

INTERACTIONS OF RADIATION AND PARTICLES WITH CONDENSED MATTER

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

Метод деформационных зависимостей полной интегральной интенсивности динамической дифракции в монокристаллах с дефектами для случая преобладающего вклада диффузной составляющей

В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, В. В. Лизунов, Н. Г. Толмачев,
С. В. Дмитриев, Л. И. Макаренко, О. В. Решетник,
Т. П. Владимировна, Я. В. Василик, И. Н. Заболотный

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

Построена эвристическая модель для описания деформационных зависимостей полной интегральной интенсивности динамической дифракции в монокристаллах с микродефектами нескольких типов в случае преобладающего за счёт динамических эффектов и для дефектов первого класса по Кривоглазу вклада диффузной составляющей. В результате показана возможность существенного повышения структурной чувствительности и информативности развиваемого метода.

Ключевые слова: динамическая дифракция, монокристаллы, микродефекты, полная интегральная интенсивность, фазовариационная диагностика.

Побудовано евристичну модель для опису деформаційних залежностей повної інтегральної інтенсивності динамічної дифракції в монокристалах

Corresponding author: Vadym Borysovykh 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, N. G. Tolmachev, S. V. Dmitriev, L. I. Makarenko, O. V. Reshetnik, T. P. Vladimirova, Ya. V. Vasylyk, and I. N. Zabolotnyy, Method of Deformation Dependencies of Total Integrated Intensity of Dynamical Diffraction by Single Crystals with Defects in the Case of the Dominant Contribution of the Diffuse Component, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **41**, No. 12: 1677–1690 (2019) (in Russian), DOI: [10.15407/mfint.41.12.1677](https://doi.org/10.15407/mfint.41.12.1677).

з мікродефектами декількох типів у випадку переважаючого за рахунок динамічних ефектів і для дефектів першого класу за Кривоглазом внеску дифузійної складової. У результаті показано можливість суттєвого підвищення структурної чутливості й інформативності даного методу.

Ключові слова: динамічна дифракція, монокристали, мікродефекти, повна інтегральна інтенсивність, фазоваріаційна діагностика.

A heuristic model of the deformation dependences of total integrated intensity of dynamical diffraction in single crystals with several types of microdefects is created. The model is correct in the case, when the contribution of the diffuse component prevailing due to dynamical effects for defects of 1st class according to Krivoglaz classification. As a result, the possibilities of a significant increase in the structural sensitivity and informativity of the developed method is shown.

Key words: dynamical diffraction, single crystals, microdefects, total integrated intensity, phase variational diagnostics.

(Получено 2 октября 2019 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Создание материалов с новыми, необходимыми для практического применения свойствами часто достигается путем 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.

Кроме того, важным (особенно для практических применений) требованием, предъявляемым к диагностическим методам, является их экспрессность, т.е. время, необходимое для проведения измерений. Очевидно, чем меньше указанное время, тем более удобным является метод диагностики, позволяя исследовать большее количество образцов за фиксированный промежуток времени.

Современные дифрактометрические методы используют преимущественно трехосевую дифрактометрию. Использование трехосевой дифрактометрии позволяет измерять распределения в пространстве обратной решетки дифрагированной интенсивности излучения, что дает возможности для определения структуры исследуемых объектов. Наряду с преимуществами отмеченной методики, она имеет и недостатки, состоящие в необходимости проведения длительных измерений или использования дорогих источников излучения и сложного оборудования. Продолжительность процедуры измерений (необходимого времени экспозиции) связана в первую

очередь с возникающей проблемой измерения слишком низких величин интенсивности дифрагированного излучения (регистрации малого числа импульсов в единицу времени) дифференциально в каждой точке обратного пространства. Альтернативой этому является измерение некоторых интегральных параметров, что позволяет увеличить число регистрируемых импульсов в единицу времени и таким образом существенно увеличить скорость диагностики.

При этом свойства современных материалов определяются не столько структурой и параметрами их идеальных периодических решеток, сколько статистическими характеристиками прецизионно созданных в них на атомном уровне современными технологиями дефектов и других субструктурных особенностей. В работах М. А. Кривоглаза (систематическое изложение см. в монографиях [1, 2]) было проведено статистическое усреднение восприимчивости кристалла по распределению дефектов и получены периодические «в среднем» функции с новыми периодами и эффективными атомными факторами, а также введены флуктуационные волны отклонений от этой периодичности восприимчивости кристалла и определена их взаимосвязь с характеристиками дефектов. Эти составляющие обусловили и позволили в кинематическом приближении описать, соответственно, как брэгговское, так и диффузное рассеяние. На основе полученных результатов М. А. Кривоглазом была проведена классификация дефектов по характеру их влияния на кинематическую картину рассеяния.

Однако использование кинематической теории рассеяния в несовершенных кристаллах существенно ограничило применимость методов, основанных на измерении интегральных интенсивностей. Как выяснилось, при кинематической дифракции полная (сумма брэгговской и диффузной составляющих) интегральная интенсивность отражения не зависит от степени искаженности кристаллической решетки. Таким образом, для кинематически рассеивающих кристаллов с дефектами методы характеристики их структуры, основанные на измерении полных интегральных интенсивностей рассеяния, оказались не применимыми.

Ситуация кардинально меняется при переходе к использованию динамической картины рассеяния вместо кинематической. Было показано, что открытый дисперсионный механизм чувствительности динамической картины рассеяния к несовершенствам структуры обеспечивает также появление чувствительности к несовершенствам структуры во многих ее отдельных интегральных характеристиках (см., например, работы [3, 4]). При этом измерение зависимостей полной интегральной интенсивности динамической дифракции (ПИИДД) от плавно изменяющихся различных условий дифракции при выбранных комбинациях фиксированных значений параметров для остальных условий эксперимента с последую-

щей совместной обработкой полученных результатов позволяет количественно определять характеристики дефектной структуры монокристаллов [5]. При этом наиболее удобными для использования могут быть, к примеру, геометрии Лауэ и Брэгга, случаи тонкого и толстого кристаллов, спектральные, азимутальные, деформационные зависимости и т.д.

Среди перечисленных методов ПИИДД метод деформационных зависимостей (ДЗ) получил наибольшее распространение. Развитию данного метода посвящено довольно большое количество работ, однако они ограничены случаем, когда основной вклад в ПИИДД дает когерентная составляющая. Изложению и развитию метода ДЗ ПИИДД в монокристаллах с дефектами для случая преобладающего вклада диффузной составляющей и посвящена данная работа.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Ранее в работе [6] было показано, что при соизмеримых вкладах диффузной и брэгговской составляющих в ПИИДД разные области ДЗ ПИИДД избирательно чувствительны к различным типам дефектов, одновременно присутствующим в исследуемом кристалле. В результате на этой основе удалось обеспечить необходимую чувствительность и информативность диагностики нескольких типов дефектов разрабатываемым методом. Рассмотрим более общий случай диагностики методом ДЗ ПИИДД реальных кристаллов с микродофектами, для которых вклад диффузной составляющей в ПИИДД значительно преобладает над вкладом брэгговской составляющей.

Согласно модели, построенной в работе [6], ПИИДД R_{ib} реального упруго изогнутого кристалла представляется в виде суммы когерентной R_{ib}^{coh} и диффузной R_{ib}^{dif} составляющих: $R_{ib}^d = R_{ib}^{coh} + R_{ib}^{dif}$. При этом когерентная составляющая определяется выражением:

$$R_{ib}^{coh} = \frac{C |\chi_{rH}^*|}{2 \sin 2\theta} e^{-M_0^*} \left[1 - \exp \left(-\frac{\pi C^2}{2|B|} \right) \right] \int_{-1}^1 \frac{d\xi}{\sqrt{1-\xi^2}} \times$$

$$\times \frac{\text{ch}(M_\beta^* \xi) \text{ch}[(M^* C^2 / 2 + 2) \ln(\sqrt{1 + (D/C)^2 (1 - \xi^2)} + (D/C) \sqrt{1 - \xi^2})]}{[1 + (D/C)^2 (1 - \xi^2)]^{1/2}}, \quad (1)$$

здесь χ_{rH}^* — перенормированная Н-ая компонента Фурье вещественной части восприимчивости кристалла, $M_0^* = \mu_0^* t$ — показатель фактора нормального поглощения, t — толщина кристалла, M_β^* описывает влияние поглощения в асимметричной геометрии Лауэ, $D = BT$ — эффективная деформация, $B = (\partial^2 / \partial z^2 - \partial^2 / \partial x^2)(\mathbf{H}\mathbf{u})$ — нормированный градиент деформации, T — толщина кристалла в единицах Λ^* / π , Λ^* — экстинкционная длина для σ -поляризации,

M^* — коэффициент аномального поглощения, C — поляризационный фактор (равный 1 или $\cos 2\theta_B$). Все эти обозначения введены в работах [7–9], посвященных созданию теории динамической дифракции в изогнутых идеальных кристаллах. Основное отличие формулы (1) от результатов работ [7–9] заключается в учете наличия микродефектов в кристаллах путем перенормировки констант динамического рассеяния: $\chi_{\text{гн}}^* \rightarrow \chi_{\text{гн}} e^{-L}$, $\chi_{\text{ин}}^* \rightarrow \chi_{\text{ин}} e^{-L}$, $\mu_0^* \rightarrow \mu_0 + \mu_{\text{ds}}$, где μ_0 — коэффициент фотоэлектрического поглощения, μ_{ds} — коэффициент эффективного поглощения когерентной составляющей ПИИДД из-за ухода части интенсивности в диффузный фон в результате рассеяния на дефектах, L — показатель статического фактора Кривоглаза [1, 2].

Для диффузной составляющей ПИИДД изогнутого кристалла теория отсутствует, поэтому в [6] было предложено использовать полуфеноменологическую формулу:

$$R_{\text{ib}}^{\text{dif}} = R_1^{\text{dif}} (1 + \alpha' BT + \beta' B^2 T^2) \exp(-\gamma' |1/r|^{\delta'} \sqrt{M_0'^*}), \quad (2)$$

где R_1^{dif} — величина диффузной составляющей ПИИДД кристалла с микродефектами в отсутствие изгиба [10], r — радиус кривизны упругого изгиба, $M_0'^* = M_0 + \mu^* t$, где $M_0 = \mu_0 t$, t — толщина кристалла, μ^* — коэффициент эффективного поглощения диффузной составляющей ПИИДД из-за ухода части интенсивности при перераспределении диффузного фона в результате его вторичного рассеяния на дефектах. Следует отметить, что L , μ_{ds} , μ^* аналитически выражены через средние радиусы и концентрации дефектов разных типов, одновременно присутствующих в реальных кристаллах.

Учитывая слабое влияние поглощения в приближении динамически «тонкого» кристалла ($\mu_0 t < 1$), значения коэффициентов γ' и δ' полагаются одинаковыми для ДЗ обеих составляющих ПИИДД и равными значениям коэффициентов γ и δ для ДЗ ИИДД упруго изогнутого кристалла, не содержащего микродефектов. Такая возможность обеспечивается тем, что множитель для поглощательной способности (экспонента) формируется одинаково для брэгговских и диффузных волн, поскольку в обоих случаях рассчитывается интеграл по одной и той же дисперсионной поверхности.

В настоящей работе, как и в работе [6] ДЗ когерентной составляющей ПИИДД рассчитывается не по формуле (1) для бездефектного упруго изогнутого кристалла, а задается эвристической формулой с минимальным количеством слагаемых (3):

$$R_{\text{ib}}^{\text{coh}} / R_{\text{i0}} = (1 + \alpha BT + \beta B^2 T^2) \exp(-\gamma |1/r|^{\delta} \sqrt{M_0}). \quad (3)$$

Здесь R_{i0} — ИИДД идеального кристалла. Значения коэффициентов α , β , γ и δ подбираются путем подгонки рассчитываемых по модели

(3) кривых к теоретическим ДЗ ИИДД для упруго изогнутого кристалла, не содержащего микродефектов, полученным в работах [7–9].

Хотя использование такого приближения не обязательно и приводит к некоторой погрешности, оно целесообразно в связи с тем, что позволяет описать ДЗ ПИИДД в рамках единого подхода. Кроме того, использование формулы (3) для описания ДЗ когерентной составляющей ПИИДД позволяет определить значения коэффициентов γ' и δ' , что сложно сделать другим путем.

Все расчеты, представленные в данной работе, выполнены в рамках модели (1)–(3).

3. СЛУЧАЙ ДВУХ ТИПОВ ДЕФЕКТОВ

Данный раздел посвящен обработке экспериментальных ДЗ ПИИДД, полученных в настоящей работе, по модели (1)–(3). Указанные зависимости получены для исходного (до его специальных технологических обработок) монокристалла CZ Si (образец 1) в приближении «тонкого» кристалла при использовании отражений (220), (440) и MoK_α -излучения и в приближении «толстого» кристалла при использовании отражения (220) CuK_α -излучения.

На рисунках 1–3 линиями изображены результаты подгонки рассчитываемых ДЗ ПИИДД к ДЗ ПИИДД, полученным экспериментально в разных условиях дифракции; при этом экспериментальные значения обозначены маркерами. Согласно литературным данным известно, что в образцах кремния после выращивания могут содержаться большие и мелкие дислокационные петли [11]. При подгонке определены как средние радиусы и концентрации мелких ($R_{\text{sm.l.}} = 0,0091$ мкм, $c_{\text{sm.l.}} = 1,285 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$) и больших ($R_{\text{b.l.}} = 8,35$ мкм, $c_{\text{b.l.}} = 8,4 \cdot 10^4 \text{ см}^{-3}$) дислокационных петель, одновременно присутствующих в исходном образце кремния после выращивания, так и параметры ДЗ диффузной составляющей ПИИДД, значения которых указаны в подписях к рисункам.

Рисунки 1–3 иллюстрируют преобладающее влияние диффузной составляющей на особенности поведения ДЗ ПИИДД для исходного образца кремния. На рис. 1 представлены ДЗ ПИИДД отдельно для случаев наличия только больших или только малых дислокационных петель, ДЗ ПИИДД идеального кристалла, а также экспериментально измеренная ДЗ ПИИДД. Видно, что при отрицательных деформациях ДЗ диффузной составляющей ПИИДД практически совпадают с ДЗ ПИИДД, полученными экспериментально.

Из рисунка 1 также видно, что наличие в образце большой концентрации мелких петель за счет аномального роста при динамическом рассеянии вклада диффузной составляющей ПИИДД не только увеличивает ПИИДД в отсутствие деформации, но и резко уси-

ливает ДЗ ПИИДД (штрих-пунктирная линия) по сравнению с ИИДД, рассчитанной по теории, предложенной в работах [7–9] для идеального кристалла (двойной пунктир). Наличие в образце малой концентрации больших петель практически не проявляется непосредственно — ДЗ ПИИДД для них, изображенная штрих-двойным пунктиром, сливается с ДЗ, рассчитанной для идеального кристалла (двойной пунктир). Однако присутствие в образце больших петель все-таки приводит как к снижению ПИИДД, рассчитанной для обоих типов дефектов (сплошная линия) в отсутствие деформации, так к ослаблению указанной ДЗ ПИИДД по сравнению с ДЗ ПИИДД, рассчитанной с учетом наличия в образце только мелких дефектов. Это происходит за счет определяющего вклада в μ^* именно от крупных дефектов, что и обеспечивает отмеченное их проявление.

Рисунок 2 иллюстрирует усиление тенденций, наблюдающихся на рис. 1, при увеличении эффективной деформации в два раза и использовании отражения более высокого порядка.

Из рисунка 2 видно, что наличие в образце малой концентрации больших петель проявляется непосредственно — ДЗ ПИИДД для них, изображенная штрих-двойным пунктиром, заметно слабее,

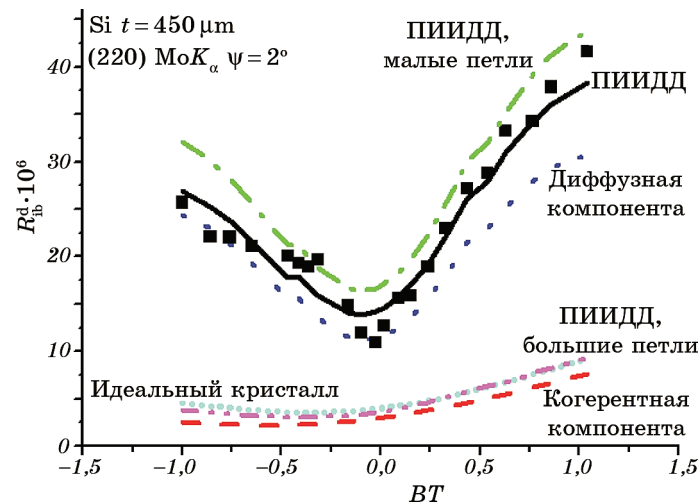


Рис. 1. ДЗ ПИИДД для исходного образца кремния. Маркеры — ДЗ ПИИДД, полученная экспериментально. Линии — ДЗ ПИИДД, рассчитанные по модели (1)–(3) при $\alpha'/\alpha = 1$, $\beta'/\beta = 4,5$, $\gamma'/\gamma = 31$, $L = 0,0226$, $\mu_{ds} = 0,000951 \text{ мкм}^{-1}$ ($\mu_{ds}/\mu_0 = 0,67$), $\mu^* = 0,00043 \text{ мкм}^{-1}$ ($\mu^*/\mu_0 = 0,303$).

Fig. 1. DD of TIIDD of initial Si crystal. Markers are experimental data. Curves are calculated by the formulas (1)–(3) at $\alpha'/\alpha = 1$, $\beta'/\beta = 4,5$, $\gamma'/\gamma = 31$, $L = 0,0226$, $\mu_{ds} = 0,000951 \text{ }\mu\text{m}^{-1}$ ($\mu_{ds}/\mu_0 = 0,67$), $\mu^* = 0,00043 \text{ }\mu\text{m}^{-1}$ ($\mu^*/\mu_0 = 0,303$).

чем ДЗ ПИИДД, рассчитанная для идеального кристалла (двойной пик). Кроме того, как и в случае отражения (220), присутствие в образце больших петель проявляется как в снижении ПИИДД, рассчитанной для обоих типов дефектов (сплошная линия) в отсутствие деформации, так и в еще большем ослаблении указанной ДЗ ПИИДД по сравнению с ДЗ ПИИДД, рассчитанной с учетом наличия в образце только мелких дефектов.

Из анализа результатов, приведенных на рисунках 1 и 2, ясно, что использование ДЗ ПИИДД, полученной в приближении тонкого кристалла не позволяет определить характеристики больших петель, присутствие которых в образце заметно. Кроме того, характеристики мелких петель без учета наличия больших были бы определены неправильно.

Рисунок 3 иллюстрирует усиление влияния на поведение ДЗ ПИИДД больших петель в результате использования излучения с большей длиной волны.

Из рисунков 1–3 видно, что в приближении «тонкого» кристалла определяющим типом дефектов являются мелкие петли, а в приближении «толстого» кристалла — крупные петли. Именно благодаря этому удалось определить параметры обоих типов дефектов.

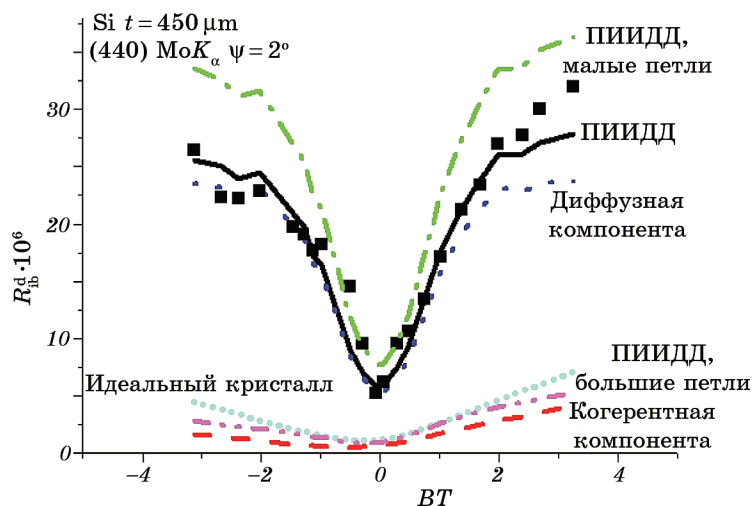


Рис. 2. ДЗ ПИИДД для исходного образца кремния. Маркеры — ДЗ ПИИДД, полученная экспериментально. Линии — ДЗ ПИИДД, рассчитанные по модели (1)–(3) при $\alpha'/\alpha = 0$, $\beta'/\beta = 2,8$, $\gamma'/\gamma = 14,3$, $L = 0,064$, $\mu_{ds} = 0,00157 \text{ мкм}^{-1}$ ($\mu_{ds}/\mu_0 = 1,106$), $\mu^* = 0,000707 \text{ мкм}^{-1}$ ($\mu^*/\mu_0 = 0,498$).

Fig. 2. DD of TIDD of initial Si crystal. Markers are experimental data. Curves are calculated by the formulas (1)–(3) at $\alpha'/\alpha = 0$, $\beta'/\beta = 2,8$, $\gamma'/\gamma = 14,3$, $L = 0,064$, $\mu_{ds} = 0,00157 \text{ }\mu\text{m}^{-1}$ ($\mu_{ds}/\mu_0 = 1,106$), $\mu^* = 0,000707 \text{ }\mu\text{m}^{-1}$ ($\mu^*/\mu_0 = 0,498$).

Таким образом, поставленную задачу многопараметрической диагностики удалось решить, используя соответствующие фазовариационные принципы [3, 4], а именно, целенаправленно выбирая условия экспериментов, при которых сначала определяющим оказывается один из присутствующих типов дефектов, а после этого — другой тип.

4. СЛУЧАЙ ТРЁХ ТИПОВ ДЕФЕКТОВ

Данный раздел посвящён исследованию дефектной структуры монокристалла CZ Si, отожженного в течение 20 часов при температуре 1000°C (образец 2), в котором могут одновременно присутствовать дефекты трех различных типов. Действительно, согласно литературным данным [12] после такой термообработки в образце должны содержаться дискообразные кластеры SiO_2 с концентрацией $c_{\text{cl.}} = 4,655 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$, средним радиусом $R_{\text{cl.}} = 0,3596 \text{ мкм}$ и высотой диска кластеров $h_{\text{cl.}} = 0,0105 \text{ мкм}$, а также мелкие и большие дислокационные петли. При этом из литературы известна связь между общей площадью дислокационных петель и величиной объемной доли дискообразных кластеров.

На рисунках 4–6 сплошными линиями изображены результаты подгонки рассчитываемых ДЗ ПИИДД к ДЗ ПИИДД, полученным

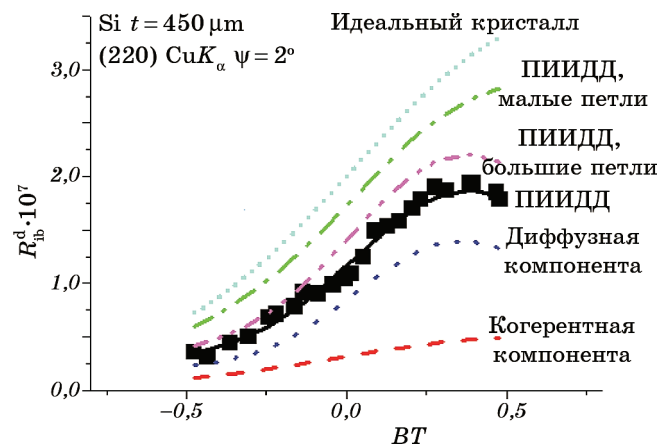


Рис. 3. ДЗ ПИИДД для исходного образца кремния. Маркеры — ДЗ ПИИДД, полученная экспериментально. Линии — ДЗ ПИИДД, рассчитанные по модели (1)–(3) при $\alpha'/\alpha = 1,64$, $\beta'/\beta = 3,9$, $\gamma'/\gamma = 4,2$, $L = 0,0226$, $\mu_{\text{ds}} = 0,00279 \text{ мкм}^{-1}$ ($\mu_{\text{ds}}/\mu_0 = 0,196$), $\mu^* = 0,00116 \text{ мкм}^{-1}$ ($\mu^*/\mu_0 = 0,0815$).

Fig. 3. DD of TIIDD of initial Si crystal. Markers are experimental data. Curves are calculated by the formulas (1)–(3) at $\alpha'/\alpha = 1,64$, $\beta'/\beta = 3,9$, $\gamma'/\gamma = 4,2$, $L = 0,0226$, $\mu_{\text{ds}} = 0,00279 \text{ }\mu\text{m}^{-1}$ ($\mu_{\text{ds}}/\mu_0 = 0,196$), $\mu^* = 0,00116 \text{ }\mu\text{m}^{-1}$ ($\mu^*/\mu_0 = 0,0815$).

экспериментально в разных целенаправленно выбранных в рамках фазовариационного подхода [3, 4] условиях дифракции. При подгонке определены как средние радиусы и концентрации мелких ($R_{\text{sm.l.}} = 0,077$ мкм, $c_{\text{sm.l.}} = 2,84 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$) и больших ($R_{\text{b.l.}} = 0,67$ мкм, $c_{\text{b.l.}} = 2,815 \cdot 10^8 \text{ см}^{-3}$) петель, так и параметры ДЗ диффузной составляющей ПИИДД, значения которых указаны в подписях к рисункам. При этом в расчетах использовались указанные выше взятые из литературы параметры кластеров.

Рисунки 4–6 иллюстрируют преобладающее влияние диффузной составляющей на особенности поведения ДЗ ПИИДД для образца 2. В «тонком» кристалле при отрицательных деформациях, а в «толстом» — при всех ДЗ диффузной составляющей ПИИДД практически совпадают с ДЗ ПИИДД, полученными экспериментально.

Из рисунка 4 видно, что наличие в образце большой концентрации мелких петель резко увеличивает ПИИДД при любой степени деформации (штрих-пунктирная линия) по сравнению с ИИДД, рассчитанной по теории, предложенной в работах [7–9] (двойной пунктир). Наличие в образце малой концентрации больших петель, ДЗ ПИИДД для которых изображена штрих-двойным пунктиром, мало увеличивает ПИИДД по сравнению с расчетом для идеального

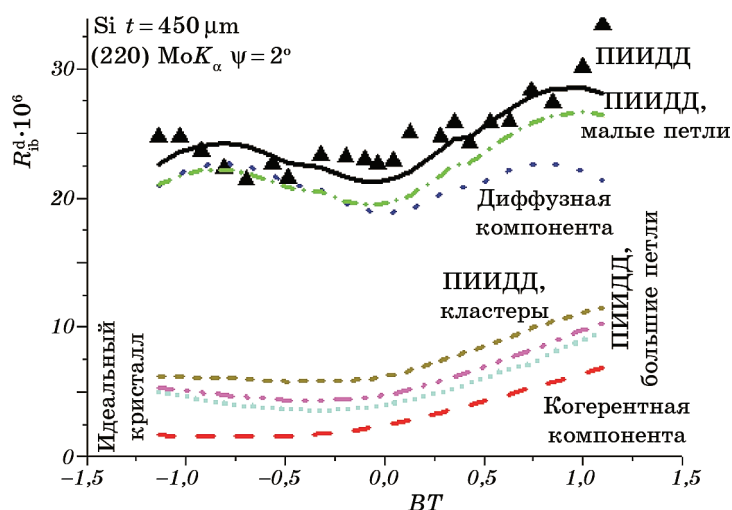


Рис. 4. ДЗ ПИИДД для отожженного образца кремния (образец 2). Маркеры — ДЗ ПИИДД, полученная экспериментально. Линии — ДЗ ПИИДД, рассчитанные по модели (1)–(3) при $\alpha'/\alpha = 0$, $\beta'/\beta = 1,8$, $\gamma'/\gamma = 25$, $L = 0,0359$, $\mu_{\text{ds}} = 0,00169 \text{ мкм}^{-1}$ ($\mu_{\text{ds}}/\mu_0 = 1,19$), $\mu^* = 0,000344 \text{ мкм}^{-1}$ ($\mu^*/\mu_0 = 0,242$).

Fig. 4. DD of TIIDD of annealed silicon sample (sample 2). Markers are experimental data. Curves are calculated by the formulas (1)–(3) at $\alpha'/\alpha = 0$, $\beta'/\beta = 1,8$, $\gamma'/\gamma = 25$, $L = 0,0359$, $\mu_{\text{ds}} = 0,00169 \text{ μm}^{-1}$ ($\mu_{\text{ds}}/\mu_0 = 1,19$), $\mu^* = 0,000344 \text{ μm}^{-1}$ ($\mu^*/\mu_0 = 0,242$).

кристалла. Кластеры увеличивают ПИИДД больше, чем большие петли, но вклад их тоже не велик.

Рисунок 5 иллюстрирует усиление влияния на величину ПИИДД мелких петель и ослабление влияния на ПИИДД кластеров и больших петель при увеличении эффективной деформации в два раза в результате использования отражения более высокого порядка.

Из рисунка 5 видно, что при больших деформациях ДЗ ПИИДД для больших петель, изображенная штрих-двойным пунктиром, и ДЗ ПИИДД для кластеров, изображенная пунктиром, сливаются с ДЗ ПИИДД, рассчитанной для идеального кристалла (двойной пунктир). В то же время ДЗ ПИИДД для мелких петель, изображенная штрих-пунктиром, при больших деформациях сливается как с ДЗ ПИИДД, рассчитанной для трех типов дефектов (сплошная линия), так и с ДЗ ПИИДД, полученной экспериментально.

Из анализа результатов, приведенных на рисунках 4 и 5, ясно, что использование ДЗ ПИИДД, полученной в приближении тонкого кристалла не позволяет определить характеристики больших петель и кластеров, присутствие которых в образце заметно. Кроме того, характеристики мелких петель без учета наличия других де-

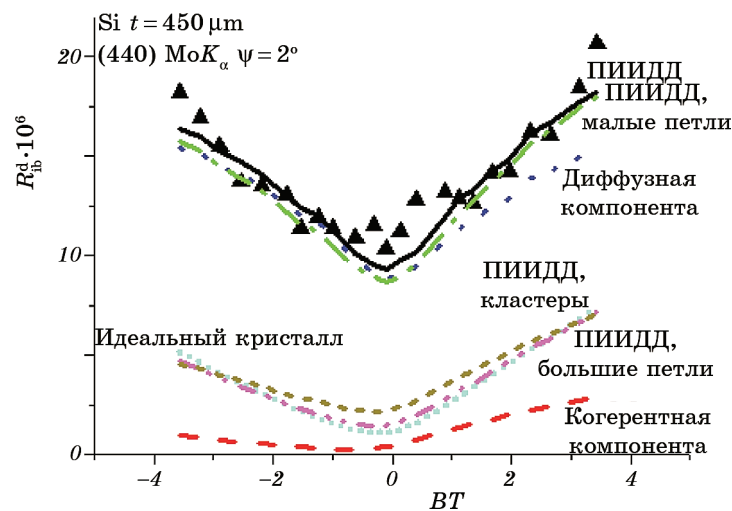


Рис. 5. ДЗ ПИИДД для отожженного образца кремния (образец 2). Маркеры — ДЗ ПИИДД, полученная экспериментально. Линии — ДЗ ПИИДД, рассчитанные по модели (1)–(3) при $\alpha'/\alpha=0$, $\beta'/\beta=0,57$, $\gamma'/\gamma=10,8$, $L=0,101$, $\mu_{ds}=0,0027 \text{ мкм}^{-1}$ ($\mu_{ds}/\mu_0=1,901$), $\mu^*=0,000542 \text{ мкм}^{-1}$ ($\mu^*/\mu_0=0,382$).

Fig. 5. DD of TIIDD of annealed silicon sample (sample 2). Markers are experimental data. Curves are calculated by the formulas (1)–(3) at $\alpha'/\alpha=0$, $\beta'/\beta=0,57$, $\gamma'/\gamma=10,8$, $L=0,101$, $\mu_{ds}=0,0027 \text{ }\mu\text{m}^{-1}$ ($\mu_{ds}/\mu_0=1,901$), $\mu^*=0,000542 \text{ }\mu\text{m}^{-1}$ ($\mu^*/\mu_0=0,382$).

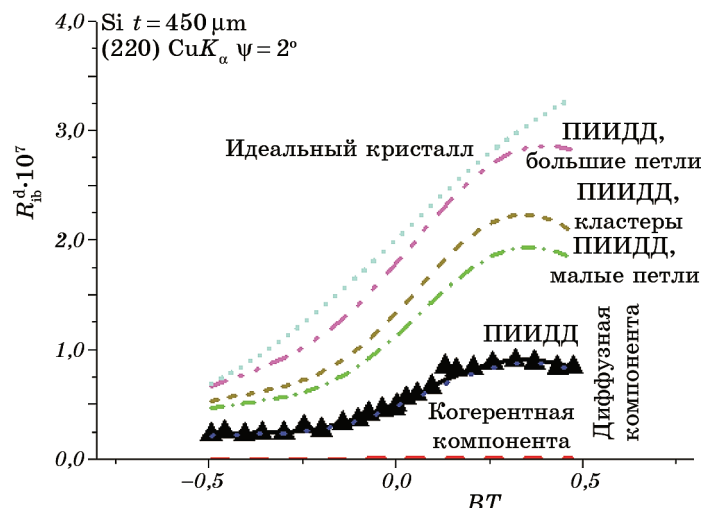


Рис. 6. ДЗ ПИИДД для отожженного образца кремния (образец 2). Маркеры — ДЗ ПИИДД, полученная экспериментально. Линии — ДЗ ПИИДД, рассчитанные по модели (1)–(3) при $\alpha'/\alpha = 1,96$, $\beta'/\beta = 7,8$, $\gamma'/\gamma = 5,71$, $L = 0,0359$, $\mu_{ds} = 0,00641 \text{ мкм}^{-1}$ ($\mu_{ds}/\mu_0 = 0,4501$), $\mu^* = 0,00152 \text{ мкм}^{-1}$ ($\mu^*/\mu_0 = 0,1067$).

Fig. 6. DD of TIIDD of annealed silicon sample (sample 2). Markers are experimental data. Curves are calculated by the formulas (1)–(3) at $\alpha'/\alpha = 1,96$, $\beta'/\beta = 7,8$, $\gamma'/\gamma = 5,71$, $L = 0,0359$, $\mu_{ds} = 0,00641 \text{ μm}^{-1}$ ($\mu_{ds}/\mu_0 = 0,4501$), $\mu^* = 0,00152 \text{ μm}^{-1}$ ($\mu^*/\mu_0 = 0,1067$).

фектов были бы определены неправильно.

Рисунок 6 иллюстрирует усиление влияния на поведение ДЗ ПИИДД кластеров в результате использования излучения с большей длиной волны. Из рисунков 4–6 видно, что в приближении «тонкого» кристалла определяющим типом дефектов являются мелкие петли, а в приближении «толстого» кристалла усиливается влияние больших петель и кластеров. Именно благодаря комбинации результатов, полученных для этих двух случаев, удалось определить неизвестные параметры всех типов дефектов.

Следует отметить, что в исследованных образцах влияние на ДЗ ПИИДД кластеров не было определяющим ни в одном из условий дифракции. Рассмотрение случая определяющей роли кластеров в формировании ДЗ ПИИДД будет проведено в дальнейшем.

5. ВЫВОДЫ

С целью разработки подхода для диагностики параметров несовершенств монокристаллов методом ДЗ ПИИДД в случаях, когда диффузная составляющая ПИИДД может значительно превышать ко-

герентную составляющую, было предложено использовать эвристические полуфеноменологические модели. Отсутствие на сегодня точного теоретического описания ДЗ ПИИДД делает использование полуфеноменологических моделей особенно актуальным. При этом измерения ДЗ ПИИДД при различных условиях дифракции и в разных областях деформации могут позволить определить как параметры дефектной структуры, так и необходимые характеристики ДЗ. В результате появляется возможность при помощи даже упрощенных моделей проводить количественную оценку характеристик диагностику хаотически распределенных дефектов методом ДЗ ПИИДД.

Однако учитывая показанную высокую чувствительность метода ДЗ ПИИДД к характеристикам дефектов, необходимо либо дальнейшее усовершенствование эвристических моделей, либо обобщение строгой теории динамического рассеяния в слабо изогнутых монокристаллах с дефектами на случай более сильных изгибов.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. М. А. Кривоглаз, Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами (Москва: Наука: 1967).
2. М. А. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin: Springer: 1996).
3. 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).
4. 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).
5. V. V. Lizunov, I. M. Zabolotnyy, Ya. V. Vasylyk, I. E. Golentus, and M. V. Ushakov, *Usp. Fiz. Met.*, **20**, No. 1: 75 (2019).
6. 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, *Металлофиз. новейшие технол.*, **40**, № 9: 1133 (2018).
7. Ф. Н. Чуховский, *Металлофизика*, **2**, № 6: 3 (1980).
8. Ф. Н. Чуховский, *Металлофизика*, **3**, № 5: 3 (1981).
9. F. N. Chukhovskii and P. V. Petrashen, *Acta Cryst. A*, **33**: 311 (1977).
10. Л. И. Даценко, В. Б. Молодкин, М. Е. Осинковский, *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами* (Киев: Наукова Думка: 1988).
11. И. Е. Таланин, *Механизм образования и свойства ростовых микродефектов в бездислокационных монокристаллах кремния* (Дисс. доктора физ.-мат. наук) (Черновцы: ЧНУ: 2005).
12. A. Borghesi, B. Pivac, A. Sassella, and A. Stella, *J. Appl. Phys.*, **77**, No. 9: 4169 (1995).

REFERENCES

1. M. A. Krivoglaz, *Teoriya Rasseyaniya Rentgenovskikh Luchey i Teplovykh Neytronov Real'nyimi Kristallami* [Theory of X-Rays and Thermal Neutrons Scattering by Real Crystals] (Moscow: Nauka: 1967) (in Russian).
2. M. A. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin: Springer: 1996).
3. V. V. Lizunov, V. B. Molodkin, S. V. Lizunova, M. G. Tolmachev, O. S. Skakunova, S. V. Dmitriev, B. V. Sheludchenko, S. M. Brovchuk, L. M. Skapa, R. V. Lekhnyak, and K. V. Fuzik, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **36**, No. 7: 857 (2014) (in Russian).
4. L. M. Skapa, V. V. Lizunov, V. B. Molodkin, E. G. Len, B. V. Sheludchenko, S. V. Lizunova, O. S. Skakunova, M. G. Tolmachev, S. V. Dmitriev, R. V. Lekhnyak, G. O. Velikhovskii, V. V. Molodkin, I. M. Zabolotnyi, K. V. Fuzik, and O. P. Vas'kevich, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **37**, No. 11: 1567 (2015) (in Russian).
5. V. V. Lizunov, I. M. Zabolotnyy, Ya. V. Vasylyk, I. E. Golentus, and M. V. Ushakov, *Usp. Fiz. Met.*, **20**, No. 1: 75 (2019).
6. 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, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **40**, No. 9: 1133 (2018) (in Russian).
7. F. N. Chukhovskii, *Metallofizika*, **2**, No. 6: 3 (1980) (in Russian).
8. F. N. Chukhovskii, *Metallofizika*, **3**, No. 5: 3 (1981) (in Russian).
9. F. N. Chukhovskii and P. V. Petrashen, *Acta Cryst. A*, **33**: 311 (1977).
10. L. I. Datsenko, V. B. Molodkin, and M. E. Osinovskiy, *Dinamicheskoe Rasseyanie Rentgenovskikh Luchey Real'nyimi Kristallami* [Dynamical X-Ray Scattering of Nonideal Crystals] (Kyiv: Naukova Dumka: 1988) (in Russian).
11. I. E. Talanin, *Mekhanizm Obrazovaniya i Svoystva Rostovykh Mikrodefektov v Bezdislokatsionnykh Monokristallakh Kremniya* [The Mechanism of Formation and Properties of the Growth of Microdefects in Dislocation-Free Silicon Single Crystals] (Thesis of Dissert. for Dr. Phys.-Math. Sci.) (Chernivtsi, Chernivtsi National University: 2005) (in Russian).
12. A. Borghesi, B. Pivac, A. Sassella, and A. Stella, *J. Appl. Phys.*, **77**, No. 9: 4169 (1995).