

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

Вплив анізотропії в орієнтації радіаційних дефектів на значення поглинання X-променів

Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76000, Україна, E-mail: ulyatomyn@gmail.com

Враховано анізотропію в орієнтації радіаційно зумовлених дислокаційних петель при розрахунку поглинання X-променів. Обчислено коефіцієнт $D(\hat{H}^0, \hat{b}_i^0)$, що залежить від взаємної просторової орієнтації вектора Бюргерса петлі \hat{b} та вектора дифракції \hat{H} , 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 значно відрізняється від інтенсивності кривих, змодельованих в припущенні, що радіаційно зумовлені дислокаційні петлі зустрічаються у всіх кристаліграфічних площинах з однаковою імовірністю.

Ключові слова: анізотропія, коефіцієнт екстинкції, дислокаційна петля, вектор Бюргерса.

Стаття поступила до редакції 11.08.2012; прийнята до друку 15.12.2012.

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 оптичних 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 в якості хвилевода [2].

До зниження показника заломлення матеріалу та виникнення «оптичного бар'єру» приводить часткове розупорядкування ґратки, пов'язане з ядерними енергетичними втратами іонів-імплантантів, що зумовлюють виникнення вакансій та міжвузельних атомів. Останні, в свою чергу, можуть об'єднуватись, утворюючи кластери та дислокаційні петлі.

Значення показника заломлення імплантованого матеріалу визначається формою, розмірами, та концентрацією радіаційних дефектів, а у випадку дислокаційних петель та циліндричних чи дископодібних кластерів – ще й їх просторовою

орієнтацією.

Визначити характеристики радіаційних дефектів можна методами X-променевої дифрактометрії. При цьому точність отриманих результатів буде залежати від того, на скільки близька закладена при моделюванні теоретичних кривих дифракційного відбивання (КДВ) модель імплантованого шару до його реальної структури. Зокрема, одним із параметрів, що впливають на вигляд теоретичних КДВ, є коефіцієнт екстинкції $m_{ds}(\Delta q)$. Але існуючі на сьогодні методики розрахунку останнього базуються на припущенні, що дефекти утворюються у всіх кристаліграфічних площинах з однаковою імовірністю. Тому метою даної роботи було врахування анізотропії в орієнтації радіаційно зумовлених дислокаційних петель при розрахунку поглинання X-променів.

I. Обчислення коефіцієнта екстинкції без врахування ефектів анізотропії

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

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

Інформація про характеристики дефектів входить

в ці компоненти через статичний фактор Дебая-Валлера $E = \exp(-L)$ і коефіцієнт поглинання внаслідок дифузного розсіяння $m_{ds}(\Delta q)$, вперше виведений в [4] і незалежно в [5]. Параметр $m_{ds}(\Delta q)$ описує ефективне поглинання або екстинкцію когерентних хвиль внаслідок їх розсіяння на дефектах і перетворення в дифузні хвилі [6]. Вираз для $m_{ds}(\Delta q)$ можна записати в наступному вигляді [5]:

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

де

$$W = -\left(\frac{\mathbf{r}}{K} + \frac{1}{2} \frac{\mathbf{r}}{H} \right) \mathbf{r} / CK^2 c_H e^{-M_H}, \quad (3)$$

\mathbf{H} – вектор дифракції; $K = 2p/l$ – модуль хвильового вектора падаючої хвилі; $C = 1$ для σ -поляризації ($s=1$), $C = \cos 2q_B$ для π -поляризації ($s=2$); q_B – кут Брега; c_H – діелектрична сприйнятливість кристалу.

Верхній знак в (3) відповідає слабкому поглинанню хвильових полів, а нижній – сильному поглинанню.

I_{00}^{SS} , I_{HH}^{SS} , I_{0H}^{SS} та I_{H0}^{SS} – коефіцієнти Фур'є уявної частини \mathbf{I} складової періодичного потенціалу $\mathbf{U} = \mathbf{K} + i\mathbf{I}$, яка відповідає поглинанню X-променів через дифузне розсіяння. У двоххвильовому наближенні коефіцієнт I_{00}^{SS} відповідає сильному дифузному розсіянню плоскої хвилі \mathbf{K} у напрямку $\mathbf{K} + \mathbf{H}$, I_{HH}^{SS} – дифузному розсіянню плоскої хвилі $\mathbf{K} + \mathbf{H}$ у напрямку $\mathbf{K}' \approx \mathbf{K}$ ($\mathbf{K}' = \mathbf{K} + \mathbf{H} + \mathbf{q}$ – хвильовий вектор дифузної розсіяної плоскої хвилі, \mathbf{q} – переданий імпульс за рахунок розсіяння на спотвореннях, викликаних дефектами), коефіцієнти I_{0H}^{SS} та I_{H0}^{SS} відповідають інтерференційному розсіянню між \mathbf{K} та $\mathbf{K} + \mathbf{H}$ і є величинами другого порядку малості, в порівнянні з I_{00}^{SS} та I_{HH}^{SS} , тому ними можна знехтувати, і тоді формула (2) дещо спроститься.

В загальному випадку вектор \mathbf{q} – комплексний. В роботах [3, 5] враховується тільки його дійсна

складова $\mathbf{k} = \mathbf{K}' - \mathbf{K} - \mathbf{H}$ – відхилення хвильового вектора дифузної розсіяної хвилі \mathbf{K}' від вузла оберненої ґратки (ОГ) H (рис. 1).

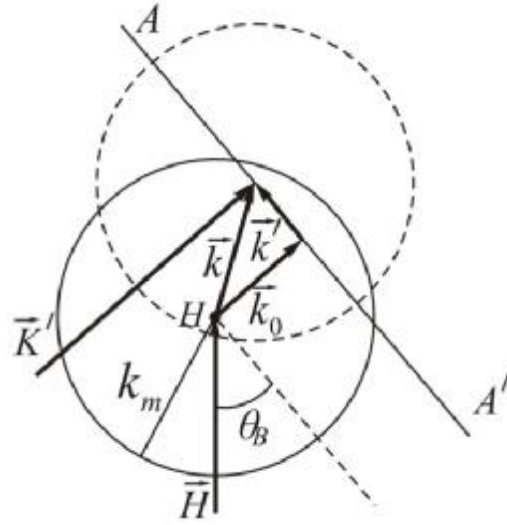


Рис. 1. Схематичне зображення імпульсного простору поблизу вузла оберненої ґратки H (AA' – лінія перетину площини дифракції (\mathbf{K}, \mathbf{H}) із сферою Евальда).

Коефіцієнти $I_{GG'}^{SS}$, де $G, G' = O, H$, визначаються за формулою [5, 6]:

$$I_{GG'}^{SS} = -KcC^2 E^2 m_0 J_t(k_0) \quad (4)$$

Тут c – концентрація дефектів, k_0 – величина відхилення вузла ОГ H від сфери Евальда, $t=1$ відповідає складовій I_{00}^{SS} , $t=2$ – складовій I_{HH}^{SS} ;

$$m_0 = \frac{pV_c}{4} \left(\frac{H |c_{Hr}|}{I} \right) \quad (5)$$

V_c – об'єм елементарної комірки кристалу; I – довжина хвилі випромінювання; c_{Hr} – дійсна компонента діелектричної сприйнятливості кристалу c_H ;

$$J_t(k_0) = \frac{1}{p} \int dS_{\mathbf{r}} F(\mathbf{q}) \quad (6)$$

В роботі [5] вираз для $m_{ds}(\Delta q)$ отримано при умові $\Delta q = 0$, де Δq – кутове відхилення від точної умови Вульфа-Брега. При цьому k_0 теж стає рівним нулю.

Інтегрування в (6) проводиться по сфері Евальда поблизу вузла ОГ, $F(\mathbf{q}) = |\mathbf{u}_{\mathbf{r}}|^2$, $dS_{\mathbf{r}} = d\mathbf{k}'$ – елемент площі на площині, яка апроксимує сферу

Евальда біля вузла $O\Gamma$, $\mathbf{u}_{\mathbf{r}} = \mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}}$, $\mathbf{u}_{\mathbf{r}}$ – фур’є-компонента поля зміщень довкола дефекту.

У випадку наявності в кристалі призматичних дислокаційних петель поле зміщень представляється у вигляді [5, 7]:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{A}(\mathbf{r}^0)}{r^2} \quad (7)$$

де

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}^0) = & \frac{bR_0^2}{8(1-n)} \left\{ (1-2n) \times \right. \\ & \left. \times \left[2b^0 \left(\frac{\mathbf{r}^0 \mathbf{r}^0}{b^0 r^0} - r^0 \right) + 3r^0 \left(\frac{\mathbf{r}^0 \mathbf{r}^0}{b^0 r^0} \right)^2 \right] \right\} \quad (8) \end{aligned}$$

\mathbf{b} – вектор Бюргерса петлі, $b^0 = \mathbf{b}/|\mathbf{b}|$, $b = \pm |\mathbf{b}|$ для петель включення та вакансійних петель відповідно, $r^0 = \mathbf{r}/|\mathbf{r}|$ – одиничний радіус-вектор точки, в якій визначається зміщення, R_0 – радіус петлі, ν – коефіцієнт Пуассона.

Фур’є-компонента поля зміщень матиме вигляд:

$$\mathbf{u}_{\mathbf{r}} = \frac{ip|\mathbf{b}|R_0^2}{V_c q} \left| \mathbf{h}(\mathbf{q}^0, b^0) \right| \quad (9)$$

де

$$\begin{aligned} \left| \mathbf{h}(\mathbf{q}^0, b^0) \right|^2 = & \frac{1}{(1-n)q} \times \\ & \times \left[\frac{2(1-n)\mathbf{r}^0 \mathbf{r}^0}{|\mathbf{b}|^2} + n\mathbf{r}^0 - \frac{\mathbf{q}^0 (\mathbf{r}^0 \mathbf{r}^0)^2}{q^2 |\mathbf{b}|^2} \right] \quad (10) \end{aligned}$$

Після інтегрування (6) по \mathbf{k}' (4) перепишеться наступним чином:

$$I_{GG'}^{SS} = -KcC^2 E^2 m_0 \left(\frac{pbR_0^2}{V_c} \right)^2 j(\mathbf{e}_t) \ln \frac{q_t}{q_c} \quad (11)$$

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

$$j(\mathbf{e}_t) = \int_{\mathbf{k} \perp \mathbf{e}_t} \frac{dj}{2p} \left| \mathbf{H}^0 \mathbf{h}(\mathbf{q}^0, b^0) \right| \quad (12)$$

Тут $q_m = 2p/R_{eff}$ – межа розділу областей дифузного розсіяння Хуаня і Стокса-Вільсона;

$q_c = 2p/\Lambda_s$ – параметр обрізання зі сторони малих Q ; Λ_s – довжина екстинкції; R_{eff} у випадку дислокаційних петель виражається, як $R_{eff} = R_0 \sqrt{HbE}$.

Після підстановки виразу для $\mathbf{h}(\mathbf{q}^0, b^0)$ з формули (10) в формулу (12) одержується вираз для $j(\mathbf{e}_t)$ [5]:

$$\begin{aligned} j(\mathbf{e}_t) = & 4a + \frac{1}{2} \left[1 - \left(\mathbf{H}^0 \mathbf{e}_t \right)^2 \right] \times \\ & \times \left(\frac{-1 + 6n + 3n^2}{15(1-n)^2} \right) + \\ & + b \left\{ 2 \left(1 - \sum_i H_i^0 e_{ti}^2 \right) - \frac{3}{2(1-n)} \right\} \times \\ & \times \left[1 - \left(\mathbf{H}^0 \mathbf{e}_t \right)^2 - \sum_i H_i^0 e_{ti}^2 + \mathbf{H}^0 \mathbf{e}_t \sum_i H_i^0 e_{ti}^3 \right] \quad (13) \\ & + \frac{1}{(1-n)^2} \frac{1}{16} \left[5 \left(1 - \left(\mathbf{H}^0 \mathbf{e}_t \right)^2 \right) + \right. \\ & \left. + \sum_i e_{ti}^4 \left(1 - 5 \left(\mathbf{H}^0 \mathbf{e}_t \right)^2 \right) - \right. \\ & \left. - 4 \sum_i H_i^0 e_{ti}^2 + 8 \mathbf{H}^0 \mathbf{e}_t \sum_i H_i^0 e_{ti}^2 \right] \left. \right\}, \end{aligned}$$

$$\text{де } a = \frac{1}{6} \left(1 - \sum_m b_m^0 \right), \quad b = \frac{1}{6} \left(5 \sum_m b_m^0 - 3 \right).$$

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

Вираз (13) значно спрощується при усередненні по всіх напрямках векторів Бюргерса петель \mathbf{b} , що еквівалентне припущенню, що петлі займають всі площини з однаковою імовірністю. Оскільки в такому випадку $\left\langle \sum_m b_m^0 \right\rangle = \frac{3}{5}$, то β стає рівним нулю і формула (13) набуває вигляду:

$$\begin{aligned} j(\mathbf{e}_t) = & 4a + \frac{1}{2} \left[1 - \left(\mathbf{H}^0 \mathbf{e}_t \right)^2 \right] \times \\ & \times \left(\frac{-1 + 6n + 3n^2}{15(1-n)^2} \right). \quad (14) \end{aligned}$$

Тепер $j(\mathbf{e}_t)$ залежить тільки від $(\mathbf{H}^0 \mathbf{e}_t)^2 = \sin^2 q_B$ і I_{HH}^{SS} стає рівним I_{00}^{SS} .

Тоді коефіцієнт екстинкції m_{ds} записується, як [5, 6]:

$$m_{ds} = cC^2 E^2 m_0 \left(\frac{pbR_0^2}{V_c} \right)^2 \times \left[\frac{4}{15} + \frac{1}{30} \frac{-1+6n+3n^2}{(1-n)^2} \cos^2 q_B \right] \ln \frac{q_i}{q_c} \quad (15)$$

Після врахування позначення $B_1 = \frac{4}{15} \left(\frac{pbR_0^2}{V_c} \right)^2$,

$$B_2 = bB_1, \quad b = \frac{1}{4} \left(\frac{-1+6n+3n^2}{(1-n)^2} \right) \quad \text{отримується}$$

наступний вираз для m_{ds} [6]:

$$m_{ds} = cC^2 E^2 m_0 \left[B_1 + \frac{B_2}{2} \cos^2 q_B \right] \ln \frac{q_i}{q_c} \quad (16)$$

Обчислення коефіцієнта екстинкції з врахуванням анізотропних ефектів

Як показують експериментальні дані, дислокаційні петлі, що формуються в приповерхневих шарах монокристалів після їх імплантації, зустрічаються в різних площинах з різною імовірністю. Це необхідно враховувати при обчисленні коефіцієнта екстинкції, який для певного відбивання можна записати у вигляді суми, кожен доданок якої буде відповідати конкретному випадку взаємної орієнтації вектора дифракції \mathbf{H} та вектора Бюргерса петлі \mathbf{b} :

$$m_{ds} = \sum_i m_{dsi} \quad (17)$$

Підставивши в формулу (2) значення для I_{00}^{SS} та I_{HH}^{SS} з (11), отримуємо вираз для m_{dsi} :

$$m_{dsi} = \frac{1}{2} c_i C^2 E^2 m_0 \left(\frac{pb_i R_{0i}^2}{V_c} \right)^2 \times [j(\mathbf{e}_1) + j(\mathbf{e}_2)] \mathbf{m}W(1+W^2)^{\frac{1}{2}} \times (j(\mathbf{e}_1) - j(\mathbf{e}_2)) \ln \frac{q_m^2}{q_c^2}, \quad (18)$$

де

$$j(\mathbf{e}_t) = \int_{\mathbf{k} \perp \mathbf{e}_t}^{2p} \frac{dj}{2p} \left[2(\mathbf{H}^0 \mathbf{b}_i^0)(\mathbf{b}_i^0 \mathbf{q}^0) + \frac{n}{1-n} (\mathbf{H}^0 \mathbf{q}^0) - \frac{1}{1-n} (\mathbf{H}^0 \mathbf{q}^0)(\mathbf{b}_i^0 \mathbf{q}^0)^2 \right] \quad (19)$$

Позначимо:

$$D(\mathbf{H}^0, \mathbf{b}_i^0) = \frac{1}{2} [j(\mathbf{e}_1) + j(\mathbf{e}_2)] \quad (20)$$

$$\mathbf{m}W(1+W^2)^{\frac{1}{2}} (j(\mathbf{e}_1) - j(\mathbf{e}_2))$$

Тоді:

$$m_{dsi} = c_i C^2 E^2 m_0 \left(\frac{pb_i R_{0i}^2}{V_c} \right)^2 \times D(\mathbf{H}^0, \mathbf{b}_i^0) \ln \frac{q_m^2}{q_c^2}. \quad (21)$$

Обчислення коефіцієнта $D(\mathbf{H}^0, \mathbf{b}_i^0)$ зручно виконувати в системі координат, в якій вектор \mathbf{k} знаходиться в площині $x'O'y'$, вектор \mathbf{e}_t напрямлений вздовж осі $O'z'$, а вектор дифракції \mathbf{H} знаходиться в площині $x'O'z'$. Щоб перейти до такої системи координат, необхідно подіяти на вектори \mathbf{H}^0 та \mathbf{b}^0 почергово матрицями повороту довкола координатних осей. Записати такі матриці для кожного відбивання можна, виходячи з умови $(\mathbf{H}, \mathbf{e}_t) = \sin q_B$, а також врахувавши попередні зауваження. Тоді координати векторів в новій системі координат будуть наступними:

$$\mathbf{e}_t = [001];$$

$$\mathbf{k} = [\cos j \quad \sin j \quad 0];$$

$$\mathbf{H}_1^0 = [\cos q_B \quad 0 \quad \sin q_B] \quad \text{при } t=1;$$

$$\mathbf{H}_2^0 = [\cos q_B \quad 0 \quad -\sin q_B] \quad \text{при } t=2.$$

Вектор Бюргерса петлі для кожного конкретного випадку слід записувати в координатах нової системи координат.

Розглянемо, для прикладу, випадок, коли вектор дифракції $\mathbf{H} = [100]$, а вектор Бюргерса петлі $\mathbf{b} = [110]$ (рис. 2). Координати одиничних векторів в системі координат xOy будуть наступними:

$$\mathbf{H}^0 = [100], \quad \mathbf{b}^0 = \left[\frac{\sqrt{2}}{2} \quad \frac{\sqrt{2}}{2} \quad 0 \right].$$

У випадку $t=1$ вектор \mathbf{H}^0 , а отже і всі інші вектори в системі координат повертаються довкола осі y на кут $-q$.

Матриця повороту матиме вигляд:

$$M_1 = \begin{pmatrix} \cos(-q) & 0 & \sin(-q) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(-q) & 0 & \cos(-q) \end{pmatrix} \quad (22)$$

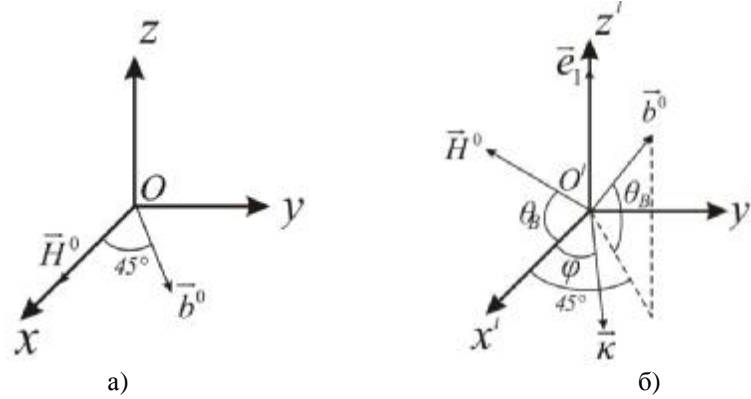


Рис. 2. Схематичне зображення взаємного розміщення вектора дифракції \vec{H} [відбивання (100)], вектора Бюргерса $\vec{b} = [110]$ та одиничного вектора \vec{k} в системах координат xOz (а) та x'O'z' (б).

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

$$\vec{r}_{b_1^0} = \left[\frac{\sqrt{2}}{2} \cos q \quad \frac{\sqrt{2}}{2} \quad \frac{\sqrt{2}}{2} \sin q \right].$$

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

Матриця повороту матиме вигляд:

$$M_2 = \begin{pmatrix} \cos(q) & 0 & \sin(q) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(q) & 0 & \cos(q) \end{pmatrix} \quad (23)$$

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

$$\vec{r}_{b_2^0} = \left[\frac{\sqrt{2}}{2} \cos q \quad 0 \quad -\frac{\sqrt{2}}{2} \sin q \right].$$

Аналогічно здійснюємо обчислення для інших орієнтацій вектора дифракції \vec{H} та вектора

Бюргерса петлі \vec{b} .

З допомогою математичного пакету Maple було отримано значення коефіцієнта $D(\vec{H}^0, \vec{b}_i^0)$ для відбивань (444), (888) та (880). При цьому розглядалися дислокаційні петлі з векторами Бюргерса $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ та $\langle 111 \rangle$. Коефіцієнт Пуассона ν вважався рівним 0,33.

Результати обчислень представлені в табл. 1-3. Як бачимо, значення коефіцієнта $D(\vec{H}^0, \vec{b}_i^0)$, а отже,

і коефіцієнта екстинкції m_k , залежить від орієнтації вектора Бюргерса петлі \vec{b} і в більшості випадків відрізняється від середнього значення для відповідного набору петель. Тому врахування анізотропії в орієнтації радіаційно зумовлених дислокаційних петель є важливим для більш точного визначення характеристик дефектної підсистеми кристалу методами X-променевої дифрактометрії.

Таблиця 1

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

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

Таблиця 2

Значення коефіцієнта $D(\vec{H}^0, \vec{b}_i^0)$ для дислокаційних петель з векторами Бюргерса типу $\langle 110 \rangle$

та відбивань (444), (888), (880)

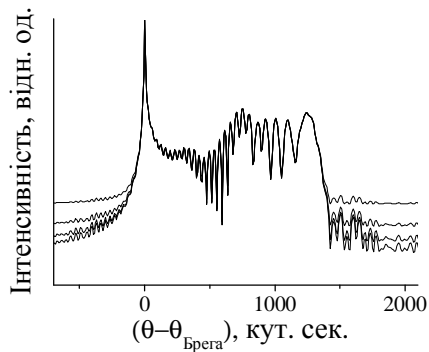
$\frac{\mathbf{H}}{b}$	[110]	$[\bar{1}\bar{1}]$	$[1\bar{1}]$	$[\bar{1}\bar{1}]$	[10]	$[\bar{1}\bar{0}]$	[10]	$[\bar{1}\bar{0}]$	[01]	$[0\bar{1}]$	[01]	$[0\bar{1}]$	Сер. знач.
[444]	0,5 72	0,0 62	0,0 62	0,5 72	0,6 98	0,0 41	0,0 41	0,6 98	0,6 98	0,0 41	0,0 41	0,6 98	0,3 52
[888]	0,4 13	0,0 20	0,0 20	0,4 13	0,5 97	0,0 28	0,0 28	0,5 97	0,5 97	0,0 28	0,0 28	0,5 97	0,2 80
[880]	0,9 47	0,0 39	0,0 39	0,9 47	0,1 91	0,1 91	0,1 91	0,1 91	0,1 91	0,1 91	0,1 91	0,1 91	0,2 91

Таблиця 3

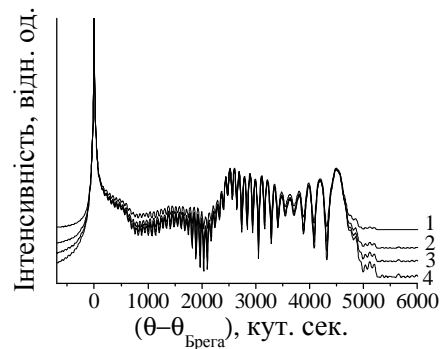
Значення коефіцієнта $D(\mathbf{H}^0, \mathbf{b}_i^0)$ для дислокаційних петель з векторами Бюргера типу $\langle 111 \rangle$

та відбивань (444), (888), (880)

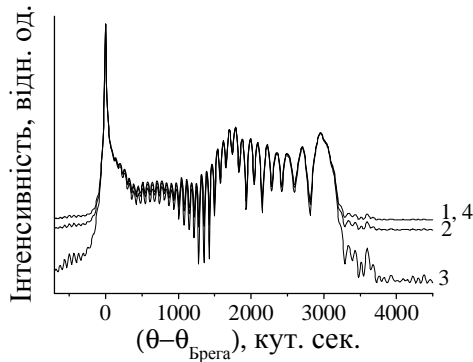
$\frac{\mathbf{H}}{b}$	[111]	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	$[1\bar{1}\bar{1}]$	$[1\bar{1}\bar{1}]$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	$[1\bar{1}\bar{1}]$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	Сер. знач.
[444]	1,055	0,154	0,154	0,085	0,085	0,154	0,154	1,055	0,362
[888]	0,626	0,166	0,166	0,088	0,088	0,166	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



а)



б)



в)

Рис. 3. Теоретичні КДВ (а – (444), б – (888), в – (880)) в припущенні наявності в кристалі радіаційно зумовлених дислокаційних петель: 1 – у площинах (111); 2 – в усіх площинах виду $\{111\}$; 3 – у площинах $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$; 4 – у площинах $(1\bar{1}\bar{1})$.

Моделювання теоретичних КДВ засобами узагальненої динамічної теорії з врахуванням ефектів

анізотропії

Для оцінки впливу анізотропії в орієнтації радіаційно зумовлених дислокаційних петель на вигляд КДВ було розраховано відповідні теоретичні криві для відбивань (444), (888) та (880) від монокристалів галій гадолінієвого гранату, імплантованих іонами He^+ . При цьому було розглянуто 4 випадки: а) наявність дислокаційних петель у всіх площинах типу $\{111\}$; б) наявність дислокаційних петель тільки в площинах (111); в) наявність дислокаційних петель тільки в площинах $(\bar{1}11)$; г) наявність дислокаційних петель тільки в площинах $(11\bar{1})$. Вектор Бюргерса дислокаційної петлі, як і в [8], вважався рівним $b = a\sqrt{3}/2$.

Зважаючи на те, що розподіл згенерованих при іонній імплантації радіаційних дефектів є сильно неоднорідним, при моделюванні концентрація та радіус дефектів у приповерхневому порушеному шарі задавалися пропорційними профілю відносної деформації. Виходячи з такого задання, найбільш чутливою до дефектів є область останньої осциляції додаткової осциляційної структури, а дифузне розсіяння від порушеного шару найбільше впливає на область КДВ за додатковою осциляційною структурою.

Змодельовані теоретичні КДВ для профілю деформації, який відповідає імплантації іонами He^+ з енергією 100 кеВ та дозою $4 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ [9] представлені на рис. 3, а-в.

Отже, як бачимо, значення коефіцієнта екстинкції найбільше впливає на інтенсивність КДВ за межами додаткової осциляційної структури. При цьому різниця інтенсивностей для різних значень коефіцієнта екстинкції суттєво переважає експериментальну похибку і чітко фіксується засобами високороздільної Х-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 та циліндричних чи дископодібних кластерів, крім концентрації та радіуса, вагоме значення має ще й їх просторова орієнтація. В даній роботі вказана орієнтація була врахована при обчисленні коефіцієнта екстинкції для набору векторів Бюргерса петель \vec{b} при різних відбиваннях. Необхідність врахування анізотропних ефектів в іонно-імплантованих підшарах підтверджується теоретичними КДВ для відбивань (444), (888) та (880), змодельованими для випадків наявності в кристалі петель, орієнтованих в певних площинах. Інтенсивність таких КДВ значно відрізняється від інтенсивності КДВ, змодельованих в припущенні, що радіаційно зумовлені дислокаційні петлі зустрічаються у всіх площинах відповідного сімейства з однаковою імовірністю.

Остафійчук Б.К. – д.ф.-м.н., проф., член-кор. НАН України, завідувач кафедри матеріалознавства і новітніх технологій;

Яремій І.П. – к.ф.-м.н., доцент кафедри матеріалознавства і новітніх технологій;

Томин У.О. – аспірант кафедри матеріалознавства і новітніх технологій;

Яремій С.І. – к.ф.-м.н., провідний фахівець навчально-наукового центру діагностики матеріалів.

- [1] P.D. Townsend, P.J. Chandler, L. Zhang. Optical effects of ion implantation (Cambridge University Press, Cambridge, 1994).
- [2] Feng Qiu. Application of ion implantation to fabricate optical waveguides: Thesis of Dissertation (Kochi University publishing, 2011).
- [3] S.J. Olihov's'kij, С.М. Kislovs'kij, V.B. Molodkin та in.. Metallofiz. novejshe tehno. 22(6), 3-19 (2000).
- [4] V.B. Molodkin, E.A. Tihonova. FMM 24(3), 385 (1967).
- [5] P.H. Dederics. Physical review B 1(4), 1306 (1970).
- [6] V.B. Molodkin, A.P. Shpak, M.V. Koval'chuk i dr. UFN 181(7), 68 (2011).
- [7] L.I. Dacenko, V.B. Molodkin, M.E. Osinovskij. Dinamicheskoe rassejanie rentgenovskih luchej real'nymi kristallami (Naukova dumka, Kiev, 1988).
- [8] V.M. Pilipiv, S.J. Olihov's'kij, T.P. Vladimirova та in.. Metallofiz. novejshe tehno. 33(9), 1147 (2011).
- [9] B.K. Ostafijchuk, V.D. Fedoriv, V.I. Kravec i dr. Metallofiz. novejshe tehno. 17(2), 67 (1995).

B. K. Ostafiychuk, I. P. Yaremiy, U. O. Tomyn, S. I. Yaremiy

Impact of Anisotropy in Orientation of Radiation Defects on the Value of X-Rays Absorption

*Vasyl Stefanyk Precarpathian National University,
57, Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine, e-mail: ulyatomyn@gmail.com*

Anisotropy of the radiation-caused dislocation loops orientation was considered at calculation of X-rays absorption. The coefficient $D(\vec{H}^0, \vec{b}_i^0)$ depending on the relative spatial orientation of the Burgers vector of the loop \vec{b} and the diffraction vector \vec{H} for a set of loops at different reflection was calculated. Theoretical rocking curves were modeled taking into account mentioned above anisotropy. And it was shown that their intensity outside the additional oscillating structure is 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, extinction coefficient, dislocation loop, Burgers vector.