

©2012 р. Б.К. Остафійчук, І.П. Яремій, У.О. Томин, С.І. Яремій,  
І.М. Фодчук\*, І.І. Гуцуляк\*

Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, Івано-Франківськ  
\*Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, Чернівці

## ВРАХУВАННЯ ЕФЕКТІВ АНІЗОТРОПІЇ В ОРІЄНТАЦІЇ РАДІАЦІЙНИХ ДЕФЕКТІВ ПІД ЧАС РОЗРАХУНКУ СТАТИЧНОГО ФАКТОРА ДЕБАЯ-ВАЛЛЕРА ТА КОЕФІЦІЄНТА ЕКСТИНКЦІЇ

Враховано анізотропію в орієнтації радіаційно зумовлених дислокаційних петель під час розрахунку статичного фактора Дебая-Валлера та коефіцієнта екстинкції. Отримано значення даних коефіцієнтів для набору петель при різних відбиваннях. Змодельовано теоретичні криві дифракційного відбивання з врахуванням вказаної анізотропії та показано, що їх інтенсивність за межами додаткової осциляційної структури та інтенсивність останніх осциляцій додаткової осциляційної структури значно відрізняються від інтенсивності кривих, змодельованих в припущенні, що радіаційно зумовлені дислокаційні петлі зустрічаються у всіх кристалографічних площинах з однаковою ймовірністю.

**Ключові слова:** анізотропія, статичний фактор Дебая-Валлера, коефіцієнт екстинкції, дислокаційна петля, вектор Бюргерса.

Учтено анизотропию в ориентации радиационно обусловленных дислокационных петель при расчете статического фактора Дебая-Валлера и коэффициента экстинкции. Получено значения данных коэффициентов для набора петель при разных отражениях. Смоделировано теоретические кривые дифракционного отражения с учетом указанной анизотропии и показано, что их интенсивность за пределами дополнительной осцилляционной структуры и интенсивность последних осцилляций дополнительной осцилляционной структуры значительно отличаются от интенсивности кривых, смоделированных в предположении, что радиационно обусловленные дислокационные петли встречаются во всех кристаллографических плоскостях с одинаковой вероятностью.

**Ключевые слова:** анизотропия, статический фактор Дебая-Валлера, коэффициент экстинкции, дислокационная петля, вектор Бюргерса.

Anisotropy in orientation of the radiation-caused dislocation loops was considered in the static Debye-Waller factor and extinction coefficient calculations. The values of these coefficients for a set of loops at different reflections were received. Theoretical rocking curves were modeled taking into account mentioned above anisotropy. And it was shown that their intensity outside the additional oscillating structure and the intensity of the last oscillations of the additional oscillating structure are significantly different from the intensity of the curves simulated in assumption that the radiation caused dislocation loops occur in all crystallographic planes with the equal probability.

**Keywords:** anisotropy, static Debye-Waller factor, extinction coefficient, dislocation loop, Burgers vector.

### Вступ

Ключовими елементами волоконно-оптичних та інтегрально-оптичних приладів є оптичні хвилеводи. Одним із методів модифікації приповерхневих шарів матеріалів з метою отримання хвилеводних структур є іонна імплантація, яка, в порівнянні з іншими методами (іонний обмін, епітаксійний ріст, дифузія), має ряд переваг [1]. Більшість оп-

тичних хвилеводів та інтегрованих оптичних приладів виготовляються з використанням легких іонів (наприклад,  $H^+$  та  $He^+$ ), в результаті імплантації якими на певній відстані від поверхні матеріалу утворюється так званий "оптичний бар'єр" з показником заломлення нижчим, ніж у приповерхневому шарі. Область між цим бар'єром та поверхнею виявляється оточеною областями з

відносно нижчим показником заломлення і може використовуватись як хвилевод [2].

До зниження показника заломлення матеріалу та виникнення "оптичного бар'єру" приводить часткове розупорядкування ґратки, пов'язане з енергетичними втратами іонів-імпламентів, що зумовлюють виникнення вакансій і міжвузельних атомів. Останні, в свою чергу, можуть об'єднуватися, утворюючи кластери і дислокаційні петлі. Значення показника заломлення імпламентованого матеріалу визначається формою, розмірами та концентрацією радіаційних дефектів, а у випадку дислокаційних петель та циліндричних або дископодібних кластерів – ще й їх просторовою орієнтацією.

Характеристики радіаційних дефектів визначають методами Х-променевої дифрактометрії. При цьому точність отриманих результатів буде залежати від того, на скільки близька закладена при моделюванні теоретичних кривих дифракційного відбивання (КДВ) модель імпламентованого шару до його реальної структури. Зокрема, параметрами, що впливають на вигляд теоретичних КДВ, є статичний фактор Дебая-Валлера і коефіцієнт екстинкції. Але існуючі на сьогодні методики їх розрахунку базуються на припущенні, що дефекти утворюються у всіх кристалографічних площинах з однаковою ймовірністю. Тому метою даної роботи було врахування анізотропії в орієнтації радіаційно зумовлених дислокаційних петель при розрахунку статичного фактора Дебая-Валлера і коефіцієнта екстинкції.

### 1 Теоретична частина

Згідно узагальненої динамічної теорії розсіяння Х-хвиль, коефіцієнт відбивання від монокристалів з однорідно розподіленими дефектами складається з когерентної і дифузної компонент [3]:

$$R(\Delta\theta) = R_{coh}(\Delta\theta) + R_{diff}(\Delta\theta). \quad (1)$$

Інформація про характеристики дефектів входить в ці компоненти через статичний фактор Дебая-Валлера  $E = \exp(-L)$  і коефіцієнт поглинання внаслідок дифузного розсіяння  $\mu_{ds}(\Delta\theta)$ , вперше введений у праці [4] і незалежно в [5].

### 1.1 Врахування анізотропних ефектів при обчисленні статичного фактора Дебая-Валлера

Наявність різних типів дефектів у кристалі приводить до послаблення інтенсивності кривих дифракційного відбивання. В теорії розсіяння Х-променів реальними кристалами з випадковими полями зміщень статичні властивості полів зміщень описують усередненим за ансамблем, що еквівалентно усередненню за об'ємом кристала, статичним фактором Дебая-Валлера  $L$  [6, 7]:

$$E = e^{-L} = \left\langle e^{i\vec{H}\vec{U}_{ts}} \right\rangle. \quad (2)$$

де  $H = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta = \frac{2\pi}{d_{HKL}}$  – модуль вектора дифракції,  $\lambda$  – довжина хвилі випромінювання,  $d_{HKL}$  – міжплощинна відстань,  $\vec{U}_{ts}$  – зміщення, створене в  $s$ -тому вузлі дефектом у позиції  $t$ .

Якщо дефекти з середньою концентрацією  $c$  хаотично розташовані по кристалу, концентрація дефектів мала ( $c \ll 1$ ), а зміщення  $\vec{U}_{ts}$  швидко спадають з відстанню, то  $L$  можна виразити так:

$$L = c \sum_t (1 - \cos \vec{H}\vec{U}_{ts}) \approx \frac{c}{V_c} \int (1 - \cos \vec{H}\vec{U}) d\vec{r}, \quad (3)$$

де  $V_c$  – об'єм елементарної комірки кристалу.

Для дислокаційних петель маємо [5]:

$$L = \frac{cR_0^3}{V_c} (Hb)^{3/2} \eta(\vec{H}^0, \vec{b}^0), \quad (4)$$

де  $R_0$  – усереднений радіус петлі,  $\vec{b}^0 = \vec{b}/b$  – одиничний вектор у напрямку вектора Бюргерса петлі  $\vec{b}$ ,  $b = \pm |\vec{b}|$  для петель включення і вакансійних петель відповідно,  $\vec{H}^0 = \vec{H}/H$  – одиничний вектор у напрямку вектора дифракції  $\vec{H}$ ,

$$\eta(\vec{H}^0, \vec{b}^0) = \frac{\sqrt{\pi}}{6} \int d\Omega \left| \vec{H}^0 \vec{\tau}(\Omega, \vec{b}^0) \right|^{3/2}. \quad (5)$$

Поле зміщень атомів  $\vec{\tau}(\Omega, \vec{b}^0)$  здебільшо-

го неможливо задати точно, тому в роботах [5, 8] його було замінено асимптотичним виразом, що справедливий при  $Hb \gg 1$ , але досить добре описує поле і при середніх значеннях  $Hb$ :

$$\bar{\tau}(\Omega, \bar{b}^0) = \frac{1}{4} \left( \frac{1-2\nu}{1-\nu} \left[ 2\bar{b}^0(\bar{b}^0\bar{r}^0) - \bar{r}^0 \right] + \frac{3}{1-\nu} \bar{r}^0(\bar{b}^0\bar{r}^0)^2 \right), \quad (6)$$

де  $\bar{r}^0 = \bar{r}/r$ ,  $\bar{r}$  – радіус-вектор точки, в якій обчислюється зміщення,  $\nu$  – коефіцієнт Пуассона.

Якщо припустити, що дислокаційні петлі зустрічаються у всіх площинах виду  $\{100\}$ ,  $\{110\}$  та  $\{111\}$ , то можна усереднити (5) за всіма фізично еквівалентними в кубічній сингонії векторами Бюргера  $\bar{b}_i$  ( $i=1, \dots, z$ ):

$$\bar{\eta}(\bar{H}^0, \bar{b}^0) = \frac{1}{z} \sum_{i=1}^z \eta(\bar{H}^0, \bar{b}_i^0). \quad (7)$$

Врахувавши, що  $\nu = 1/3$ , Дедерікс в [5] отримав наступні значення для  $\bar{\eta}(\bar{H}^0, \bar{b}^0)$ :

$$\begin{aligned} \bar{H}^0 = \langle 100 \rangle; \langle 110 \rangle; \langle 111 \rangle; \text{ для} \\ \bar{b}^0 = \langle 100 \rangle: \bar{\eta} = 0,460; 0,495; 0,515; \\ \bar{b}^0 = \langle 110 \rangle: \bar{\eta} = 0,495; 0,495; 0,485; \\ \bar{b}^0 = \langle 111 \rangle: \bar{\eta} = 0,515; 0,485; 0,495. \end{aligned}$$

Очевидно, в такому випадку можна вважати, що  $\bar{\eta} \approx 0,5$ . Також значення, близькі до 0,5, були отримані в праці [7]. Тоді формула фактора Дебая-Валлера для дислокаційних петель набуває вигляду:

$$L = \frac{cR_0^3}{V_c} \frac{1}{2} (Hb)^{3/2}. \quad (8)$$

Як показують експериментальні дані, дислокаційні петлі, що формуються в приповерхневих шарах монокристалів після їх імплантації, зустрічаються в різних площинах з різною ймовірністю. Тож у кожному конкретному випадку необхідно брати своє значення  $\bar{\eta}(\bar{H}^0, \bar{b}^0)$ , обчислене з урахуванням взаємного розміщення вектора дифракції  $\bar{H}$  та вектора Бюргера петлі  $\bar{b}$  (рис.1).

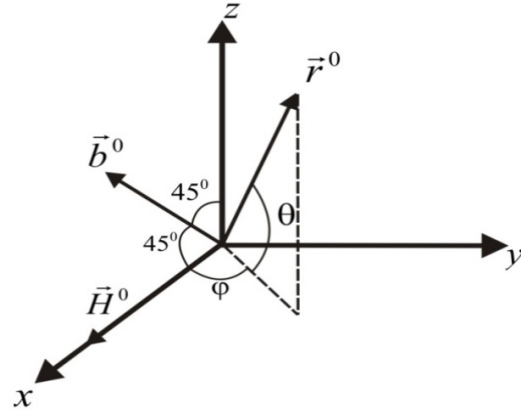


Рис.1. Схематичне зображення взаємного розміщення вектора дифракції  $\bar{H}$  (відбивання (100)), вектора Бюргера петлі  $\bar{b}=[101]$  та одиничного радіус-вектора  $\bar{r}^0$ .

Підставивши вираз для  $\bar{\tau}(\Omega, \bar{b}^0)$  у співвідношення (5) та врахувавши, що в сферичній системі координат  $d\Omega = \cos\theta d\theta d\phi$ , отримаємо:

$$\begin{aligned} \eta(\bar{H}^0, \bar{b}^0) = \frac{\sqrt{\pi}}{6} \int_0^{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \left| \frac{1}{4} \left( \frac{1-2\nu}{1-\nu} \left[ 2(\bar{H}^0\bar{b}^0) \times \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. \times (\bar{b}^0\bar{r}^0) - (\bar{H}^0\bar{r}^0) \right] + \frac{3}{1-\nu} (\bar{H}^0\bar{r}^0)(\bar{b}^0\bar{r}^0) \right) \right|^{3/2} \times \\ \times \cos\theta d\theta d\phi. \quad (9) \end{aligned}$$

Вважаючи, що  $\nu = 1/3$ , з допомогою математичного пакету *Maple* було отримано значення коефіцієнта  $\eta(\bar{H}^0, \bar{b}^0)$  для відбивань (100), (110) та (111) і дислокаційних петель з векторами Бюргера виду  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  та  $\langle 111 \rangle$  (таблиці 1-3).

Із таблиць 1-3 видно, що середні значення коефіцієнта  $\eta(\bar{H}^0, \bar{b}^0)$  добре узгоджуються зі значеннями, отриманими в [5, 7]. При цьому значення коефіцієнта  $\eta(\bar{H}^0, \bar{b}^0)$  для конкретних орієнтацій вектора Бюргера петлі  $\bar{b}$  у більшості випадків відрізняються від середнього значення для відповідного набору петель. Тому коли у кристалі присутні дислокаційні петлі з певним набором векторів Бюргера, сумарний фактор Дебая-Валлера визначатиметься сумою, кожному доданку

якої відповідатимуть свої значення коефіцієнта,  $\eta(\vec{H}^0, \vec{b}^0)$  модуля вектора Бюргерса, концентрації та розміру петлі:

$$L = \sum_i L_i = \sum_i \frac{c_i R_{0i}^3}{V_c} \eta_i(\vec{H}^0 \vec{b}_i^0) (H b_i)^{3/2} \quad (10)$$

Таблиця 2. Значення  $\eta(\vec{H}^0, \vec{b}^0)$  для дислокаційних петель з векторами Бюргерса виду  $\langle 110 \rangle$  та відбивань (100), (110), (111).

$\vec{H} \backslash \vec{b}$	[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

Таблиця 3. Значення  $\eta(\vec{H}^0, \vec{b}^0)$  для дислокаційних петель з векторами Бюргерса виду  $\langle 111 \rangle$  та відбивань (100), (110), (111).

$\vec{H} \backslash \vec{b}$	[111]	$[\bar{1}\bar{1}1]$	$[1\bar{1}\bar{1}]$	$[\bar{1}1\bar{1}]$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	$[\bar{1}11]$	$[1\bar{1}1]$	$[\bar{1}\bar{1}1]$	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

### 1.2 Врахування анізотропних ефектів при обчисленні коефіцієнта екстинкції

Параметр  $\mu_{ds}(\Delta\theta)$  описує ефективне поглинання або екстинкцію когерентних хвиль внаслідок їх розсіяння на дефектах і перетворення у дифузні хвилі [9]. Вираз для  $\mu_{ds}(\Delta\theta)$  у [5] записаний в такому вигляді:

$$\mu_{ds} = -\frac{1}{K} \left[ \frac{1}{2} (I_{00}^{SS} + I_{HH}^{SS}) \pm W(1+W^2)^{-\frac{1}{2}} \frac{1}{2} (I_{00}^{SS} - I_{HH}^{SS}) \mp (1+W^2)^{-\frac{1}{2}} \frac{1}{2} (I_{0H}^{SS} + I_{H0}^{SS}) \right] \quad (11)$$

де  $W = -(\vec{K} + \vec{H}/2)\vec{H}/CK^2\chi_H e^{-M_H}$ , (12)  
 $K = 2\pi/\lambda$  – модуль хвильового вектора падаючої хвилі,  $C = 1$  для  $\sigma$ -поляризації ( $s=1$ ),  $C = \cos 2\theta_B$  для  $\pi$ -поляризації ( $s=2$ ),  $\theta_B$  – кут Брела,  $\chi_H$  – діелектрична сприйнятливність кристалу. Верхній знак в (11) відповідає слабкому поглинанню хвильових полів,

Таблиця 1. Значення  $\eta(\vec{H}^0, \vec{b}^0)$  для дислокаційних петель з векторами Бюргерса виду  $\langle 100 \rangle$  та відбивань (100), (110), (111).

$\vec{H} \backslash \vec{b}$	[100]	$[\bar{1}00]$	[010]	$[0\bar{1}0]$	[001]	$[00\bar{1}]$	Сер. знач.
[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

а нижній – сильному.  $I_{00}^{SS}$ ,  $I_{HH}^{SS}$ ,  $I_{0H}^{SS}$ ,  $I_{H0}^{SS}$  – коефіцієнти Фур'є уявної частини  $\vec{I}$  складової періодичного потенціалу  $\vec{U} = \vec{K} + i\vec{I}$ , яка відповідає поглинанню Х-хвиль через дифузне розсіяння. У двоххвильовому наближенні коефіцієнт  $I_{00}^{SS}$  відповідає сильному дифузному розсіянню плоскої хвилі  $\vec{K}$  у напрямку  $\vec{K} + \vec{H}$ ,  $I_{HH}^{SS}$  – дифузному розсіянню плоскої хвилі  $\vec{K} + \vec{H}$  у напрямку  $\vec{K}'$  ( $|\vec{K}'| \approx |\vec{K}|$ ,  $\vec{K}' = \vec{K} + \vec{H} + \vec{q}$  – хвильовий вектор дифузно розсіяної плоскої хвилі,  $\vec{q}$  – переданий імпульс за рахунок розсіяння на спотвореннях, викликаних дефектами), коефіцієнти  $I_{0H}^{SS}$  та  $I_{H0}^{SS}$  відповідають інтерференційному розсіянню між  $\vec{K}$  і  $\vec{K} + \vec{H}$ , що є величинами другого порядку малості, у порівнянні з  $I_{00}^{SS}$  і  $I_{HH}^{SS}$ , тому ними можна знехтувати, а тоді формула (11) дещо спроститься.

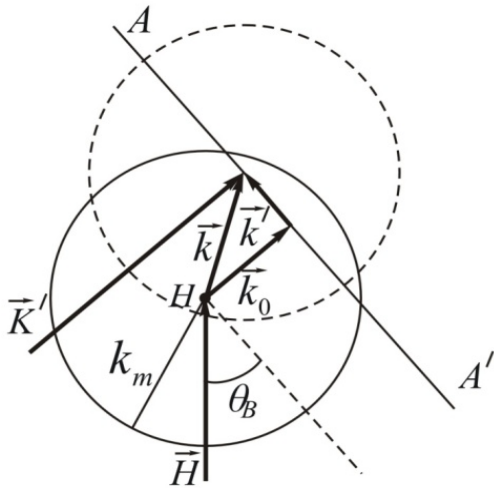


Рис.2. Схематичне зображення імпульсного простору поблизу вузла оберненої ґратки  $H$  ( $AA'$  – лінія перетину площини дифракції  $(\vec{K}, \vec{H})$  із сферою Евальда).

Коефіцієнти  $I_{HH'}^{SS}$ , де  $H, H'=O, H$ , визначаються за співвідношенням з праць [5,9]:

$$I_{HH'}^{SS} = -KcC^2 E^2 m_0 J_t(k_0). \quad (13)$$

Тут  $k_0$  – величина відхилення вузла  $O\Gamma$  від сфери Евальда;  $t=1$  відповідає складовій  $I_{00}^{SS}$ ,  $t=2$  – складовій  $I_{HH}^{SS}$ ,

$$m_0 = \frac{\pi V_c}{4} \left( \frac{H|\chi_{Hr}|}{\lambda} \right)^2, \quad (14)$$

$\chi_{Hr}$  – дійсна компонента діелектричної сприйнятливості кристалу  $\chi_H$ ,

$$J_t(k_0) = \frac{1}{\pi} \int dS_{\vec{K}'} F(\vec{q}). \quad (15)$$

У загальному випадку вектор  $\vec{q}$  – комплексний. У працях [3, 5] враховується тільки його дійсна складова:  $\vec{k} = \vec{K}' - \vec{K} - \vec{H}$  – відхилення хвильового вектора дифузної розсіяної хвилі  $\vec{K}'$  від вузла оберненої ґратки ( $O\Gamma$ )  $H$  (рис.2). У праці [5] вираз для  $\mu_{ds}(\Delta\theta)$  отримано за умови  $\Delta\theta=0$ , де  $\Delta\theta$  – кутове відхилення від умови Вульфа-Брега.

Інтегрування в (15) проводиться по сфері Евальда поблизу вузла  $O\Gamma$ ,  $F(\vec{q}) = |\vec{v}_{\vec{q}}|^2$ ,  $dS_{\vec{K}'} = d\vec{k}'$  – елемент площі на площині, яка апроксимує сферу Евальда поблизу вузла  $O\Gamma$ ,  $\vec{v}_{\vec{q}} = \vec{H}\vec{u}_{\vec{q}}$ ,  $\vec{u}_{\vec{q}}$  – Фур'є-компонента поля

зміщень довкола дефекту.

У випадку наявності в кристалі призматичних дислокаційних петель Фур'є-компонента поля зміщень матиме вигляд [5, 7]:

$$\vec{u}_{\vec{q}} = \frac{i\pi|\vec{b}|R_0^2}{V_c q} |\vec{\eta}(\vec{q}^0, \vec{b}^0)|^2, \quad (16)$$

де

$$|\vec{\eta}(\vec{q}^0, \vec{b}^0)|^2 = \frac{1}{(1-\nu)q} \times \left[ \frac{2(1-\nu)\vec{b}(\vec{b}\vec{q})}{|\vec{b}|^2} + \nu\vec{q} - \frac{\vec{q}(\vec{b}\vec{q})^2}{q^2|\vec{b}|^2} \right]. \quad (17)$$

Після інтегрування у співвідношенні (15) по  $\vec{k}'$  (13) перепишеться так:

$$I_{HH'}^{SS} = -KcC^2 E^2 m_0 \left( \frac{\pi b R_0^2}{V_c} \right)^2 \times j(\vec{e}_t) \ln \frac{q_m^2}{q_c^2}, \quad (18)$$

де  $\vec{e}_1 = (\vec{K} + \vec{H})/|\vec{K} + \vec{H}|$ ,  $\vec{e}_2 = \vec{K}/|\vec{K}|$ ,  $j(\vec{e}_t)$  – кутовий інтеграл у тангенціальній площині  $\vec{k} \perp \vec{e}_t$ ,  $\vec{k} = \vec{k}'/|\vec{k}'|$ ,

$$j(\vec{e}_t) = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} |\vec{H}^0 \vec{\eta}(\vec{q}^0, \vec{b}^0)|^2. \quad (19)$$

Тут  $q_m = 2\pi/R_{eff}$  – межа розділу областей дифузного розсіяння Хуаня і Стокса-Вільсона,  $q_c = 2\pi/\Lambda_\sigma$  – параметр обрізання зі сторони малих  $q$ ,  $\Lambda_\sigma$  – довжина екстинкції,  $R_{eff}$  у випадку дислокаційних петель виражається, як  $R_{eff} = R_0 \sqrt{HbE}$ .

Оскільки  $j(\vec{e}_t)$  залежить не тільки від кута Брега  $\theta_B$ , а й від напрямку  $\vec{e}_t$ , то  $I_{00}^{SS}$  та  $I_{HH}^{SS}$  в загальному випадку різні, що приводить до асиметричності  $\mu_{ds}$ . Єдиними винятками є симетричні рефлекси типу  $\langle 100 \rangle$  та  $\langle 110 \rangle$ .

Підставивши співвідношення (11) значення для  $I_{00}^{SS}$  та  $I_{HH}^{SS}$  з (18), отримаємо

вираз для  $\mu_{dsi}$  ( $i=1, \dots, z$ ):

$$\mu_{dsi} = \frac{1}{2} c_i C^2 E^2 m_0 \left( \frac{\pi b_i R_{0i}^2}{V_c} \right)^2 [j(\bar{e}_1) + j(\bar{e}_2) \mp \mp W(1+W^2)^{-1/2} (j(\bar{e}_1) - j(\bar{e}_2))] \ln \frac{q_m^2}{q_c^2}, \quad (20)$$

де

$$j(\bar{e}_t) = \int_{\bar{k} \perp \bar{e}_t} \frac{d\varphi}{2\pi} \left[ 2 \left( \bar{H}^0 \bar{b}_i^0 \right) \left( \bar{b}_i^0 \bar{q}^0 \right) + \frac{v}{1-v} \left( \bar{H}^0 \bar{q}^0 \right) - \frac{1}{1-v} \left( \bar{H}^0 \bar{q}^0 \right) \left( \bar{b}_i^0 \bar{q}^0 \right)^2 \right]^2. \quad (21)$$

Позначимо:

$$D_i(\bar{H}^0, \bar{b}_i^0) = \frac{1}{2} [j(\bar{e}_1) + j(\bar{e}_2) \mp \mp W(1+W^2)^{-1/2} (j(\bar{e}_1) - j(\bar{e}_2))]. \quad (22)$$

Тоді:

$$\mu_{dsi} = c_i C^2 E^2 m_0 \left( \frac{\pi b_i R_{0i}^2}{V_c} \right)^2 \times D_i(\bar{H}^0, \bar{b}_i^0) \ln \frac{q_m^2}{q_c^2}. \quad (23)$$

Якщо вважати, що дислокаційні петлі займають всі фізично еквівалентні площини з однаковою ймовірністю, тобто провести усереднення за всіма напрямками векторів Бюргерса петель  $\bar{b}$ , вираз для  $j(\bar{e}_t)$  значно спрощується і в результаті отримаємо:

$$\bar{D}(\bar{H}^0, \bar{b}^0) = \left[ \frac{4}{15} + \frac{1}{30} \frac{-1+6v+3v^2}{(1-v)^2} \cos^2 \theta_B \right]. \quad (24)$$

Обчислення коефіцієнта  $D_i(\bar{H}^0, \bar{b}_i^0)$  зручно виконувати у системі координат, у якій вектор  $\bar{k}$  на рис.3б знаходиться в площині  $x'O'y'$ , вектор  $\bar{e}_t$  напрямлений вздовж осі  $O'z'$ , а вектор дифракції  $\bar{H}$  знаходиться в площині  $x'O'z'$ . Щоб перейти до такої системи координат, необхідно подіяти на вектори  $\bar{H}^0$  і  $\bar{b}^0$  по чергово матрицями повороту довкола координатних осей. Записати такі матриці для кожного відбивання мож-

на, виходячи з умови  $(\bar{H}, \bar{e}_t) = \sin \theta_B$ , а також врахувавши попередні зауваження. Тоді координати векторів у новій системі координат будуть такими:

$$\bar{e}_t = [001], \quad \bar{k} = [\cos \varphi \quad \sin \varphi \quad 0],$$

$$\bar{H}_t^0 = [\cos \theta_B \quad 0 \quad \sin \theta_B] \text{ при } t=1,$$

$$\bar{H}_t^0 = [\cos \theta_B \quad 0 \quad -\sin \theta_B] \text{ при } t=2.$$

Вектор Бюргерса петель для кожного конкретного випадку слід записувати у координатах нової системи відліку.

Розглянемо випадок, для прикладу, коли вектор дифракції  $\bar{H} = [100]$ , а вектор Бюргерса петель  $\bar{b} = [110]$  (рис.3). Координати одиничних векторів в системі координат  $xOy$  будуть такими:  $\bar{H}^0 = [100]$ ,  $\bar{b}^0 = \left[ \frac{\sqrt{2}}{2} \quad \frac{\sqrt{2}}{2} \quad 0 \right]$ .

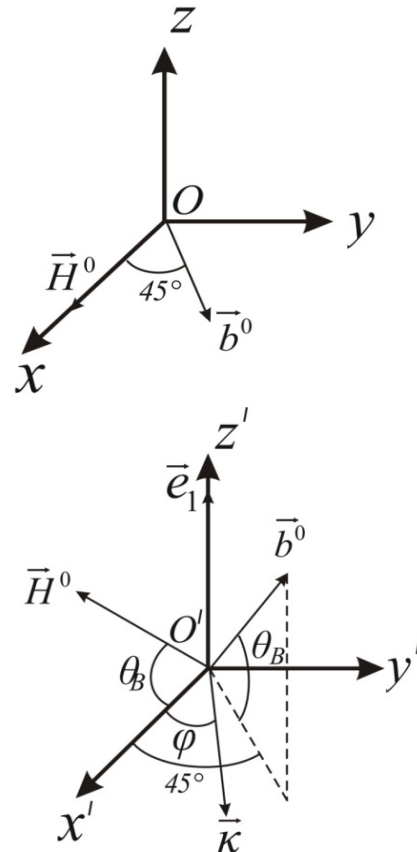


Рис. 3. Схематичне зображення взаємного розміщення вектора дифракції  $\bar{H}$  (відбивання (100)), вектора Бюргерса  $\bar{b}=[110]$  і одиничного вектора  $\bar{k}$  в системах координат  $xOz$  (а) та  $x'O'z'$  (б).

У випадку  $t=1$  вектор  $\vec{H}^0$ , а, отже, і всі інші вектори у системі координат повертаються довкола осі  $Oy$  на кут  $-\theta$ .

Матриця повороту матиме вигляд:

$$M_1 = \begin{pmatrix} \cos(-\theta) & 0 & \sin(-\theta) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(-\theta) & 0 & \cos(-\theta) \end{pmatrix}. \quad (25)$$

Множимо матрицю  $M_1$  на вектор  $\vec{b}^0$  і знаходимо його нові координати:

$$\vec{b}_1^0 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \cos \theta & \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \sin \theta \end{bmatrix}.$$

У випадку  $t=2$  вектор  $\vec{H}^0$ , а, отже, і всі інші вектори повертаються довкола осі  $Oy$  на кут  $\theta$ .

Матриця повороту матиме вигляд:

$$M_2 = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & 0 & \sin(\theta) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\theta) & 0 & \cos(\theta) \end{pmatrix}. \quad (26)$$

Множимо матрицю  $M_2$  на вектор  $\vec{b}^0$  і знаходимо його нові координати:

$$\vec{b}_2^0 = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \cos \theta & 0 & -\sqrt{2}/2 \sin \theta \end{bmatrix}$$

Аналогічно здійснюємо обчислення для інших орієнтацій вектора дифракції  $\vec{H}$  та вектора Бюргерса петлі  $\vec{b}$ .

Таблиця 5. Значення коефіцієнта  $D_i(\vec{H}^0, \vec{b}_i^0)$  для дислокаційних петель з векторами Бюргерса типу  $\langle 110 \rangle$  та відбивань (444), (888), (880).

$\vec{H} \backslash \vec{b}$	[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.
[444]	0,572	0,062	0,062	0,572	0,698	0,041	0,041	0,698	0,698	0,041	0,041	0,698	0,352
[888]	0,413	0,020	0,020	0,413	0,597	0,028	0,028	0,597	0,597	0,028	0,028	0,597	0,280
[880]	0,947	0,039	0,039	0,947	0,191	0,191	0,191	0,191	0,191	0,191	0,191	0,191	0,291

Таблиця 6. Значення коефіцієнта для дислокаційних петель з векторами Бюргерса типу  $\langle 111 \rangle$  і відбивань (444), (888), (880).

$\vec{H} \backslash \vec{b}$	[111]	$[\bar{1}\bar{1}1]$	$[1\bar{1}\bar{1}]$	$[\bar{1}1\bar{1}]$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	$[\bar{1}11]$	$[1\bar{1}1]$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	Сер. знач.
[444]	1,055	0,154	0,154	0,085	0,085	0,154	0,154	1,055	0,362
[888]	0,626	0,166	0,166	0,088	0,088	0,166	0,166	0,626	0,261
[880]	0,467	0,041	0,041	0,467	0,467	0,041	0,041	0,467	0,254

Із допомогою пакету *Maple* було отримано значення коефіцієнта  $D_i(\vec{H}^0, \vec{b}_i^0)$  для відбивань (444), (888) і (880). При цьому розглядалися дислокаційні петлі з векторами Бюргерса  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  і  $\langle 111 \rangle$ . Коефіцієнт Пуассона  $\nu$  вважався 1/3.

Результати обчислень наведені у таблицях 4-6.

Вочевидь значення коефіцієнта  $D_i(\vec{H}^0, \vec{b}_i^0)$ , а, отже, і коефіцієнта екстинкції  $\mu_{di}$ , залежить від орієнтації вектора Бюргерса петлі і у більшості випадків відрізняється від середнього значення для відповідного набору петель. Тому врахування анізотропії у орієнтації радіаційно зумовлених дислокаційних петель є важливим для більш точного визначення характеристик дефектної підсистеми кристалу методами X-променевої дифрактометрії.

Таблиця 4. Значення коефіцієнта  $D_i(\vec{H}^0, \vec{b}_i^0)$  для дислокаційних петель з векторами Бюргерса типу  $\langle 100 \rangle$  та відбивань (444), (888), (880).

$\vec{H} \backslash \vec{b}$	[100]	$[\bar{1}00]$	[010]	$[0\bar{1}0]$	[001]	$[00\bar{1}]$	Сер. знач.
[444]	0,370	0,370	0,370	0,370	0,223	0,223	0,321
[888]	0,401	0,401	0,401	0,401	0,207	0,207	0,336
[880]	0,614	0,614	0,614	0,614	0,010	0,010	0,412

## 2 Моделювання теоретичних КДВ за узагальненою динамічною теорією з врахуванням ефектів анізотропії.

Для оцінки впливу значень статичного фактора Дебая-Валлера і коефіцієнта екстинкції, обчислених з врахуванням анізотропії в орієнтації радіаційно зумовлених дислокаційних петель, на вигляд КДВ було розраховано відповідні теоретичні криві для відбивань (444), (888) і (880) від монокристалів галій-гадолінієвого гранату (ГГГ), імплантованих іонами  $\text{He}^+$  з енергією 100 кеВ і дозою  $4 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ . При цьому було розглянуто 3 випадки: а) наявність дислокаційних петель у всіх площинах виду  $\{111\}$ , б) наявність дислокаційних петель тільки у площинах (111), в) наявність дислокаційних петель тільки у площинах  $(\bar{1}11)$ . Зважаючи на те, що розподіл згенерованих під час іонної імплантації радіаційних дефектів є сильно неоднорідним, під час моделювання концентрація і радіус дефектів у приповерхневому порушеному шарі задавалися пропорційними профілю відносної деформації. При низьких дозах профіль відносної деформації пропорційний профілю дефектів, який, згідно динамічної моделі іонно-імплантованого шару [10], є сумою двох складових: дефектів, які формуються за рахунок ядерних втрат, і дефектів, які формуються за рахунок електронних енергетичних втрат. Як показали розрахунки, профіль дефектів, а отже і профіль відносної деформації, має складну залежність за глибиною. Тому для одержання простої аналітичної формули без втрати точності, математичний вираз записувався у вигляді суми асиметричної і спадної гауссіан [11]. Вектор Бюргерса дислокаційної петлі, як і в праці [12], вважався  $b = a\sqrt{3}/2$ .

Змодельовані теоретичні КДВ для різних значень статичного фактора Дебая-Валлера наведені на рис. 4 а для різних значень коефіцієнта екстинкції на рис.5.

Отже, як бачимо, значення коефіцієнта екстинкції найбільше впливає на інтенсивність КДВ за межами додаткової осциляційної структури, а значення статичного фактора

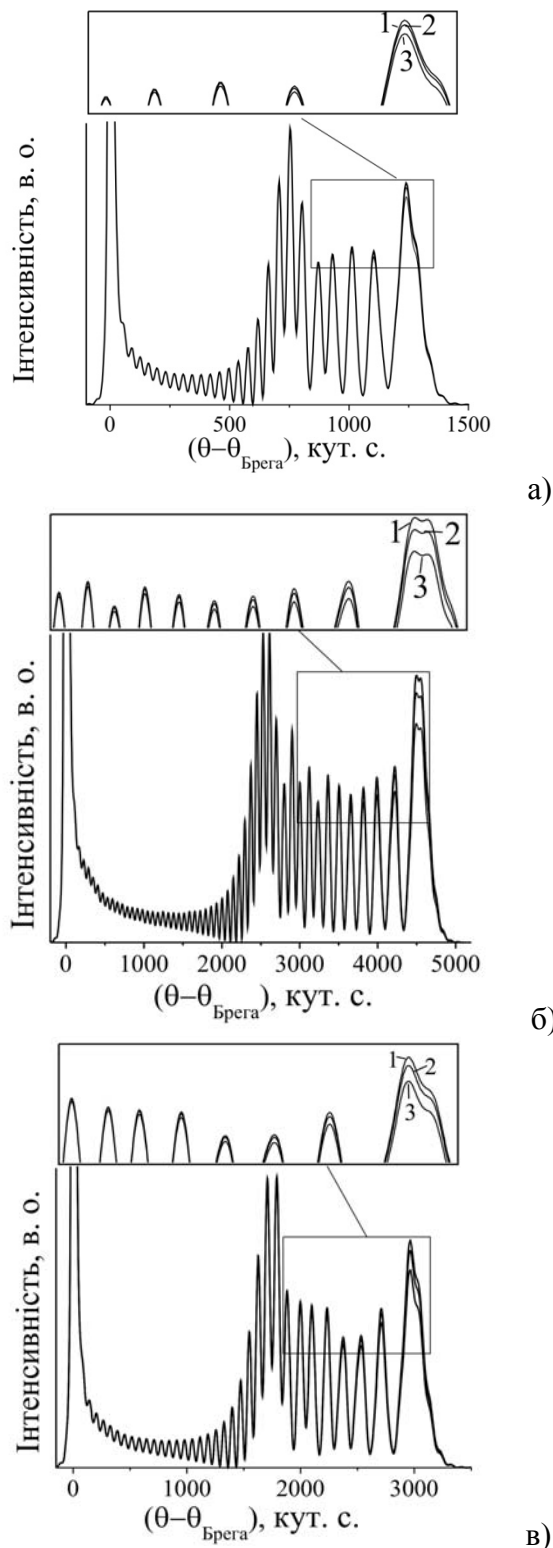


Рис. 4. Теоретичні КДВ для відбивань (444) (а), (888) (б), (880) (в), розраховані для значень статичного фактора Дебая-Валлера, що відповідають наявності у кристалі радіаційно зумовлених дислокаційних петель: 1 – у площинах  $(\bar{1}11)$ ; 2 – в усіх площинах виду  $\{111\}$ ; 3 – у площинах (111).



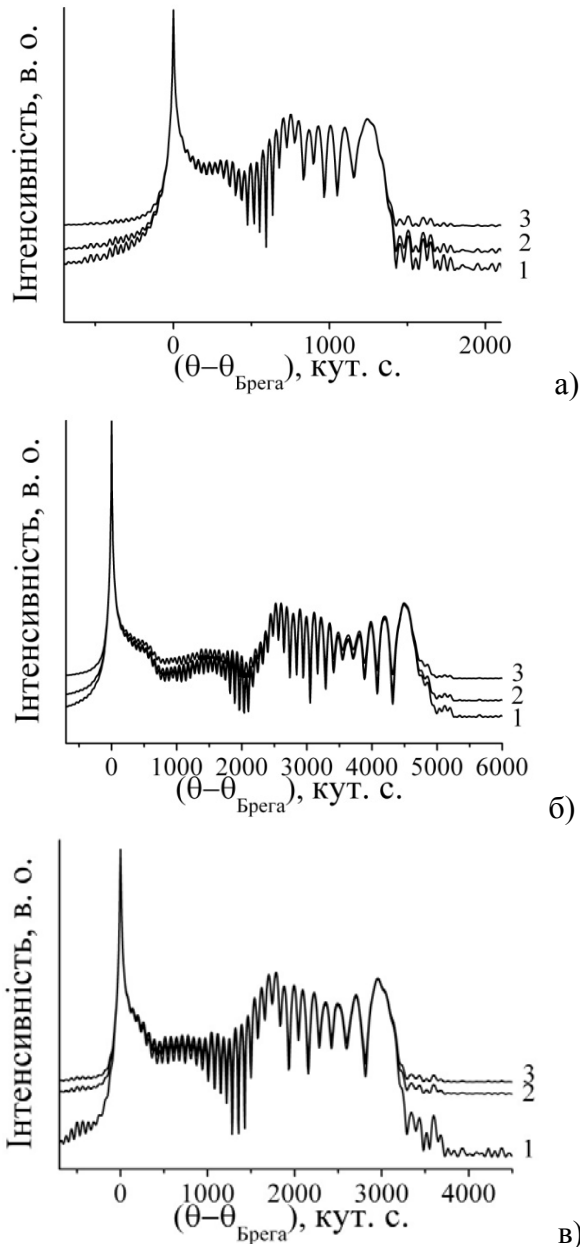


Рис. 5. Теоретичні КДВ для відбивань (444) (а), (888) (б), (880) (в), розраховані для значень коефіцієнта екстинкції, що відповідають наявності у кристалі радіаційно зумовлених дислокаційних петель: 1 – у площинах  $\{\bar{1}11\}$ ; 2 – в усіх площинах виду  $\{111\}$ ; 3 – у площинах (111).

Дебая-Валлера – на інтенсивність останніх осциляцій додаткової осциляційної структури КДВ, які відповідають максимальній деформації. Виходячи з того, що для відбивання (444) величина статичного фактора Дебая-Валлера близька до одиниці, то різниця у відповідних КДВ – незначна. Однак, для

відбивань (888) і (880) ця різниця є суттєво більшою. При цьому різниця інтенсивностей КДВ для різних значень фактора Дебая-Валлера і коефіцієнта екстинкції суттєво переважає експериментальну похибку і чітко фіксується засобами високороздільної X-променевої дифрактометрії. Тому анізотропні ефекти в іонно-імплантованих шарах необхідно враховувати для більш коректного розрахунку як профілів відносної деформації, так і параметрів радіаційних дефектів.

### Висновки

Властивості матеріалів, модифікованих шляхом іонної імплантації, визначаються характеристиками зумовлених імплантацією дефектів. У випадку дислокаційних петель і циліндричних або дископодібних кластерів, крім концентрації та радіуса, вагоме значення має ще й їх просторова орієнтація. Нами була врахована дана орієнтація при обчисленні статичного фактора Дебая-Валлера і коефіцієнта екстинкції для набору векторів Бюргерса петель  $\bar{b}$  при різних відбиваннях. Необхідність врахування анізотропних ефектів в іонно-імплантованих підшарах підтверджується теоретичними КДВ для відбивань (444), (888) і (880), змодельованими для випадків наявності у кристалі петель, орієнтованих у певних площинах. Інтенсивність таких КДВ значно відрізняється від інтенсивності КДВ, змодельованих у припущенні, що радіаційно зумовлені дислокаційні петлі зустрічаються у всіх площинах відповідного сімейства з однаковою ймовірністю.

### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Townsend P.D., Chandler P.J., Zhang L. Optical effects of ion implantation. – Cambridge: Cambridge University Press, 1994.
2. Feng Qiu Application of ion implantation to fabricate optical waveguides: Thesis of Dissertation. – Kochi University publishing. – Kochi, 2011.
3. Ольховський С.Й., Кисловський Є.М., Молодкін В.Б. та ін.. Диференційна рентгенівська дифракційна діагностика складної дефектної структури в монокристалах кремнію // Металлофізика і новіші технології. – 2000. – 22 (6). – С. 3-19.
4. Молодкін В.Б., Тихонова Е.А. Влияние диффузного рассеяния на эффект Бормана // ФММ. – 1967. – 24 (3). – С.385-394.
5. Dederics P.H. Effect of defect clustering on anoma-

- lous X-ray transmission // Physical review B. – 1970. – **1** (4). – P. 1306-1317.
6. Сидоренко С.І., Барабаш Р.І. Сучасний рентгеноструктурний аналіз реальних кристалів. – Київ: Наук. думка, 1997.
  7. Даценко Л.И., Молодкин В.Б., Осиновский М.Е. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами. – Киев: Наук. думка, 1988.
  8. Кривоглаз М.А. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах. – Киев: Наук. думка, 1983.
  9. Молодкин В.Б., Шпак А.П., Ковальчук М.В. и др. Многопараметрическая кристаллография на основе многообразности картины многократного рассеяния брэгговских и диффузных волн (метод стоячих диффузных волн) // УФН. – 2011. – **181** (7). – С. 681-712.
  10. Остафійчук Б.К., Федорів В.Д., Кравець В.И. и др. Структура приповерхностного слоя ферритгранатової плівки, імплантованої іонами бора // Металлофізика і новіші технології. – 1995. – **17** (2). – С. 67-72.
  11. Остафійчук В.Д., Федорів, Яремій С.І. та ін. Механізми дефектоутворення при імплантації монокристалів ГГГ іонами В<sup>+</sup> та Не<sup>+</sup> // Металлофізика і новіші технології. – 2008. – **30** (9). – С. 1215-1227.
  12. Пилипів В.М., Ольховський С.Й., Владімірова Т.П. та ін. Динамічна дифрактометрія структурних дефектів і деформацій в гранатовій плівковій системі Y<sub>3</sub>Fe<sub>5</sub>O<sub>12</sub>/Gd<sub>3</sub>Ga<sub>5</sub>O<sub>12</sub> // Металлофізика і новіші технології. – 2011. – **33** (9). – С. 1147-1174.