8$	0,375	1,256	$1,738 \cdot 10^8$	1,25	0,00042
$1,8 \leq BT \leq 2,2$	0,411	1,255	$2,645 \cdot 10^7$	1,1236	0,000492

ящей работе использовалась формула (3), содержащая минимальное количество слагаемых:

$$R_{\text{ib}} / R_{\text{icoh } 0} = (1 + \alpha BT + \beta B^2 T^2) \exp(-\gamma |r^{-1}|^\delta \sqrt{M_0}). \quad (3)$$

Здесь R_{ib} — ИИДД упруго изогнутого кристалла, не содержащего микродефектов, $R_{\text{icoh } 0}$ — ИИДД идеального кристалла. Значения коэффициентов α , β , γ и δ подбираются путём подгонки рассчитываемых по модели (3) зависимостей к теоретическим ДЗ ИИДД для упруго изогнутого кристалла, не содержащего микродефектов [6–8]. Подгонка ДЗ проводится для (220) MoK_α -лауэ-рефлексов рентгеновского излучения для образцов кремния разных толщин. Результаты подгонки для различных интервалов изменения эффективной деформации, а также значения коэффициента добротности подгонки представлены в табл. 1–4 и на рис. 1. При этом на рис. 1 сплошная линия — расчёт по теории для упруго изогнутого кристалла без дефектов, штриховая линия — расчёт по модели (3), пунктирная

ТАБЛИЦА 2. Коэффициенты модели (3) и добротность подгонки для кристалла кремния $t = 426$ мкм.**TABLE 2.** The coefficients of the model (3) and the quality factor of the fitting for a silicon crystal $t = 426$ μm .

BT	α	β	$\gamma, \text{мкм}^\delta$	δ	КДП
$0 \leq BT \leq 0,4$	0,283	1,242	$1,55 \cdot 10^{13}$	2	0,0002
$0,5 \leq BT \leq 1$	0,295	1,247	$9,55 \cdot 10^{10}$	1,669	0,00093
$1 \leq BT \leq 1,4$	0,336	1,252	$3,42 \cdot 10^9$	1,449	0,000484
$1,4 \leq BT \leq 1,8$	0,371	1,255	$1,706 \cdot 10^8$	1,25	0,000541
$1,8 \leq BT \leq 2,2$	0,399	1,256	$2,604 \cdot 10^7$	1,1236	0,000141

ТАБЛИЦА 3. Коэффициенты модели (3) и добротность подгонки для кристалла кремния $t = 454$ мкм.**TABLE 3.** The coefficients of the model (3) and the quality factor of the fitting for a silicon crystal $t = 454$ μm .

BT	α	β	$\gamma, \text{мкм}^\delta$	δ	КДП
$0 \leq BT \leq 0,4$	0,306	1,288	$2,52 \cdot 10^{13}$	2	0,0000243
$0,5 \leq BT \leq 1$	0,334	1,292	$1,15 \cdot 10^{11}$	1,669	0,000541
$1 \leq BT \leq 1,4$	0,381	1,299	$3,95 \cdot 10^9$	1,449	0,000819
$1,4 \leq BT \leq 1,8$	0,423	1,302	$1,909 \cdot 10^8$	1,25	0,000677
$1,8 \leq BT \leq 2,2$	0,454	1,305	$2,88 \cdot 10^7$	1,1236	0,000161

линия — первый множитель модели (3), описывающий ДЗ отражательной способности ИИДД, штрих-пунктирная линия — второй множитель модели (3), описывающий ДЗ поглощательной способности ИИДД.

Рассмотрим теперь кристалл с дефектами, теперь ПИИДД R_{ib}^{d} такого реального упруго изогнутого кристалла является суммой когерентной $R_{\text{ib}}^{\text{coh}}$ и диффузной $R_{\text{ib}}^{\text{dif}}$ составляющих:

$$R_{\text{ib}}^{\text{d}} = R_{\text{ib}}^{\text{coh}} + R_{\text{ib}}^{\text{dif}}.$$

При этом, следуя работам [6–8] представим когерентную составляющую в виде:

ТАБЛИЦА 4. Коэффициенты модели (3) и добротность подгонки для кристалла кремния $t = 488$ мкм.**TABLE 4.** The coefficients of the model (3) and the quality factor of the fitting for a silicon crystal $t = 488$ μm .

BT	α	β	$\gamma, \text{мкм}^\delta$	δ	КДП
$0 \leq BT \leq 0,4$	0,343	1,288	$2,845 \cdot 10^{13}$	2	0,0000587
$0,5 \leq BT \leq 0,9$	0,3745	1,292	$1,325 \cdot 10^{11}$	1,669	0,000141
$1 \leq BT \leq 1,4$	0,432	1,3	$4,455 \cdot 10^9$	1,449	0,000679
$1,4 \leq BT \leq 1,8$	0,475	1,306	$2,118 \cdot 10^8$	1,25	0,000567
$1,8 \leq BT \leq 2,0$	0,522	1,345	$3,247 \cdot 10^7$	1,1236	0,000511
$2,2 \leq BT \leq 2,6$	0,57	1,344	$3,171 \cdot 10^7$	1,1236	0,00204
$2,6 \leq BT \leq 3,0$	0,612	1,341	$5,047 \cdot 10^6$	1	0,00158
$3,0 \leq BT \leq 3,4$	0,649	1,3415	$1,499 \cdot 10^6$	0,91743	0,000721
$3,4 \leq BT \leq 3,8$	0,679	1,342	$3,64 \cdot 10^5$	0,81967	0,000745

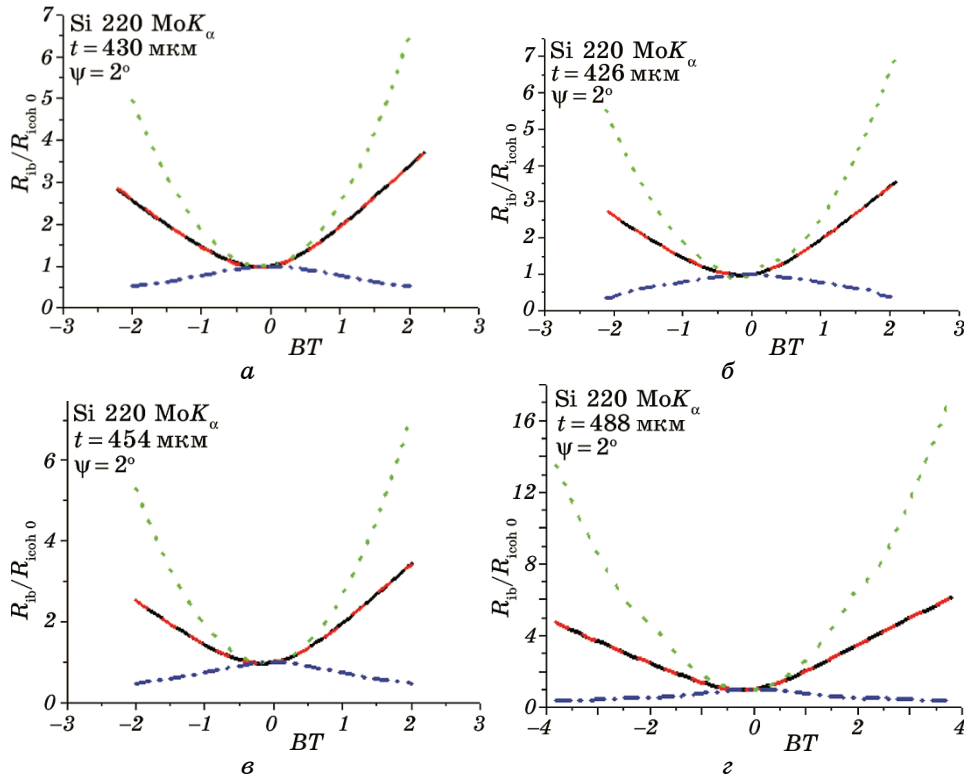


Рис. 1. ДЗ отношения ИИДД изогнутого кристалла R_{ib} к ИИДД кристалла в отсутствие изгиба $R_{icoh 0}$ ($R_{ib}/R_{icoh 0}$): $t = 430$ мкм (а), $t = 426$ мкм (б), $t = 454$ мкм (в), $t = 488$ мкм (г).

Fig. 1. DD of the ratio of the IIDD of the bent crystal R_{ib} to the IIDD of the crystal in the absence of bending $R_{icoh 0}$ ($R_{ib}/R_{icoh 0}$): $t = 430$ μm (а), $t = 426$ μm (б), $t = 454$ μm (в), $t = 488$ μm (г).

$$R_{ib}^{coh} = \frac{C|\chi_{rH}^*|}{2\sin 2\theta} e^{-M_0^*} \left[1 - \exp\left(-\frac{\pi C^2}{2|B|}\right) \int_{-1}^1 \frac{d\xi}{\sqrt{1-\xi^2}} \times \right. \\ \left. \frac{\text{ch}(M_\beta^* \xi) \text{ch}[(M^* C^2 / 2 + 2) \ln(\sqrt{1 + (D/C)^2 (1 - \xi^2)} + (D/C)\sqrt{1 - \xi^2})]}{[1 + (D/C)^2 (1 - \xi^2)]^{1/2}}, \right] \quad (4)$$

здесь M_0^* — показатель фактора нормального поглощения, M_β^* описывает влияние поглощения в асимметричной геометрии Лауэ, M^* — коэффициент аномального поглощения.

Следует обратить внимание на основное отличие формулы (4) от результатов, полученных в [3–5], которое заключается в перенормировке констант динамического рассеяния $\chi_{iH}^* \rightarrow \chi_{iH}^* e^{-L}$,

$\chi_{\text{rH}}^* \rightarrow \chi_{\text{rH}} e^{-L}$, $\mu_0^* \rightarrow \mu_0 + \mu_{\text{ds}}$ для когерентной составляющей, где μ_{ds} — коэффициент эффективного поглощения когерентной составляющей ПИИДД из-за ухода части интенсивности в диффузный фон в результате рассеяния на дефектах. Для нахождения диффузной составляющей ПИИДД используется выражение:

$$R_{\text{ib}}^{\text{dif}} = R_{\text{id}} (1 + \alpha' VT + \beta' B^2 T^2) \exp(-\gamma |r^{-1}|^\delta \sqrt{M_0^*}), \quad (5)$$

где $M_0^* = M_0 + \mu^* t$, где μ^* — коэффициент эффективного поглощения диффузной составляющей ПИИДД из-за ухода части интенсивности в диффузный фон в результате рассеяния на дефектах.

Учитывая слабое влияние поглощения в приближении тонкого кристалла, значения коэффициентов γ и δ полагаются одинаковыми для деформационных зависимостей обеих составляющих ПИИДД кристалла с дефектами и равными значениям коэффициентов γ и δ для ДЗ ИИДД упруго изогнутого кристалла, не содержащего микродефектов. Такая возможность обеспечивается тем, что множитель для поглотительной способности формируется одинаково для брэгговских и диффузных волн, поскольку в обоих случаях рассчитывается интеграл по одной и той же дисперсионной поверхности.

В результате неизвестными остаются только α' и β' для ДЗ диффузной составляющей ПИИДД. Для определения значений коэффициентов α' , β' , L , μ_{ds} и μ^* использованы экспериментально полученные для образцов кремния ДЗ ПИИДД, приведённые в работе [5].

Таким образом, значения параметров микродефектов и коэффициентов ДЗ отражательного множителя диффузной составляющей α' и β' подбираются путём подгонки рассчитанных по формулам (4), (5) к экспериментальным ДЗ ПИИДД для упруго изогнутого кристалла с микродефектами, полученным для (220) MoK_α -лауэр-рефлексов рентгеновского излучения.

В качестве образцов использовались кристаллы кремния, толщины и условия термообработки которых приведены в табл. 5.

ТАБЛИЦА 5. Толщины и условия термообработки образцов монокристаллического Si.

TABLE 5. Thicknesses and heat treatment conditions for single-crystal Si.

№ образца	Толщина образца t , мкм	Температура и время отжига
1	426	После выращивания
2	454	1160°C, 4 часа
3	488	1080°C, 6 часов
4	430	1160°C, 10 часов

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЁТОВ

Результаты апробации предложенной модели (4), (5) для образцов, экспериментально исследованных в работе [5], представлены на рис. 2–5.

На рисунке 2 кривые рассчитаны по модели (4), (5); при этом сплошными кривыми представлены ДЗ ПИИДД, штриховой линией — ДЗ когерентной составляющей ПИИДД, штрих-пунктирной линией — ДЗ диффузной составляющей ПИИДД, а пунктирной — ДЗ ИИДД для упруго изогнутого идеального кристалла. При расчётах были использованы следующие параметры модели, определённые путём фиттирования: $\alpha'/\alpha = 1$, $\beta'/\beta = 0,965$, $L = 0,0104$, $\mu_{ds} = 0,00042 \text{ мкм}^{-1}$ ($\mu_{ds}/\mu_0 = 0,296$), $\mu^* = 0,000118 \text{ мкм}^{-1}$ ($\mu^*/\mu_0 = 0,0831$). Установлено, что дефектная структура исходного кристалла состоит из дислокационных петель: $R_{\text{loops}} = 0,335 \text{ мкм}$, $c_{\text{loops}} = 1,245 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$.

На рисунке 3 представлены результаты диагностики кристалла кремния, отожжённого в течение 4 часов при температуре 1160°C . Все обозначения кривых на данном и последующих рисунках аналогичны обозначениям рис. 2. При расчётах были использованы следующие параметры модели, определённые путём фиттирования: $\alpha'/\alpha = 0,58$, $\beta'/\beta = 0,915$, $L = 0,0158$, $\mu_{ds} = 0,000951 \text{ мкм}^{-1}$ ($\mu_{ds}/\mu_0 = 0,6697$), $\mu^* = 0,000284 \text{ мкм}^{-1}$ ($\mu^*/\mu_0 = 0,2$). Дефектная структура кристалла состоит из сферических кластеров: $R_{\text{cl}} = 0,14454 \text{ мкм}$,

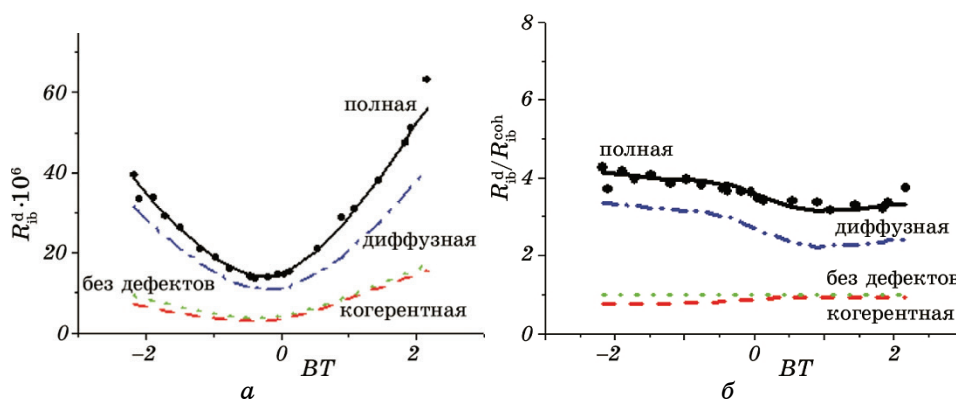


Рис. 2. ДЗ ПИИДД кристалла Si толщиной 426 мкм (а) и эта же зависимость (рис. 2, а), нормированная на величину когерентной составляющей ДЗ ПИИДД, (б). Маркёры — экспериментальные данные [6], кривые — расчёты по формулам (4), (5). Излучение MoK_α , рефлекс (220), $\psi = 2^\circ$.

Fig. 2. DD of TIIDD of Si crystal with a thickness of 426 μm (a) and the same dependence (Fig. 2, a), normalized to the coherent component of the DD of TIIDD (b). Markers are experimental data [6]; curves are calculations by the formulas (4), (5). Radiation MoK_α , reflex (220), $\psi = 2^\circ$.

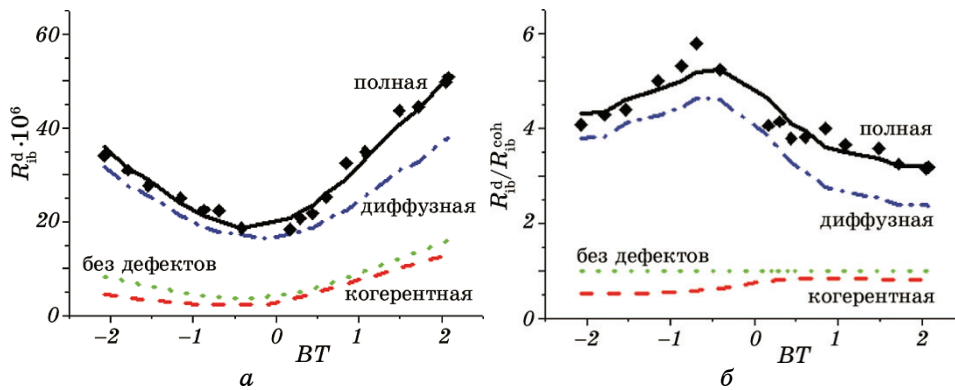


Рис. 3. ДЗ ПИИДД кристалла Si толщиной 454 мкм (а) и эта же зависимость (рис. 3, а), нормированная на величину когерентной составляющей ДЗ ПИИДД, (б). Маркёры — экспериментальные данные [6], кривые — расчёты по формулам (4), (5). Излучение MoK_α , рефлекс (220), $\psi = 2^\circ$.

Fig. 3. DD of TIIDD of Si crystal with a thickness of 454 μm (a) and the same dependence (Fig. 3, a), normalized to the coherent component of the DD of TIIDD (б). Markers are experimental data [6]; curves are calculations by the formulas (4), (5). Radiation MoK_α , reflex (220), $\psi = 2^\circ$.

$c_{\text{cl}} = 3,1354 \cdot 10^8 \text{ см}^{-3}$; крупных дислокационных петель: $R_{\text{big loops}} = 3,32 \text{ мкм}$, $c_{\text{big loops}} = 2,29 \cdot 10^6 \text{ см}^{-3}$ и $|\mathbf{b}| = a / \sqrt{2}$ (\mathbf{b} — вектор Бюргерса); мелких дислокационных петель: $R_{\text{small loops}} = 0,162 \text{ мкм}$, $c_{\text{small loops}} = 1,28 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$ и $|\mathbf{b}| = a / \sqrt{2}$.

На рисунке 4 представлены результаты диагностики кристалла кремния, отожжённого в течение 6 часов при температуре 1080°C. При расчётах были использованы следующие параметры модели, определённые путём фиттирования: $\alpha'/\alpha = -0,045$, $\beta'/\beta = -0,035$, $L = 0,00395$, $\mu_{\text{ds}} = 0,000284 \text{ мкм}^{-1}$ ($\mu_{\text{ds}}/\mu_0 = 0,2$), $\mu^* = 0,0000406 \text{ мкм}^{-1}$ ($\mu^*/\mu_0 = 0,0286$). Дефектная структура кристалла состоит из дископодобных кластеров: $R_{\text{cl}} = 0,45 \text{ мкм}$, $h_{\text{cl}} = 0,0118 \text{ мкм}$, $c_{\text{cl}} = 1,12 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$; крупных дислокационных петель: $R_{\text{big loops}} = 0,45 \text{ мкм}$, $c_{\text{big loops}} = 2,6 \cdot 10^8 \text{ см}^{-3}$ и $|\mathbf{b}| = a / \sqrt{2}$ мелких дислокационных петель: $R_{\text{small loops}} = 0,0038 \text{ мкм}$, $c_{\text{small loops}} = 4,35 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ и $|\mathbf{b}| = a / \sqrt{2}$.

На рисунке 5 представлены результаты диагностики кристалла кремния, отожжённого в течение 10 часов при температуре 1160°C. При расчётах были использованы следующие параметры модели, определённые путём фиттирования: $\alpha'/\alpha = 0$, $\beta'/\beta = 0,81$, $L = 0,03$, $\mu_{\text{ds}} = 0,00413 \text{ мкм}^{-1}$ ($\mu_{\text{ds}}/\mu_0 = 2,91$), $\mu^* = 0,000554 \text{ мкм}^{-1}$ ($\mu^*/\mu_0 = 0,391$). Дефектная структура кристалла состоит из сферических кластеров: $R_{\text{cl}} = 0,22854 \text{ мкм}$, $c_{\text{cl}} = 3,1554 \cdot 10^8 \text{ см}^{-3}$; крупных дислокационных петель: $R_{\text{big loops}} = 1,245 \text{ мкм}$, $c_{\text{big loops}} = 6,45 \cdot 10^7 \text{ см}^{-3}$ и $|\mathbf{b}| = a / \sqrt{2}$ мелких дислокационных петель: $R_{\text{small loops}} = 0,045 \text{ мкм}$, $c_{\text{small loops}} =$

$$= 6,65 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3} \text{ и } |\mathbf{b}| = a / \sqrt{2}.$$

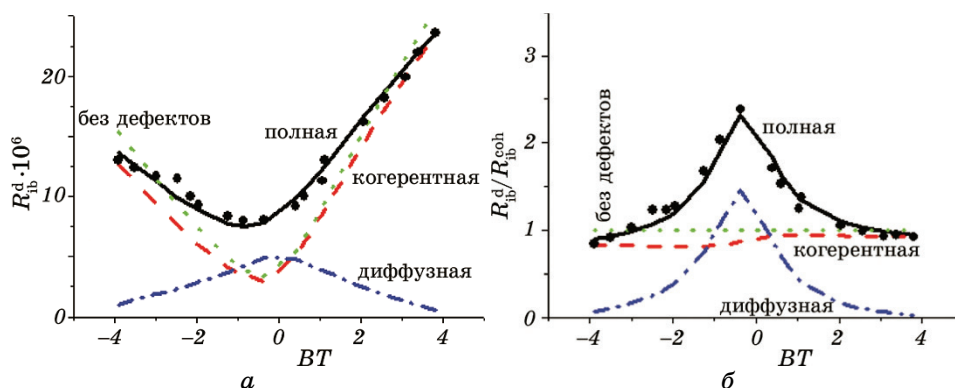


Рис. 4. ДЗ ПИИДД кристалла Si толщиной 488 мкм (*a*) и эта же зависимость (рис. 4, *a*), нормированная на величину когерентной составляющей ДЗ ПИИДД, (*б*). Маркёры — экспериментальные данные [6], кривые — расчёты по формулам (4), (5). Излучение MoK_α , рефлекс (220), $\psi = 2,05^\circ$.

Fig. 4. DD of TIIDD of Si crystal with a thickness of 488 μm (*a*) and the same dependence (Fig. 4, *a*), normalized to the coherent component of the DD of TIIDD (*б*). Markers are experimental data [6]; curves are calculations by the formulas (4), (5). Radiation MoK_α , reflex (220), $\psi = 2,05^\circ$.

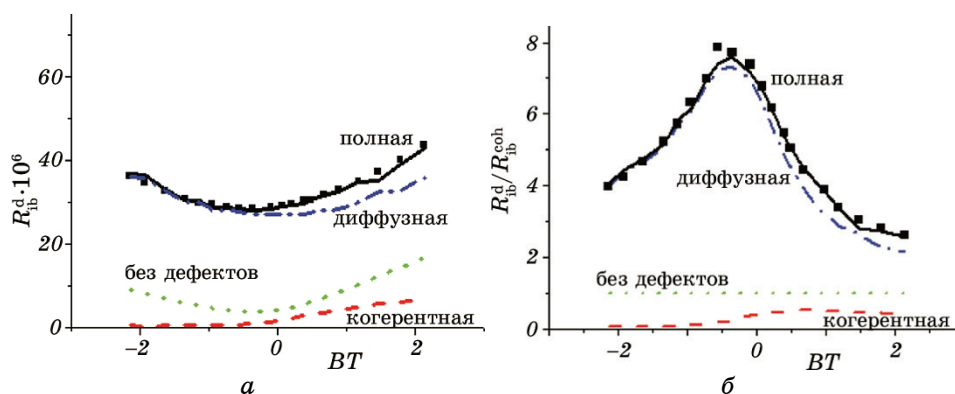


Рис. 5. ДЗ ПИИДД кристалла Si толщиной 430 мкм (*a*) и эта же зависимость (рис. 5, *a*), нормированная на величину когерентной составляющей ДЗ ПИИДД, (*б*). Маркёры — экспериментальные данные [6], кривые — расчёты по формулам (4), (5). Излучение MoK_α , рефлекс (220), $\psi = 2^\circ$.

Fig. 5. DD of TIIDD of Si crystal with a thickness of 430 μm (*a*) and the same dependence (Fig. 5, *a*), normalized to the coherent component of the DD of TIIDD (*б*). Markers are experimental data [6]; curves are calculations by the formulas (4), (5). Radiation MoK_α , reflex (220), $\psi = 2^\circ$.

Для образцов 2–4 (рис. 3–5) при рассчитанных для указанных температур и времён отжига средних радиусах $R_{cl}(\text{SiO}_2)$ и концентрациях $c_{cl}(\text{SiO}_2)$ сферических и дископодобных кластеров использование ДЗ ПИИДД позволило определить параметры крупных и мелких дислокационных петель, также присутствующих в образцах, согласно литературным данным [13], после указанных термообработок.

Для исходного образца 1 (рис. 2) использование ДЗ ПИИДД позволило определить параметры присутствующих в нем, согласно литературным данным [14], дислокационных петель.

4. ВЫВОДЫ

Созданы полуфеноменологическая упрощённая модель и метод диагностики на фазовариационных принципах с использованием ДЗ ПИИДД в кристаллах с дефектами без дополнительных измерений на эталонных образцах.

Показано, что использование ДЗ ПИИДД, полученной на одном Лауэ-отражении рентгеновского излучения в приближении «тонкого» кристалла, позволяет получить такой же объём данных, как при использовании толщинных зависимостей ПИИДД, полученных с использованием нескольких отражений в приближениях тонкого и толстого кристаллов. Это достигается за счёт использования фазовариационного подхода, состоящего в данном случае в целенаправленном варьировании условий дифракции и областей деформации. Этого оказывается достаточным, чтобы определять как параметры дефектной структуры, так и необходимые изменяющиеся за счёт дефектов характеристики деформационной зависимости.

Таким образом, доказана возможность определения путём использования ДЗ ПИИДД характеристик нескольких типов микродефектов.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. В. В. Лизунов, В. Б. Молодкин, С. В. Лизунова, Н. Г. Толмачев, Е. С. Скакунова, С. В. Дмитриев, Б. В. Шелудченко, С. М. Бровчук, Л. Н. Скапа, Р. В. Лехняк, Е. В. Фузик, *Металлофиз. новейшие технол.*, **36**, № 7: 857 (2014).
2. Л. Н. Скапа, В. В. Лизунов, В. Б. Молодкин, Е. Г. Лень, Б. В. Шелудченко, С. В. Лизунова, Е. С. Скакунова, Н. Г. Толмачев, С. В. Дмитриев, Р. В. Лехняк, Г. О. Велиховский, В. В. Молодкин, И. Н. Заболотный, Е. В. Фузик, О. П. Васькевич, *Металлофиз. новейшие технол.*, **37**, № 11: 1567 (2015).
3. S. M. Brovchuk, V. B. Molodkin, A. I. Nizkova, I. I. Rudnytska, G. I. Grankina, V. V. Lizunov, S. V. Lizunova, B. V. Sheludchenko, E. S. Skakunova, S. V. Dmitriev, I. N. Zabolotnyi, A. A. Katasonov, B. F. Zhuravlev, R. V. Lekhnyak, L. N. Skapa, and N. P. Irha, *Металлофиз. новейшие технол.*, **36**, № 8: 1035

- (2014).
4. В. В. Лизунов, С. М. Бровчук, А. И. Низкова, В. Б. Молодкин, С. В. Лизунова, Б. В. Шелудченко, А. И. Гранкина, И. И. Рудницкая, С. В. Дмитриев, Н. Г. Толмачев, Р. В. Лехняк, Л. Н. Скапа, Н. П. Ирха, *Металлофиз. новейшие технол.*, **36**, № 9: 1271 (2014).
 5. В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, В. В. Лизунов, В. В. Молодкин, Е. Н. Кисловский, Я. В. Василик, О. В. Решетник, Т. П. Владимирова, А. А. Белоцкая, Н. В. Барвинок, *Металлофиз. новейшие технол.*, **40**, № 8: 1123 (2018).
 6. Ф. Н. Чуховский, *Металлофизика*, **2**, № 6: 3 (1980).
 7. Ф. Н. Чуховский, *Металлофизика*, **3**, № 5: 3 (1981).
 8. F. N. Chukhovskii and P. V. Petrashen, *Acta Cryst. A*, **33**: 311 (1977).
 9. Л. И. Даценко, В. Б. Молодкин, М. Е. Осинковский, *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами* (Киев: Наукова думка: 1988).
 10. С. И. Олиховский, В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, О. С. Кононенко, А. А. Катасонов, *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 10: 1333 (2007).
 11. Г. В. Гринь, Е. Н. Кисловский, П. В. Петрашень, А. Ю. Разумовский, *Металлофизика*, **12**, № 5: 113 (1990).
 12. Е. Н. Кисловский, Л. И. Даценко, В. Б. Молодкин, Г. В. Гринь, А. И. Низкова, *Металлофизика*, **12**, № 6: 37 (1990).
 13. В. Б. Молодкин, М. В. Ковальчук, И. М. Карнаухов, В. Е. Сторижко, С. В. Лизунова, С. В. Дмитриев, А. И. Низкова, Е. Н. Кисловский, В. В. Молодкин, Е. В. Первак, А. А. Катасонов, В. В. Лизунов, Е. С. Скакунова, Б. С. Карамурзов, А. А. Дышеков, А. Н. Багов, Т. И. Оранова, Ю. П. Хапачев, *Основы интегральной многопараметрической диффузодинамической дифрактометрии* (Нальчик: Кабардино-Балкарский Университет: 2013).
 14. В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, А. П. Шпак, В. Ф. Мачулин, В. П. Кладько, И. В. Прокопенко, Р. Н. Кютт, Е. Н. Кисловский, С. И. Олиховский, Е. В. Первак, И. М. Фодчук, А. А. Дышеков, Ю. П. Хапачев, *Дифрактометрия наноразмерных дефектов и гетерослоев кристаллов* (Киев: Академперіодика: 2005).

REFERENCES

1. V. V. Lizunov, V. B. Molodkin, S. V. Lizunova, N. G. Tolmachev, E. S. Skakunova, S. V. Dmitriev, B. V. Sheludchenko, S. M. Brovchuk, L. N. Skapa, R. V. Lekhnyak, and E. V. Fuzik, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **36**, No. 7: 857 (2014) (in Russian).
2. L. N. Skapa, V. V. Lizunov, V. B. Molodkin, E. G. Len', B. V. Sheludchenko, S. V. Lizunova, E. S. Skakunova, N. G. Tolmachev, S. V. Dmitriev, R. V. Lekhnyak, G. O. Velikhovskiy, V. V. Molodkin, I. N. Zabolotnyy, E. V. Fuzik, and O. P. Vas'kevich, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **37**, No. 11: 1567 (2015) (in Russian).
3. S. M. Brovchuk, V. B. Molodkin, A. I. Nizkova, I. I. Rudnytska, G. I. Grankina, V. V. Lizunov, S. V. Lizunova, B. V. Sheludchenko, E. S. Skakunova, S. V. Dmitriev, I. N. Zabolotnyi, A. A. Katasonov, B. F. Zhuravlev, R. V. Lekhnyak, L. N. Skapa, and N. P. Irha, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **36**, No. 8: 1035 (2014).
4. V. V. Lizunov, S. M. Brovchuk, A. I. Nizkova, V. B. Molodkin, S. V. Lizunova,

- B. V. Sheludchenko, A. I. Grankina, I. I. Rudnitskaya, S. V. Dmitriev, N. G. Tolmachev, R. V. Lekhnyak, L. N. Skapa, and N. P. Irkha, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **36**, No. 9: 1271 (2014) (in Russian).
5. V. B. Molodkin, A. I. Nizkova, V. V. Lizunov, V. V. Molodkin, E. N. Kislovskii, Ya. V. Vasilik, O. V. Reshetnik, T. P. Vladimirova, A. A. Belotskaya, and N. V. Barvinok, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **40**, No. 8: 1123 (2018) (in Russian).
 6. F. N. Chukhovskii, *Metallofizika*, **2**, No. 6: 3 (1980) (in Russian).
 7. F. N. Chukhovskii, *Metallofizika*, **3**, No. 5: 3 (1981) (in Russian).
 8. F. N. Chukhovskii and P. V. Petrashen, *Acta Cryst. A*, **33**: 311 (1977).
 9. L. I. Datsenko, V. B. Molodkin, and M. E. Osinovskii, *Dinamicheskoe Rasseyanie Rentgenovskikh Luchey Real'nyimi Kristallami* [Dynamical Scattering of X-Rays by Real Crystals] (Kiev: Naukova Dumka: 1988) (in Russian).
 10. S. I. Olikhovskiy, V. B. Molodkin, A. I. Nizkova, O. S. Kononenko, and A. A. Katasonov, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **29**, No. 10: 1333 (2007) (in Russian).
 11. G. V. Grin', E. N. Kislovskiy, P. V. Petrashen', and A. Yu. Razumovskiy, *Metallofizika*, **12**, No. 5: 113 (1990) (in Russian).
 12. E. N. Kislovskiy, L. I. Datsenko, V. B. Molodkin, G. V. Grin', and A. I. Nizkova, *Metallofizika*, **12**, No. 6: 37 (1990) (in Russian).
 13. V. B. Molodkin, M. V. Koval'chuk, I. M. Karnaukhov, V. E. Storizhko, S. V. Lizunova, S. V. Dmitriev, A. I. Nizkova, E. N. Kislovskii, V. V. Molodkin, E. V. Pervak, A. A. Katasonov, V. V. Lizunov, E. S. Skakunova, B. S. Karamurzov, A. A. Dyshekov, A. N. Bagov, T. I. Oranova, and Yu. P. Khapachev, *Osnovy Integral'noy Mnogoparametricheskoy Diffuznodinamicheskoy Difraktometrii* [Fundamentals of Integrated Multiparametric Diffuse-Dynamical Diffractometry] (Nal'chik: Kabardino-Balkarskiy Universitet: 2013) (in Russian).
 14. V. B. Molodkin, A. I. Nizkova, A. P. Shpak, V. F. Machulin, V. P. Klad'ko, I. V. Prokopenko, R. N. Kyutt, E. N. Kislovskiy, S. I. Olikhovskiy, E. V. Pervak, I. M. Fodchuk, A. A. Dyshekov, and Yu. P. Khapachev, *Difraktometriya Nanorazmernykh Defektov i Geterosloev Kristallov* [Diffractometry of Nanoscale Defects and Crystal Heterolayers] (Kyiv: Akadempriodika: 2005) (in Russian).