Metallophysics and Advanced Technologies
Металофіз. новітні технол.
Metallofiz. Noveishie Tekhnol.
2019, vol. 41, No. 6, pp. 699–715
https://doi.org/10.15407/mfint.41.06.0699
Reprints available directly from the publisher

© 2019 G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics,
National Academy of Sciences of Ukraine
Published by license under
the G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics–
N.A.S. of Ukraine Publishers imprint.
Printed in Ukraine.

PHYSICAL AND TECHNICAL BASIS OF EXPERIMENT AND DIAGNOSTICS

PACS numbers: 61.05.cc, 61.05.cf, 61.05.cp, 61.72.Dd, 61.72.Qq, 68.55.Ln

Ефекти анізотропії в орієнтації призматичних дислокаційних петель і дископодібних кластерів у статистичній динамічній теорії розсіяння Х-променів

І. П. Яремій, Б. К. Остафійчук, У. О. Томин*, С. І. Яремій*, М. М. Повх

ДВНЗ «Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»,
вул. Шевченка, 57,
76018 Івано-Франківськ, Україна
**Івано-Франківський національний медичний університет,*
вул. Галицька, 2,
76018 Івано-Франківськ, Україна

Для аналізу кристалічної структури монокристалів та плівок в рамках статистичної динамічної теорії розсіяння Х-променів були отримані функціональні залежності структурно чутливих до дефектів параметрів, які враховують ефекти анізотропії в орієнтації центрально несиметричних дефектів (дислокаційних петель та дископодібних кластерів). Для різних відбивань обчислено коефіцієнт у виразі для статичного фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера для дислокаційних петель з різними орієнтаціями вектора Бюргерса. Встановлено залежності коефіцієнта екстинкції за рахунок дислокаційних петель будь-якої орієнтації та розмірів. Показано, що інтенсивність дифузного фону, розрахованого з урахуванням та без урахування анізотропії в орієнтації дислокаційних петель може відрізнятися майже на порядок. Зроблено висновок, що неврахування наявної

Corresponding author: Ivan P. Yaremiy
E-mail: yaremiyip@gmail.com

Vasyl Stefanyk Precarpathian National University,
57 Shevchenko Str., 76018 Ivano-Frankivsk, Ukraine
**Ivano-Frankivsk National Medical University,*
2 Halytska Str., 76018 Ivano-Frankivsk, Ukraine

Citation: I. P. Yaremiy, B. K. Ostafiychuk, U. O. Tomyn, S. I. Yaremiy, and M. M. Povkh, Effects of Anisotropy in Prismatic Dislocation Loops and Disc-Shape Clusters Orientation in the Statistical Dynamical Theory of X-Ray Scattering, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **41**, No. 6: 699–715 (2019), DOI: 10.15407/mfint.41.06.0699.

анізотропії в орієнтації дислокаційних петель може привести до завищення майже на порядок розрахованої з експериментальних кривих дифракційного відбивання концентрації дислокаційних петель.

Ключові слова: іонна імплантація, дислокаційні петлі, дископодібні кластери, ефекти анізотропії, статистична динамічна теорія розсіяння X-променів, X-променева дифрактометрія.

For the analysis of the crystalline structure of single crystals and films within the approach of the statistical dynamical theory of X-ray scattering, functional dependences of structurally sensitive to defects parameters that take into account the effects of anisotropy in the orientation of the centrally asymmetric defects (dislocation loops and disc-shape clusters) are obtained. The coefficient in the expression of the Krivoglaz–Debye–Waller static factor for dislocation loops with different Burgers vector's orientations for different reflections is calculated. Dependences of the extinction coefficient for dislocation loops of any orientation and size are obtained. As shown, the intensity of the diffuse background, calculated with and without taking into account the anisotropy in the orientation of dislocation loops, may differ by almost an order of magnitude. It is concluded that ignoring the existence of anisotropy in the orientation of the dislocation loops may lead to an overmagnification of the dislocation loops concentration calculated from the experimental rocking curves.

Key words: ion implantation, dislocation loops, disc-shape clusters, effects of anisotropy, statistical dynamic theory of X-ray scattering, X-ray diffractometry.

Для анализа кристаллической структуры монокристаллов и плёнок в рамках статистической динамической теории рассеяния рентгеновских лучей были получены функциональные зависимости структурно чувствительных к дефектам параметров, учитывающих эффекты анизотропии в ориентации центрально несимметричных дефектов (дислокационных петель и дискообразных кластеров). Для различных отражений вычислен коэффициент в выражении для статического фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера для дислокационных петель с разными ориентациями вектора Бюргерса. Установлены зависимости коэффициента экстинкции для дислокационных петель любой ориентации и размеров. Показано, что интенсивность диффузного фона, рассчитанного с учётом и без учёта анизотропии в ориентации дислокационных петель, может отличаться почти на порядок. Сделан вывод, что неучёт имеющейся анизотропии в ориентации дислокационных петель может привести к завышению почти на порядок рассчитанной из экспериментальных кривых дифракционного отражения концентрации дислокационных петель.

Ключевые слова: ионная имплантация, дислокационные петли, дискообразные кластеры, эффекты анизотропии, статистическая динамическая теория рассеяния рентгеновских лучей, рентгеновская дифрактометрия.

(Отримано 10 квітня 2019 р.)

1. ВСТУП

Проблема діагностики дефектів у матеріалах, які використовуються у сучасній техніці, є однією з головних, оскільки її розв'язання дає можливість не тільки класифікувати результати досліджень за типами дефектів та їх характеристиками, але й вносити корективи у відповідні технологічні процеси для забезпечення наперед заданих чи прийнятних параметрів дефектної системи. В ряді технологічних процесів використовуються підходи, в яких дефекти вводяться цілеспрямовано чи є побічним результатом певної модифікації. Зокрема, з такою ситуацією стикаємося при епітаксійному вирощуванні плівок чи використанні іонної імплантації, результатом якої є як розподіл за певним законом домішок у приповерхневому шарі кристалів, так і створення у зазначеному шарі радіаційних дефектів та, відповідно, механічних напруг.

Одним із методів визначення чисельних характеристик дефектів кристалічної структури є Х-променева дифрактометрія. При цьому достовірність отриманих результатів визначається фізичною обґрунтованістю моделі системи дефектів, використаної при розрахунку кутового розподілу інтенсивності дифрагованих на реальному кристалі Х-променів.

Врахування розсіяння Х-променів на дефектах у кінематичному наближенні проведено в роботах М. О. Кривоглаза [1]. В роботі [2] П. Дедерікс описав розсіяння Х-променів на дефектах типу сферичних кластерів та дислокаційних петель в динамічному наближенні. Однак детальний та послідовний опис динамічної дифракції у випадку кристалів з дефектами було зроблено в роботах В. Б. Молодкіна та його наукової школи (огляд основних етапів наукового пошуку школи та основи створеного авторами нового методу дифузно-динамічної багатопараметричної дифрактометрії приводяться в [3]), де було модифіковано зміст структурно чутливого до дефектів параметра μ_{ds}, який описує ефективне поглинання або екстинкцію когерентних хвиль через їх розсіювання на дефектах і перехід у дифузні хвилі, які, в свою чергу, також розсіюються динамічно. Зокрема, в їх роботах враховано залежність μ_{ds} від відхилення $\Delta\theta$ напряму падаючого променя від точної умови Брегга, що актуально у зв'язку з широким застосуванням методу кривих гойдання для діагностики реальних кристалів і для врахування динамічних ефектів у дифузній компоненті відбивної здатності. Також було враховано різну поведінку виразів для інтенсивностей дифузного розсіяння в областях Хуаня–Кривоглаза і Стокса–Вільсона. Урахування багатократності дифузного розсіяння на періодичній частини сприйнятливості дозволило отримати аналітичні вирази для $\mu_{ds}(\Delta\theta)$, які є коректними як для малих, так і для великих за розмірами дефектів.

В роботах [4–6] на прикладі призматичних дислокаційних петель з дискретною орієнтацією векторів Бюрґерса, проведено врахування впливу ефектів анізотропії полів зміщень атомів кристалу навколо цих дефектів на спричинені дифузним розсіянням дисперсійні поправки до хвильових векторів «сильних» Бреггівських хвиль. Анізотропія полів зміщень навколо дефектів розглядалася в наближенні пружноізотропного середовища і пов'язувалася з симетрію кристалічної ґратки шляхом врахування певної дискретної орієнтації дефектів у кристалі. При цьому, вищезазначені ефекти анізотропії будуть визначатись взаємною орієнтацією дефектів і вектору дифракції **H** (розглянуто кристал кубічної симетрії, який містить однорідно розподілені дислокаційні петлі з векторами Бюрґерса $\mathbf{b}\langle 110\rangle$ або $\langle 111\rangle$). При визначенні інтенсивності дифузного розсіяння проводилося усереднення за відповідними дискретними напрямами **b**, тобто знаходився усереднений скалярний добуток Фур'є-компонент поля зміщень на вектор оберненої ґратки.

Однак, можливі й ситуації (наприклад, іонна імплантація, епітаксійний ріст), коли дефекти утворюються не у всіх кристалографічно еквівалентних площинах з однаковою ймовірністю, або тільки в одній із кристалографічних площин. Тому метою даної роботи було врахування впливу анізотропії в орієнтації призматичних дислокаційних петель або дископодібних кластерів на інтенсивність дифузного розсіяння рентґенівських променів неідеальними кристалами.

2. ВРАХУВАННЯ ЕФЕКТІВ АНІЗОТРОПІЇ В ОРІЄНТАЦІЇ ПРИЗМАТИЧНИХ ДИСЛОКАЦІЙНИХ ПЕТЕЛЬ ЧИ ДИСКОПОДІБНИХ КЛАСТЕРІВ

В статистичній динамічній теорії розсіяння X-променів інформація про наявні в кристалі дефекти міститься в статичному факторі Кривоглаза–Дебая–Валлера $E = \exp(-L)$ та коефіцієнті екстинкції $\mu_{ds}(\Delta\theta)$.

2.1. Статичний фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера

Наявність різних типів дефектів у кристалі приводить до послаблення інтенсивності кривих дифракційного відбивання. В теорії розсіяння X-променів реальними кристалами з випадковими полями зміщень статичні властивості полів зміщень описують усередненим за ансамблем (що еквівалентно усередненню за об'ємом кристала) статичним фактором Кривоглаза–Дебая–Валлера L [7]:

$$E = e^{-L} = e^{i\mathbf{H}\mathbf{U}_{is}}, \tag{1}$$

де $H = \frac{4\pi}{\lambda}\sin\theta = \frac{2\pi}{d_{HKL}}$ — модуль вектора дифракції, λ — довжина хвилі випромінювання, d_{HKL} — відстань між площинами (HKL), $\mathbf{U}_{ts}$ — зміщення, що створене в s-му вузлі дефектом у позиції t.

Якщо дефекти з середньою концентрацією c хаотично розташовані по кристалу, концентрація дефектів мала ($c << 1$) і зміщення $\mathbf{U}_{ts}$ швидко спадають з відстанню, то у випадку дислокаційних петель вираз для статичного фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера запишеться [1, 2]:

$$L = \frac{cR_0^3}{V_c}(Hb)^{3/2}\eta(\mathbf{H}^0, \mathbf{b}^0), \tag{2}$$

де R_0 — усереднений радіус петлі, V_c — об'єм елементарної комірки кристалу, $\mathbf{b}^0 = \frac{\mathbf{b}}{b}$ і — одиничний вектор у напрямі вектора Бюрґерса петлі $\mathbf{b}$, $\mathbf{H}^0 = \frac{\mathbf{H}}{H}$ — одиничний вектор у напрямі вектора дифракції $\mathbf{H}$,

$$\eta(\mathbf{H}^0, \mathbf{b}^0) = \frac{\sqrt{\pi}}{6}\int d\Omega \left|\mathbf{H}^0\tau(\Omega, \mathbf{b}^0)\right|^{3/2}. \tag{3}$$

Поле зміщень атомів $\tau(\Omega, \mathbf{b}^0)$ здебільшого неможливо задати точно, тому в роботах [1, 2] його було замінено асимптотичним виразом, що справедливий при $Hb >> 1$, але досить добре описує поле і за проміжних значень Hb:

$$\tau(\Omega, \mathbf{b}^0) = \frac{1}{4}\left(\frac{1-2\nu}{1-\nu}\left[2\mathbf{b}^0(\mathbf{b}^0\mathbf{r}^0) - \mathbf{r}^0\right] + \frac{3}{1-\nu}\mathbf{r}^0(\mathbf{b}^0\mathbf{r}^0)^2\right), \tag{4}$$

де $\mathbf{r}^0 = \frac{\mathbf{r}}{r}$, $\mathbf{r}$ — радіус-вектор точки, в якій обчислюється зміщення, ν — коефіцієнт Пуассона.

В припущенні, що дислокаційні петлі зустрічаються у всіх площинах виду {100}, {110} та {111}, усереднивши (3) за всіма фізично еквівалентними в кубічній сингонії векторами Бюрґерса $\mathbf{b}_i$ в [2, 7] отримано значення $\overline{\eta} \approx 0{,}5$ і формула статичного фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера для дислокаційних петель набуде вигляду:

$$L = \frac{cR_0^3}{V_c}\frac{1}{2}(Hb)^{3/2}. \tag{5}$$

Якщо ж дислокаційні петлі розміщені тільки в певних кристало-

графічних площинах, у кожному конкретному випадку необхідно брати своє значення $\eta(\mathbf{H}^0, \mathbf{b}^0)$ обчислене з урахуванням взаємного розміщення вектора дифракції **H** та вектора Бюрґерса петлі **b**.

Підставивши вираз для $\tau(\Omega, \mathbf{b}^0)$ у формулу (3) та врахувавши, що $d\Omega = \cos\theta d\theta d\varphi$, отримаємо:

$$\eta(\mathbf{H}^0, \mathbf{b}^0) = \frac{\sqrt{\pi}}{6} \int_0^{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \left| \frac{1}{4} \left(\frac{1-2\nu}{1-\nu} \left[2(\mathbf{H}^0\mathbf{b}^0)(\mathbf{b}^0\mathbf{r}^0) - (\mathbf{H}^0\mathbf{r}^0) \right] + \right.\right.$$

$$\left.\left. + \frac{3}{1-\nu} (\mathbf{H}^0\mathbf{r}^0)(\mathbf{b}^0\mathbf{r}^0)^2 \right) \right|^{3/2} \cos\theta d\theta d\varphi. \qquad (6)$$

Врахувавши, що коефіцієнт Пуассона для більшості кристалів рівний 0,3, з допомогою математичного пакету Maple було отримано значення $\eta(\mathbf{H}^0, \mathbf{b}^0)$ для відбивань (100), (110) та (111) і дислокаційних петель з векторами Бюрґерса виду $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ та $\langle 111 \rangle$ (табл. 1–3).

Як бачимо, середні значення коефіцієнта $\eta(\mathbf{H}^0, \mathbf{b}^0)$ (табл. 1–3) для різних типів відбивань та наборів дислокаційних петель, як і в [1, 2, 7] є близькими до 0,5, однак значення коефіцієнта $\eta(\mathbf{H}^0, \mathbf{b}^0)$ для конкретного відбивання та конкретного напряму вектора Бюрґерса петлі значно відрізняються від 0,5. Зокрема, якщо в кристалі наявні дислокаційні петлі з векторами Бюрґерса, паралельними до напряму [111], то у випадку відбивання з вектором дифракції, паралельним до напряму [111], коефіцієнт $\eta(\mathbf{H}^0, \mathbf{b}^0) = 1{,}028$, а при відбиванні з вектором дифракції, паралельним напряму [110], коефіцієнт $\eta(\mathbf{H}^0, \mathbf{b}^0) = 0{,}768$. Коли ж $\mathbf{b} \perp \mathbf{H}$, коефіцієнт $\eta(\mathbf{H}^0, \mathbf{b}^0)$ є значно меншим 0,5 і для вектора Бюрґерса паралельного до напряму $[\bar{1}11]$ і відбивання з вектором дифракції, паралельним до напряму

ТАБЛИЦЯ 1. Значення $\eta(\mathbf{H}^0, \mathbf{b}^0)$ для дислокаційних петель з векторами Бюрґерса, паралельними до напрямів виду $\langle 100 \rangle$, та відбивань з векторами дифракції, паралельними до напрямів [100], [110] та [111].

TABLE 1. The values of $\eta(\mathbf{H}^0, \mathbf{b}^0)$ for dislocation loops with the Burgers vectors parallel to the directions of the type $\langle 100 \rangle$, and reflections with diffraction vectors parallel to the [100], [110] and [111] directions.

H \ **b**	[111]	$[\bar{1}00]$	[010]	$[0\bar{1}0]$	[001]	$[00\bar{1}]$	Середнє значення
[100]	1,083	1,083	0,182	0,182	0,181	0,181	0,482
[110]	0,666	0,666	0,657	0,657	0,175	0,175	0,499
[111]	0,516	0,516	0,506	0,506	0,501	0,501	0,508

ТАБЛИЦЯ 2. Значення $\eta(\mathbf{H}^0, \mathbf{b}^0)$ для дислокаційних петель з векторами Бюрґерса, паралельними до напрямів виду $\langle 110 \rangle$, та відбивань з векторами дифракції, паралельними до напрямів [100], [110] та [111].

TABLE 2. The values of $\eta(\mathbf{H}^0, \mathbf{b}^0)$ for dislocation loops with the Burgers vectors parallel to the directions of the type $\langle 110 \rangle$, and reflections with diffraction vectors parallel to the [100], [110] and [111] directions.

H \ b	[110]	$[\bar{1}10]$	$[1\bar{1}0]$	$[\bar{1}\bar{1}0]$	[101]	$[\bar{1}01]$	$[10\bar{1}]$	$[\bar{1}0\bar{1}]$	[011]	$[0\bar{1}1]$	$[01\bar{1}]$	$[0\bar{1}\bar{1}]$	Сер. знач.
[100]	0,654	0,688	0,688	0,654	0,657	0,657	0,657	0,657	0,183	0,183	0,183	0,183	0,504
[110]	1,046	0,198	0,198	1,046	0,439	0,439	0,439	0,439	0,431	0,431	0,431	0,431	0,497
[111]	0,775	0,173	0,173	0,775	0,729	0,143	0,143	0,729	0,722	0,158	0,158	0,722	0,450

[110], є рівним 0,188.

Як і в роботі [4], наведені вище формули можна застосувати і у випадку дископодібних кластерів, зробивши заміну $\mathbf{b}^0$ на $\mathbf{n}^0$, де $\mathbf{n}^0$ — нормаль до поверхні кластера; «потужність» петлі $A_{\text{loop}} = \pi b R_0^2$ замінити на потужність кластера $A_{cl} = \dfrac{3\Gamma\varepsilon V_{cl}}{4\pi}$, де $\Gamma = \dfrac{1+\nu}{3(1-\nu)}$, ν — коефіцієнт Пуассона, $V_{cl} = \pi R_{cl}^2 d$ — об'єм дископодібного кластера, R_{cl} і d — радіус і товщина кластера відповідно, ε — деформація на границі кластера. Тоді формула (2) набуде вигляду:

$$L = \frac{c}{V_c}\left(\frac{HA_{cl}}{\pi}\right)^{3/2} \eta(\mathbf{H}^0, \mathbf{n}^0). \tag{7}$$

Значення $\eta(\mathbf{H}^0, \mathbf{n}^0)$ при цьому будуть рівними значенням $\eta(\mathbf{H}^0, \mathbf{b}^0)$, взятим з табл. 1–3 для відповідних відбивань та орієнта-

ТАБЛИЦЯ 3. Значення $\eta(\mathbf{H}^0, \mathbf{b}^0)$ для дислокаційних петель з векторами Бюрґерса, паралельними до напрямів виду $\langle 111 \rangle$, та відбивань з векторами дифракції, паралельними до напрямів [100], [110] та [111].

TABLE 3. The values of $\eta(\mathbf{H}^0, \mathbf{b}^0)$ for dislocation loops with the Burgers vectors parallel to the directions of the type $\langle 111 \rangle$, and reflections with diffraction vectors parallel to the [100], [110] and [111] directions.

H \ b	[111]	$[\bar{1}11]$	$[1\bar{1}1]$	$[11\bar{1}]$	$[\bar{1}\bar{1}1]$	$[\bar{1}1\bar{1}]$	$[1\bar{1}\bar{1}]$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	Сер. знач.
[100]	0,511	0,532	0,532	0,511	0,511	0,532	0,532	0,511	0,521
[110]	0,768	0,188	0,188	0,768	0,768	0,188	0,188	0,768	0,478
[111]	1,028	0,237	0,284	0,292	0,292	0,284	0,237	1,028	0,460

цій дефектів.

2.2. Коефіцієнт екстинкції

Коефіцієнт екстинкції $\mu_{ds}(\Delta\theta)$ описує ефективне поглинання або екстинкцію когерентних хвиль внаслідок їх розсіяння на дефектах і перетворення в дифузні хвилі, і був незалежно введений в [2] і [8].

Згідно з [2], знехтувавши величинами другого порядку малості вираз для $\mu_{ds}(\Delta\theta)$ можна записати в наступному вигляді:

$$\mu_{ds}(\Delta\theta) = cC^2E^2m_0 \times \\ \times\left[\frac{1}{2}\left(J^1(k_0)+J^2(k_0)\right) \pm W(1+W^2)^{-\frac{1}{2}}\frac{1}{2}\left(J^1(k_0)-J^2(k_0)\right)\right], \tag{8}$$

де $W = -\left(\mathbf{K}+\frac{1}{2}\mathbf{H}\right)\mathbf{H}/CK^2\left|\chi_H\right|e^{-L}$, $m_0 = \frac{\pi V_c}{4}\left(\frac{H\left|\chi_{H_r}\right|}{\lambda}\right)^2$, $K = 2\pi/\lambda$ — модуль хвильового вектора падаючої хвилі, $C = 1$ для σ-поляризації, $C = \cos 2\theta_B$ для π-поляризації, k_0 — величина відхилення вузла оберненої ґратки H від сфери Евальда (рис. 1), V_c — об'єм елементарної комірки кристала, λ — довжина хвилі випромінювання, χ_{H_r} — дійсна компонента діелектричної сприйнятливості кристалу χ_H. Верхній знак в формулі (8) відповідає слабкому поглинанню хвильових полів, а нижній — сильному поглинанню; $J^t(k_0) = \frac{1}{\pi}\int dS_{\mathbf{K}'}F(\mathbf{q})$ — інтеграл по сфері Евальда поблизу вузла оберненої ґратки, $dS_{\mathbf{K}'}$ — елемент площі на площині, яка апроксимує сферу Евальда біля вузла оберненої ґратки, $F(\mathbf{q}) = \left|\upsilon_{\mathbf{q}}\right|^2$, $\upsilon_q = \mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}}$, $\mathbf{u}_{\mathbf{q}}$ — фур'є-компонента поля зміщень довкола дефекту.

У випадку наявності в кристалі призматичних дислокаційних петель фур'є-компонента поля зміщень матиме вигляд:

$$\mathbf{u}_{\mathbf{q}} = \frac{i\pi bR_0^2}{V_c q}\left|\eta\left(\mathbf{q}^0,\mathbf{b}^0\right)\right|^2, \tag{9}$$

де $\left|\eta(\mathbf{q}^0,\mathbf{b}^0)\right|^2 = \frac{1}{(1-\nu)}\left[2(1-\nu)\mathbf{b}^0(\mathbf{b}^0\mathbf{q}^0)+\nu\mathbf{q}^0-\mathbf{q}^0(\mathbf{b}^0\mathbf{q}^0)^2\right]$,

$$\mathbf{q}^0 = \frac{\mathbf{q}}{q}.$$

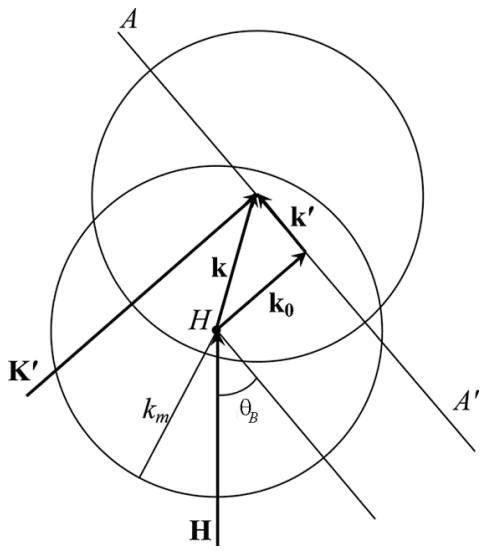

Рис. 1. Схематичне зображення імпульсного простору поблизу вузла оберненої ґратки H (AA' — лінія перетину площини дифракції (**K**, **H**) зі сферою Евальда).

Fig. 1. Schematic representation of the momentum space near the inverse lattice node H (AA' is the intersection line of the diffraction plane (**K**, **H**) with the Ewald sphere).

Тоді

$$J^t = \left(\frac{\pi b R_0^2}{V_c q}\right)^2 \int\limits_{\boldsymbol{\kappa}\perp\mathbf{e}_t}^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \left|\mathbf{H}^0 \eta(\mathbf{q}^0, \mathbf{b}^0)\right|^2 . \tag{10}$$

У коефіцієнтах J^t значення $t = 1$ і 2, де $\mathbf{e}_1 = (\mathbf{K}+\mathbf{H}) / |\mathbf{K}+\mathbf{H}|$, $\mathbf{e}_2 = \mathbf{K} / |\mathbf{K}|$, кутовий інтеграл обчислюється у тангенціальній площині $\boldsymbol{\kappa} \perp \mathbf{e}_t$ $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k}' / |\mathbf{k}'|$.

Після усереднення по всіх можливих орієнтаціях вектора Бюрґерса дислокаційних петель J^1 стає рівним J^2 і вираз (10) значно спрощується. В [9, 10] приведено прості вирази для визначення $J(k_0)$ в припущенні, що дислокаційні петлі зустрічаються у всіх можливих кристалографічних площинах з однаковою ймовірністю. При цьому було враховано різний характер розсіяння Х-променів в зонах Хуаня–Кривоглаза і Стокса–Вільсона, та враховано комплексний характер імпульсу $\mathbf{q} = \mathbf{k} + i\mu\mathbf{n}$ (де $\mathbf{k}$ — відхилення вузла оберненої ґратки від сфери Евальда (відхилення хвильового вектора дифузно розсіяної хвилі $\mathbf{K}'$ від вузла оберненої ґратки), $\mathbf{n}$ — внутрішня нормаль до вхідної поверхні кристала, μ — інтерференційний коефіцієнт поглинання). Врахування в моделі дифракції зазна-

чених моментів робить отримані у вищевказаних роботах співвідношення коректними у випадку дефектів будь-яких розмірів. Врахування усереднення по всіх можливих напрямах вектора Бюрґерса дислокаційних петель приводить до лаконічних і легких до використання залежностей, однак, при отриманні аналогічних залежностей для конкретних напрямів вектора **H** та вектора Бюрґерса **b** при розрахунках необхідно проходити всі етапи покроково. Це, перш за все, пов'язано з відсутністю взаємокомпенсованих доданків при розгляді конкретного напряму вектора Бюргерса, і, відповідно, з суттєвим зростанням об'ємів обчислень.

Покрокове виконання обчислень на всіх етапах при розрахунку J^t для конкретних напрямів вектора **H** та вектора Бюрґерса **b** призматичної дислокаційної петлі наведено нижче.

Дифузне розсіяння має різний характер в областях Хуаня–Кривоглаза ($k_0 << k_m$) і Стокса–Вільсона ($k_0 >> k_m$), а функція $\left|\upsilon_{\mathbf{q}}\right|^2$ веде себе в цих областях відповідно як $\sim 1/q^2$ і $\sim 1/q^4$ [9]. Наведена вище залежність $F(\mathbf{q}) = \left|\upsilon_{\mathbf{q}}\right|^2 = \left|\mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}}\right|^2$ відноситься до області Хуаня–Кривоглаза і надалі позначатиметься як $F^H(\mathbf{q})$, а в області Стокса–Вільсона $F^{SW}(\mathbf{q}) = F^H \dfrac{k_m^2}{q^2}$.

При врахуванні в побудові Евальда різного характеру дифузного розсіяння в області Хуаня–Кривоглаза та Стокса–Вільсона, коефіцієнти J^t будуть визначатися системою:

$$J^t(k_0) = \begin{cases} J^t_H(k_0) + J^t_{H-SW}(k_0), & \left|k_0\right| < k_m, \\ J^t_{SW}(k_0), & \left|k_0\right| \geq k_m. \end{cases} \tag{11}$$

Доданки в (10) визначаються наступним чином (рис. 1):

$$J^t_H(k_0) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{k_m^2 - k_0^2} dk'^2 F_t^H(\mathbf{q}), \tag{12}$$

$$J^t_{H-SW}(k_0) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\varphi \int_{k_m^2 - k_0^2}^{\infty} dk'^2 F_t^{SW}(\mathbf{q}), \tag{13}$$

$$J^t_{SW}(k_0) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} dk'^2 F_t^{SW}(\mathbf{q}). \tag{14}$$

Щоб врахувати анізотропію в орієнтації дислокаційних петель при розрахунку коефіцієнта екстинкції, необхідно записати вираз для функції $F^H(\mathbf{q})$, в якому би враховувалася взаємна орієнтація вектора дифракції **H** та векторів Бюрґерса **b** наявних в кристалі петель:

$$F_t^H(\mathbf{q}) = \left(\frac{\pi b R_0^2}{V_c}\right)^2 \times$$
$$\times \left\| \left[2(\mathbf{H}^0\mathbf{b}^0)\frac{(\mathbf{b}^0\mathbf{q})}{|\mathbf{q}|} + \frac{\nu}{1-\nu}\frac{(\mathbf{H}^0\mathbf{q})}{|\mathbf{q}|} - \frac{1}{1-\nu}\frac{(\mathbf{H}^0\mathbf{q})}{|\mathbf{q}|}\frac{(\mathbf{b}^0\mathbf{q})^2}{|\mathbf{q}|^2} \right] \right\|^2 \frac{1}{|\mathbf{q}|^2}. \tag{15}$$

Щоб проінтегрувати $F_t^H(\mathbf{q})$ у виразі (15), необхідно позбутися квадрату модуля і комплексних змінних. Провівши необхідні математичні перетворення та врахувавши, що $\mathbf{q} = \mathbf{k} + i\mu\mathbf{n} = \mathbf{k}_0 + \mathbf{k}' + i\mu\mathbf{n}$ та $|\mathbf{q}|^2 = k_0^2 + k'^2 + \mu^2$ (рис. 1), отримаємо:

$$F_t^H(\mathbf{q}) = \left(\frac{\pi b R_0^2}{V_c}\right)^2 \{g_1 + g_2 + g_3 + g_4 g_5\} \frac{1}{p_3^2}. \tag{16}$$

Тут коефіцієнти g_1–g_5 визначаються за формулами:

$$g_1 = 4(\mathbf{H}^0\mathbf{b}^0)^2 p_1,$$
$$g_2 = \frac{\nu^2}{(1-\nu)^2} p_2,$$
$$g_3 = -\frac{p_1 p_2}{(1-\nu)^2 p_3}\left(2\nu - p_1/p_3\right),$$
$$g_4 = \frac{4}{1-\nu}(\mathbf{H}^0\mathbf{b}^0)\left(\nu - p_1/p_3\right),$$
$$g_5 = \left(\left(\mathbf{b}^0\mathbf{k}'\right) + \left(\mathbf{b}^0\mathbf{k}_0\right)\right)\left(\left(\mathbf{H}^0\mathbf{k}'\right) + \left(\mathbf{H}^0\mathbf{k}_0\right)\right) + \mu^2\left(\mathbf{b}^0\mathbf{n}\right)\left(\mathbf{H}^0\mathbf{n}\right).$$

Коефіцієнти p_1–p_3 мають наступний вигляд:

$$p_1 = \left(\mathbf{b}_\alpha^0\mathbf{q}\right)^2 = \left(\left(\mathbf{b}_\alpha^0\mathbf{k}'\right) + \left(\mathbf{b}_\alpha^0\mathbf{k}_0\right)\right)^2 + \mu^2\left(\mathbf{b}_\alpha^0\mathbf{n}\right)^2,$$
$$p_2 = \left(\mathbf{H}^0\mathbf{q}\right)^2 = \left(\left(\mathbf{H}^0\mathbf{k}'\right) + \left(\mathbf{H}^0\mathbf{k}_0\right)\right)^2 + \mu^2\left(\mathbf{H}^0\mathbf{n}\right)^2,$$
$$p_3 = |\mathbf{q}|^2 = k_0^2 + k'^2 + \mu^2.$$

Всі розрахунки проводилися за допомогою математичного пакету Maple. Було отримано відповідні залежності для відбивань (444), (888) та (880). При цьому розглядалися дислокаційні петлі з векторами Бюрґерса, паралельними до напрямів виду $\langle 100\rangle$, $\langle 110\rangle$ та $\langle 111\rangle$. Встановлено, що значення коефіцієнта екстинкції μ_{ds} суттєво

залежить від орієнтації вектора Бюрґерса **b** петлі і в більшості випадків відрізняється від значення, розрахованого з використанням усереднення, для відповідного набору петель, розміщених в еквівалентних кристалографічних площинах. Так, у випадку наявності в кристалі дислокаційних петель з вектором Бюрґерса, паралельним вектору оберненої ґратки, величина коефіцієнта екстинкції є максимальною. Найменших значень коефіцієнт екстинкції набуває при $\mathbf{b} \perp \mathbf{H}$.

Як і у випадку розрахунку статичного фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера, при розрахунку коефіцієнта екстинкції формулу (16) та інші залежні від неї формули можна застосувати і у випадку дископодібних кластерів, зробивши аналогічні заміни вектора Бюрґерса та «потужності» петлі на відповідні параметри дископодібного кластера.

3. МОДЕЛЮВАННЯ КРИВИХ ДИФРАКЦІЙНОГО ВІДБИВАННЯ ТА ЇХ АНАЛІЗ

Щоб оцінити вплив врахування ефектів анізотропії в орієнтації радіаційно зумовлених дислокаційних петель на вигляд кривих дифракційного відбивання (КДВ), було змодельовано теоретичні КДВ для епітаксійних плівок залізо-ітрієвого ґранату (ЗІҐ, $Y_3Fe_5O_{12}$) з приповерхневим порушеним шаром, в якому є дислокаційні петлі радіусом 30 Å і концентрацією $1{,}2 \cdot 10^{15}$ см$^{-2}$, та профіль деформації, показаний на рис. 2.

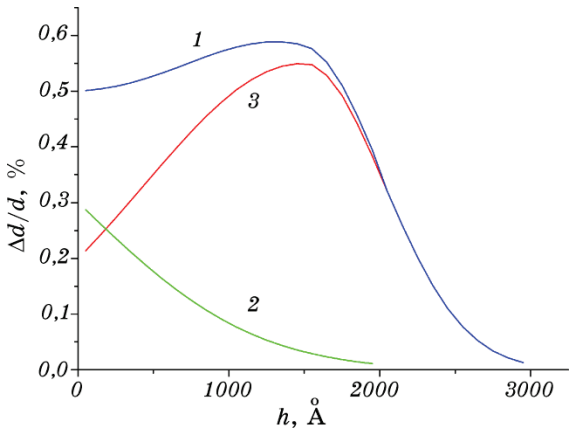

Рис. 2. Профіль деформації (*1*) та його складові, пов'язані з дефектоутворенням за рахунок електронних (*2*) та ядерних (*3*) енергетичних втрат.

Fig. 2. Deformation profile (*1*) and its components related to defects formation due to electronic (*2*) and nuclear (*3*) energy losses.

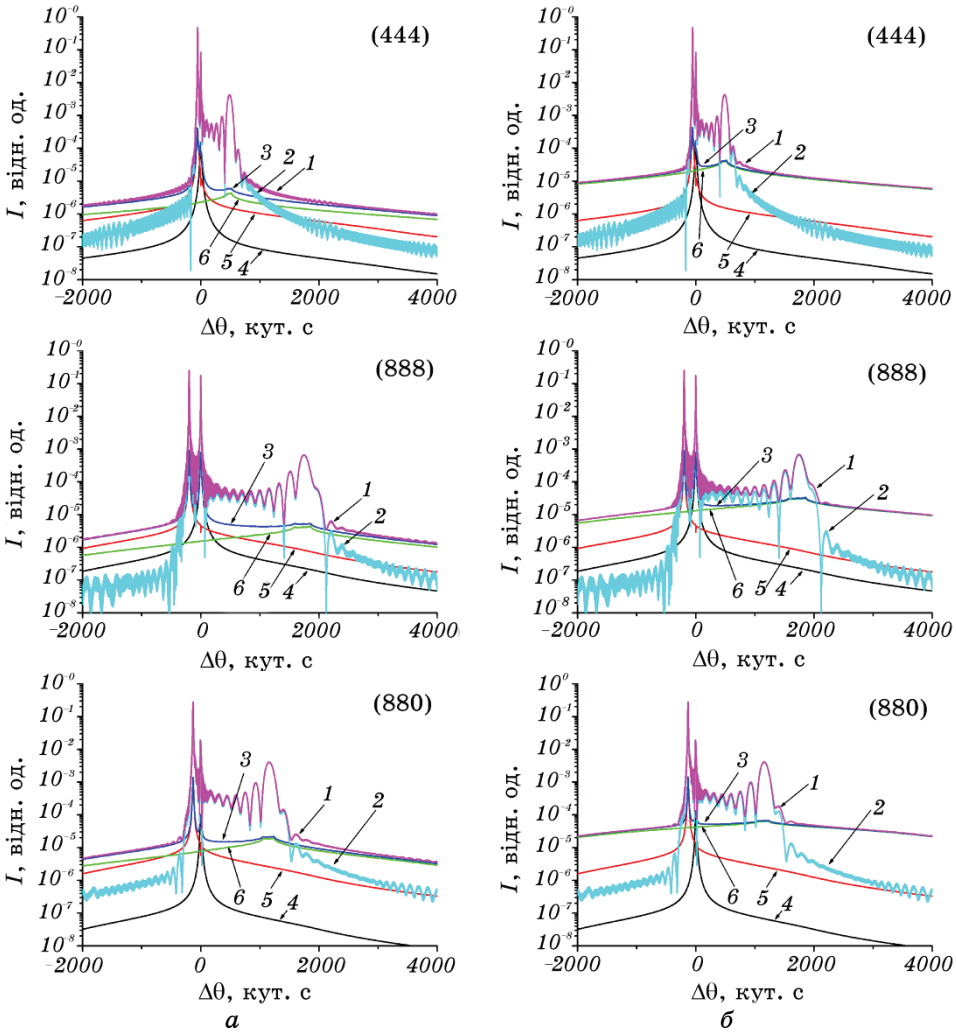

Рис. 3. Теоретично розраховані для різних відбивань КДВ (*1*) та їх складові: когерентна (*2*) і дифузна (*3*) (дифузна від підкладки (*4*), плівки (*5*) та порушеного шару (*6*)); *а* — КДВ, розраховані без врахування ефектів анізотропії (з використанням усереднення по всіх імовірних напрямах вектора Бюрґерса призматичних дислокаційних петель), *б* — КДВ, розраховані з врахуванням ефектів анізотропії (для петель з вектором Бюрґерса напряму [111]).

Fig. 3. Theoretically calculated for different reflexes rocking curves (*1*) and their components: coherent (*2*) and diffuse (*3*) (diffuse component from the substrate (*4*), film (*5*), and modified layer (*6*)); *a*—rocking curves calculated without taking effects of anisotropy into account (using averaging over all possible directions of the Burgers vector of prismatic dislocation loops), and *б*—rocking curves calculated taking into account the effects of anisotropy (for loops with a Burgers vector of [111] direction).

Як показано в [11, 12], дані параметри є характерними для імплантованих іонами B^+ з енергією 80 кеВ і дозою $3 \cdot 10^{14}$ $см^{-2}$ плівок залізо-ітрієвого гранату (ЗІҐ). Вважалося, що концентрація дислокаційних петель пропорційна профілю дефектів, а радіус дислокаційних петель є однаковим по товщині порушеного шару. Призматичні дислокаційні петлі в іонно імплантованому шарі формуються тільки в паралельній поверхні зразка площині з вектором Бюргерса, перпендикулярним до площини зразка. Для більшості плівок залізо-ітрієвого гранату це площина (111). Тому, при розрахунках бралася до уваги саме така орієнтація дислокаційних петель.

Змодельовані теоретичні КДВ представлено на рис. 3. Як видно з рисунка, навіть при близьких до одиниці значеннях статичного фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера (в максимально деформованому шарі $E = e^{-L} \approx 0,98$), інтенсивність дифузного фону, обчисленого з врахуванням ефектів анізотропії, може відрізнятися від інтенсивності фону, отриманого з використанням усереднення по всіх імовірних напрямах вектора Бюрґерса призматичних дислокаційних петель, майже на порядок. Зокрема, в області останньої осциляції, де, згідно описаної моделі порушеного шару радіус призматичних дислокаційних петель є максимальним, відношення вказаної інтенсивності на КДВ, в яких враховано ефекти анізотропії, до аналогічної інтенсивності КДВ з неврахованими ефектами анізотропії для відбивань (444) рівне 9,5, для відбивань (888) — 7,2, для відбивань (880) — 3,4. Як бачимо, для симетричних відбивань (444) та (888) це відношення є максимальним, що в анізотропному випадку пов'язано з розміщенням дислокаційних петель в площині (111) та напрямом вектора Бюргерса [111], і, відповідно, максимальним зміщенням атомів ґратки зі своїх положень саме в даному напрямі.

Ця різниця в інтенсивностях дифузної складової суттєво позначається і на величині визначеної з експериментальних КДВ концентрації дефектів. Зокрема, неврахування анізотропії в орієнтації радіаційно обумовлених дислокаційних петель в [13, 14] привело до завищення майже на порядок концентрації дислокаційних петель в іонно-імплантованому шарі. Врахування можливої анізотропії в орієнтації дислокаційних петель у розглянутих в [15, 16] зразках може привести до деякого корегування значення концентрації дислокаційних петель в іонно-імплантованому шарі.

4. ВИСНОВКИ

1. В рамках статистичної динамічної теорії дифракції Х-променів і теоретичної моделі динамічної дифракції за Бреггом для кристалів довільної товщини, які містять центрально несиметричні дефекти (дислокаційні петлі та дископодібні кластери) будь-якої орієнтації та розмірів, отримано функціональні залежності для розрахунку

структурно чутливих до дефектів Х-променевих параметрів (статичного фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера та коефіцієнта екстинкції), в яких враховано ефекти анізотропії в орієнтації дефектів вказаного типу.

2. Моделювання теоретичних КДВ від монокристалів з приповерхневим порушеним шаром показало, що навіть при близьких до одиниці значеннях статичного фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера, інтенсивність дифузного фону, розрахованого з урахуванням та без урахування анізотропії в орієнтації дислокаційних петель може відрізнятися майже на порядок.

3. Неврахування анізотропії в орієнтації дислокаційних може привести до завищення майже на порядок розрахованої з експериментальних кривих дифракційного відбивання концентрації дислокаційних петель.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. М. А. Кривоглаз, *Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах* (Киев: Наукова думка: 1983).
2. P. H. Dederichs, *Phys. Rev. B*, **1**, Iss. 4: 1306 (1970).
3. В. Б. Молодкин, А. П. Шпак, М. В. Ковальчук, В. Ф. Мачулин, В. Л. Носик, *УФН*, **181**, № 7: 681 (2011).
4. В. Б. Молодкін, С. Й. Оліховський, Б. В. Шелудченко, Є. Г. Лень, М. Т. Когут, *Металлофиз. новейшие технол.*, **30**, № 9: 1173 (2008).
5. В. Б. Молодкін, С. Й. Оліховський, Б. В. Шелудченко, Є. Г. Лень, М. Т. Когут, *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*, **6**, № 3: 785 (2008).
6. В. Б. Молодкін, С. Й. Оліховський, Б. В. Шелудченко, Є. Г. Лень, М. Т. Когут, *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*, 6, № 3: 807 (2008).
7. Л. И. Даценко, В. Б. Молодкин, М. Е. Осиновский, *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами* (Киев: Наукова думка: 1988).
8. В. Б. Молодкин, Е. А. Тихонова, *ФММ*, **24**, № 3: 385 (1967).
9. С. Й. Оліховський, Є. М. Кисловський, В. Б. Молодкін, Є. Г. Лень, Т. П. Владімірова, О. В. Решетник, *Металлофиз. новейшие технол.*, **22**, № 6: 3 (2000).
10. В. В. Немошкаленко, В. Б. Молодкин, Е. Н. Кисловский, С. И. Олиховский, Т. А. Грищенко, М. Т. Когут, Е. В. Первак, *Металлофиз. новейшие технол.*, **22**, № 2: 42 (2000).
11. I. P. Yaremiy, M. M. Povkh, V. O. Kotsyubynsky, V. D. Fedoriv, S. I. Yaremiy, and R. I. Pashkovska, *Physics and Chemistry of Solid State*, **20**, No. 1: 56 (2019).
12. I. Yaremiy, S. Yaremiy, M. Povkh, O. Vlasii, V. Fedoriv, and A. Lucas, *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*, **6**, No. 12 (96): 50 (2018).
13. Б. К. Остафійчук, І. П. Яремій, С. І. Яремій, В. Д. Федорів, М. М. Уманців,

У. О. Томин, О. С. Скакунова, *Металлофиз. новейшие технол.*, **35**, № 10: 1333 (2013).
14. B. K. Ostafiychuk, I. P. Yaremiy, S. I. Yaremiy, V. D. Fedoriv, U. O. Tomyn, M. M. Umantsiv, I. M. Fodchuk, and V.P. Kladko, *Crystallography Reports*, **58**, No. 7: 1017 (2013).
15. И. М. Фодчук, И. И. Гуцуляк, Р. А. Заплитный, И. П. Яремий, А. Ю. Бончик, И. И. Сыворотка, *Металлофиз. новейшие технол.*, **35**, № 7: 993 (2013).
16. И. М. Фодчук, В. В. Довганюк, И. И. Гуцуляк, И. П. Яремий, А. Ю. Бончик, Г. В. Савицкий, И. М. Сыворотка, Е. С. Скакунова, *Металлофиз. новейшие технол.*, **35**, № 9: 1209 (2013).

REFERENCES

1. M. A. Krivoglaz, *Diffraction of X-Rays and Thermal Neutrons in Imperfect Crystals* (Berlin, New York: Springer: 1996).
2. P. H. Dederichs, *Phys. Rev. B*, **1**, Iss. 4: 1306 (1970).
3. V. B. Molodkin, A. P. Shpak, M. V. Kovalchuk, V. F. Machulin, and V. L. Nosik, *Phys. Usp.*, **54**, No. 7: 661 (2011).
4. V. B. Molodkin, S. J. Olikhovskii, B. V. Sheludchenko, E. G. Len, and M. T. Kogut, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **30**, No. 9: 1173 (2008) (in Ukrainian).
5. V. B. Molodkin, S. J. Olikhovskii, B. V. Sheludchenko, E. G. Len', and M. T. Kogut, *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*, **6**, No. 3: 785 (2008) (in Ukrainian).
6. V. B. Molodkin, S. J. Olikhovskii, B. V. Sheludchenko, E. G. Len', and M. T. Kogut, *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*, **6**, No. 3: 807 (2008) (in Ukrainian).
7. L. I. Datsenko, V. B. Molodkin, M. E Osinovskiy, *Dinamicheskoe Rasseyanie Rentgenovskikh Luchej Realnymi Kristallami* [Dynamic X-ray Scattering of Real Crystals] (Kiev: Naukova Dumka: 1988) (in Russian).
8. V. B. Molodkin and E. A. Tikhonova, *FMM*, **24**, No. 3: 385 (1967) (in Russian).
9. 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).
10. V. V. Nemoshkalenko, V. B. Molodkin, Ye. M. Kislovs'ky, S. I. Olikhovs'ky, T. A. Gryshchenko, M. T. Kogut, and E. V. Pervak, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **22**, No. 2: 42 (2000) (in Russian).
11. I. P. Yaremiy, M. M. Povkh, V. O. Kotsyubynsky, V. D. Fedoriv, S. I. Yaremiy, and R. I. Pashkovska, *Physics and Chemistry of Solid State*, **20**, No. 1: 56 (2019).
12. I. Yaremiy, S. Yaremiy, M. Povkh, O. Vlasii, V. Fedoriv, and A. Lucas, Eastern-European Journal of Enterprise Technologies, **6**, No. 12 (96): 50 (2018).
13. B. K. Ostafiychuk, I. P. Yaremiy, S. I. Yaremiy, V. D. Fedoriv, M. M. Umantsiv, U. O. Tomyn, and O. S. Skakunova, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **35**, No. 10: 1333 (2013) (in Ukrainian).
14. B. K. Ostafiychuk, I. P. Yaremiy, S. I. Yaremiy, V. D. Fedoriv, U. O. Tomyn,

M. M. Umantsiv, I. M. Fodchuk, and V.P. Kladko, *Crystallography Reports*, **58**, No. 7: 1017 (2013).

15. I. M. Fodchuk, I. I. Gutsuliak, R. A. Zaplitnyy, I. P. Yaremiy, A. Y. Bonchyk, and I. I. Syvorotka, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **35**, No. 7: 993 (2013) (in Russian).
16. I. M. Fodchuk, V. V. Dovganiuk, I. I. Gutsuliak, I. P. Yaremiy, A. Y. Bonchyk, G. V. Savytsky, I. M. Syvorotka, and O. G. Skakunova, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **35**, No. 9: 1209 (2013) (in Russian).