

---

---

**ДИФРАКЦИЯ И РАССЕЯНИЕ  
ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ**

---

---

УДК 548.73

**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ  
ТРЕХКРИСТАЛЬНОЙ СХЕМЫ ВЫСОКОРАЗРЕШАЮЩЕЙ  
РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ В МЕТОДЕ КАРТИРОВАНИЯ  
ОБРАТНОГО ПРОСТРАНСТВА**

© 2019 г. А. Ю. Серегин<sup>1,2</sup>, П. А. Просеков<sup>1,2,\*</sup>, Ф. Н. Чуховский<sup>1</sup>, Ю. А. Волковский<sup>1,2</sup>,  
А. Е. Благов<sup>1,2</sup>, М. В. Ковальчук<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup> *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН, Москва, Россия*

<sup>2</sup> *Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, Россия*

<sup>3</sup> *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

\* E-mail: p.prosekov@gmail.com

Поступила в редакцию 15.11.2018 г.

После доработки 29.12.2018 г.

Принята к публикации 20.01.2019 г.

Представлены результаты экспериментального и теоретического исследования трехкристалльной схемы высокоразрешающей дифрактометрии методом картирования обратного пространства (КОП). Описана процедура расчета спектрально-угловых аппаратных функций дифрактометра для учета влияния зеркала, монохроматора, анализатора и щелей на распределение интенсивности вблизи узла обратной решетки. На примере образца совершенного монокристалла Si (110) показано хорошее совпадение расчетных и экспериментальных сечений КОП.

**DOI:** 10.1134/S0023476119040180

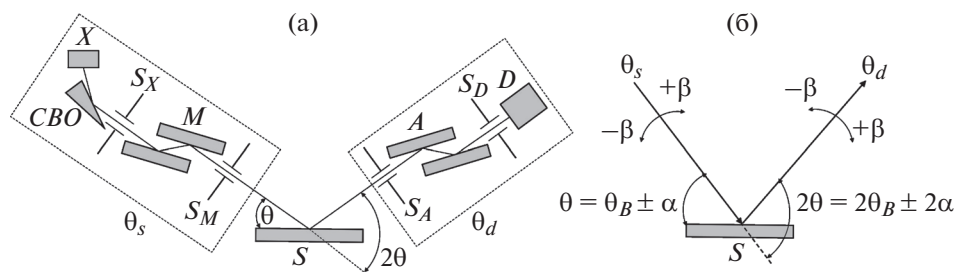
## ВВЕДЕНИЕ

Рентгеновская высокоразрешающая двух- и трехкристалльная дифрактометрия — широко используемые прецизионные методы определения структурных параметров в упорядоченных и квазиупорядоченных средах [1, 2]. Особый интерес при таких исследованиях представляет картирование обратного пространства (КОП) — анализ картины распределения суперпозиции интенсивностей дифрагированного когерентного и некогерентного рассеяния вблизи узла обратной решетки. В частности, интенсивность некогерентного (диффузного) рассеяния можно однозначно связать с дефектной структурой кристаллического образца. Это позволяет получить важную информацию о наличии в образце статических точечных и линейных дефектов кристаллической решетки или определить несоответствие параметров решеток при наличии двойников, вариации состава, а также разориентации и неупругой релаксации тонких слоев в случае многослойных кристаллических структур [3–5]. Так, в [6, 7] на примере исследования структуры нарушенного имплантированного слоя предложен подход и описана процедура разделения вкладов когерентной и некогерентной (диффузной) составляющих

рентгеновского рассеяния вблизи узла обратной решетки (метод КОП).

При строгом анализе и количественной интерпретации данных высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии важное значение имеет правильный учет аппаратной функции использованной рентгенооптической схемы [8–10]. Соответственно в случае теоретических КОП используются различные подходы для описания аппаратной функции. Один из наиболее распространенных подходов основан на представлении аппаратной функции рентгеновского высокоразрешающего дифрактометра в виде свертки аналитических (и/или заданных в численной форме) функций, характеризующих с различной степенью детальности элементы рентгенооптической схемы (щели, зеркала, детекторы), а также характеристики падающего рентгеновского излучения, его спектрально-угловую неоднородность [11–13].

Другое направление по моделированию аппаратной функции связано с трассировкой рентгеновских лучей [14, 15]. Данный подход позволяет наиболее полно учесть специфику различных оптических систем, но требует привлечения значительных вычислительных мощностей. Наиболее часто этот подход применяется для расчета и анализа оптических схем синхротронных станций.



**Рис. 1.** Метод регистрации карт обратного пространства (КОП): а – трехкристальная дифракционная схема:  $X$  – рентгеновская трубка,  $CBO$  – зеркало Гебеля,  $S_X$  – щель после зеркала,  $M$  – двукратный монохроматор,  $S_M$  – щель перед образцом,  $S$  – образец,  $A$  – двукратный анализатор,  $D$  – детектор,  $S_A$  и  $S_D$  – приемные щели анализатора и детектора соответственно,  $\theta_s$  и  $\theta_d$  – оси гониометра, задающие угловое положение источника и детектора относительно поверхности образца; б – движение осей гониометра для регистрации КОП: отстройка осей источника ( $\theta_s$ ) и детектора ( $\theta_d$ ) от угла Брэгга ( $\theta_B$ ) образца ( $S$ ) на угол  $\alpha$ , так что  $\theta = \theta_B + \alpha$ ,  $2\theta = 2\theta_B + 2\alpha$ ; согласованное (угол между ними остается неизменным) сканирование источником и детектором относительно своего текущего положения в диапазоне углов  $\pm\beta$ , так что  $\theta = \theta_B + \alpha + \beta$ ,  $2\theta = 2\theta_B + 2\alpha$ .

В настоящей работе представлено исследование аппаратной функции лабораторного трехкристального рентгеновского дифрактометра и учет ее влияния на распределение интенсивности вблизи узла обратной решетки.

## МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

**Исследуемый образец.** В качестве модельного образца использовалась пластина совершенного монокристалла Si, применяемого в рентгеновской дифрактометрии в качестве кристалла-монохроматора. Обработка поверхности пластины проведена путем поэтапной химико-механической полировки. Ориентация пластины Si выведена параллельно плоскостям (110), что позволило использовать в эксперименте симметричное отражение 220 в геометрии Брэгга.

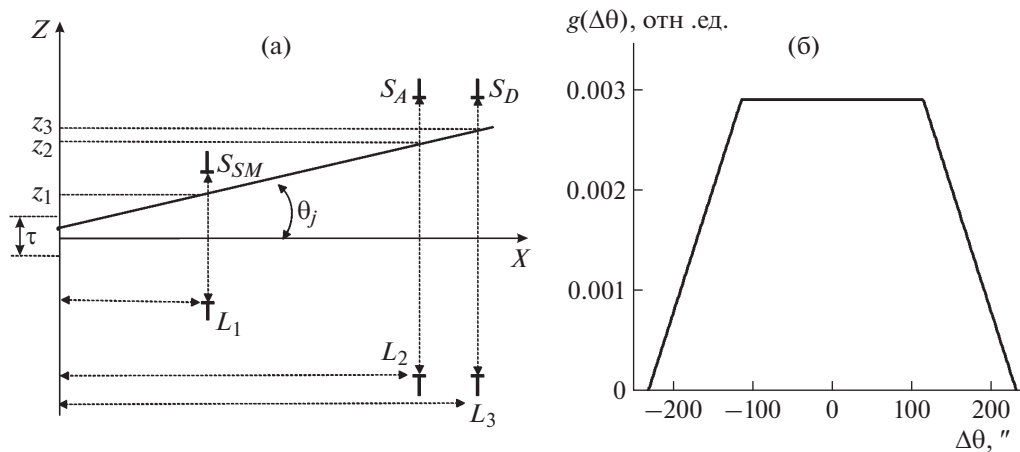
Независимо проводились измерения образцов Si методом двухкристальной высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии в симметричной бездисперсионной (+ $n$ , – $n$ )-схеме в геометрии Брэгга с использованием установки ТРС-К [16]. Получены кривые дифракционного отражения полушириной 3.2", что соответствует расчетному значению с точностью 3.5% (для  $\sigma$ -поляризации). Описанным способом проводился анализ серии образцов Si и был выбран образец для экспериментов методом КОП, наиболее близко соответствующий теоретическим представлениям.

**Метод регистрации карты обратного пространства.** Эксперимент методом КОП проводился на дифрактометре SmartLab Rigaku. Схема эксперимента (рис. 1а) представляла собой трехкристальную (трехосевую) (+ $n$ , – $m$ , + $n$ )-схему рентгеновской дифрактометрии. Источник излучения ( $X$ ) – трубка с вращающимся Си-анодом (размер фокуса  $0.4 \times 8.0$  мм<sup>2</sup>). Излучение из труб-

ки попадало на зеркало Гебеля ( $CBO$ ) – многослойную гетероструктуру на параболически изогнутой подложке, превращающую расходящийся пучок в квазимонохроматический, параллельный с углом расходимости  $0.05^\circ$ . После зеркала пучок проходил через щель  $S_X$  и коллимировался двукратным симметричным Ge (220) монохроматором ( $M$ ). Падающий на образец пучок ограничивался в плоскости дифракции щелью  $S_M$ ; в направлении, перпендикулярном плоскости дифракции, размер пучка составлял 5 мм. После образца устанавливался двукратный симметричный Ge (220) анализатор ( $A$ ). Интенсивность дифрагированного излучения регистрировалась сцинтилляционным детектором ( $D$ ), перед анализатором и детектором устанавливались приемные щели  $S_A$  и  $S_D$ .

Дифрактометр оборудован гониометром, работающим в схеме  $\theta$ - $\theta$ . В процессе угловых сканирований образец остается неподвижным. Изменение угла падения пучка на образец осуществляется путем наклона плеча гониометра (угловая ось  $\theta_s$ ), на котором закреплены рентгеновская трубка, зеркало Гебеля, монохроматор и щели, формирующие падающий пучок. Изменение угла детектирования осуществляется путем наклона плеча детектора гониометра (угловая ось  $\theta_d$ ), на котором закреплены приемные щели, анализатор и детектор (рис. 1б).

Рассмотрим методику регистрации КОП. В начальном положении, после настройки схемы на угол Брэгга ( $\theta_B$ ) выбранного отражения образца, для симметричного отражения угол падения пучка на образец  $\theta = \theta_s = \theta_B$ , угол отражения  $2\theta = \theta_s + \theta_d = 2\theta_B$ ,  $\theta_s = \theta_d = \theta_B$ . Здесь и далее  $\theta$  – угол падения пучка на образец, задаваемый наклоном оси источника,  $2\theta$  – угол между осями источника и детектора. При отстройке угла падения от  $\theta_B$  на некий угол  $\alpha$  направления лучей и соот-



**Рис. 2.** Аппаратная функция щелей: а – схема расположения щелей; б – расчетное угловое распределение пучка для трехкристалльной схемы. Размер фокуса источника  $\tau = 0.4$  мм. Размер щели перед образцом  $S_M = 3$  мм, расстояние от источника до щели  $L_1 = 160$  мм, размер щелей перед анализатором и детектором  $S_A = S_D = 3$  мм,  $L_2 = 487$  мм (расстояние от источника до щели  $S_A$ ),  $L_3 = 600$  мм (расстояние от источника до щели  $S_D$ ).

ответственно положения источника и детектора изменятся таким образом, что  $\theta = \theta_B + \alpha$ ,  $2\theta = 2\theta_B + 2\alpha$  (рис. 16). Далее для текущего значения угла  $\alpha$  согласованным движением осей источника и детектора проводится  $\omega$ -сканирование по углу  $\beta$  (изменение угла падения пучка на образец при неизменном угле  $2\theta$ , так что  $\theta = \theta_B + \alpha + \beta$ ,  $2\theta = 2\theta_B + 2\alpha$ ). Таким образом, регистрация КОП реализуется серией последовательных сканирований по углу  $\beta$  ( $\omega$ -сканирование) для набора значений углов  $\alpha$  ( $\theta/2\theta$ -сканирование) [2, 17].

### АППАРАТНАЯ ФУНКЦИЯ

*Аппаратная функция спектрального распределения рентгеновской трубки.* В общем виде функцию спектрального распределения для рентгеновской трубки можно представить в виде суперпозиции линий  $K_{\alpha 1}$  и  $K_{\alpha 2}$  в виде [18]:

$$g(\lambda) = \frac{2}{3\pi} \left\{ \frac{\delta\lambda_1}{(\lambda - \lambda_1)^2 + (\delta\lambda_1)^2} + 0.5 \frac{\delta\lambda_2}{(\lambda - \lambda_2)^2 + (\delta\lambda_2)^2} \right\}, \quad (1)$$

где  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  длины волн линий  $K_{\alpha 1}$  и  $K_{\alpha 2}$ ,  $\frac{\delta\lambda_1}{\lambda_1} \approx \frac{\delta\lambda_2}{\lambda_2} = 3 \times 10^{-4}$

*Влияние щелей на аппаратную функцию углового распределения.* Расчет влияния размеров щелей на аппаратную функцию углового распределения пучка проводился для следующей схемы расположения щелей дифрактометра: щель перед образ-

цом, щель перед анализатором, щель перед детектором. Так как при формировании параллельного пучка излучение из рентгеновской трубки сначала попадает на зеркало, то распределение интенсивности в пределах фокуса источника можно считать постоянным и рассматривать источник в виде прямоугольной функции, характеризуемой шириной  $\tau$  и определяемой размером щели после зеркала. Величины вертикальных апертур щелей перед образцом, анализатором и детектором заданы как  $S_M$ ,  $S_A$  и  $S_D$  соответственно. Расстояния от источника до щелей перед образцом, анализатором и детектором –  $L_1$ ,  $L_2$  и  $L_3$  соответственно. Проведем вдоль вертикальной проекции фокуса источника ось ординат, а через середину апертур щелей ось абсцисс (рис. 2а). Проведем разбивание фокуса источника на массив точек, каждая из которых задается координатой  $\tau_i$  в пределах  $[-\tau/2, \tau/2]$ . Луч, испускаемый этой точкой под произвольным углом  $\theta_j$ , пересекает плоскости щелей  $S_M$ ,  $S_A$  и  $S_D$  в точках с вертикальными координатами  $z_1$ ,  $z_2$  и  $z_3$ .

Значения  $z_1$ ,  $z_2$  и  $z_3$  определяются из выражений

$$\begin{aligned} z_1(\tau_i, \theta_j) &= \tau_i + L_1 \operatorname{tg} \theta_j, \\ z_2(\tau_i, \theta_j) &= \tau_i + L_2 \operatorname{tg} \theta_j, \\ z_3(\tau_i, \theta_j) &= \tau_i + L_3 \operatorname{tg} \theta_j. \end{aligned} \quad (2)$$

Если луч проходит в апертуру щелей, то его вклад считается единичным, если вне апертуры щелей – нулевым. Условием попадания луча в детектор является его прохождение через апертуры всех щелей:

$$D(\tau_i, \theta_j) = \begin{cases} 1, & \frac{-S_{SM}}{2} < z_1 < \frac{S_{SM}}{2}, \\ \frac{-S_A}{2} < z_2 < \frac{S_A}{2}, & \frac{-S_D}{2} < z_3 < \frac{S_D}{2}; \\ 0, & z_1 > \frac{-S_{SM}}{2}, \quad z_1 > \frac{S_{SM}}{2}, \\ z_2 > \frac{-S_A}{2}, \quad z_2 > \frac{S_A}{2}, \\ z_3 > \frac{-S_D}{2}, \quad z_3 > \frac{S_D}{2}, \end{cases} \quad (3)$$

где  $z_1, z_2$  и  $z_3$  определяются выражениями (2).

Таким образом, функцию углового распределения пучка  $g(\theta)$  можно задать выражением

$$g(\theta) = \frac{1}{\int d(\theta)g(\theta)} \int_{-\tau/2}^{+\tau/2} d(\sigma) \int d(\theta) D(\tau, \theta), \quad (4)$$

где  $D(\tau, \theta)$  определяет условие прохождения лучом щелей согласно (3).

На рис. 2б приведена рассчитанная по формуле (4) методом численного интегрирования аппаратная функция углового распределения.

### МОДЕЛИРОВАНИЕ КАРТ ОБРАТНОГО ПРОСТРАНСТВА

Интенсивность карты рассеяния в трехкристалльной схеме (с двухкристалльным монохроматором и анализатором) определяется выражением

$$I(\alpha, \beta) = \int d(\lambda) \int d(\Delta\theta) g(\lambda) g_0(\Delta\theta) \times \\ \times P_M^2 \left( \Delta\theta - \frac{\lambda - \lambda_1}{\lambda_1} \text{tg}(\theta_B^M) \right) \times \\ \times P_S \left( \Delta\theta + \alpha + \beta - \frac{\lambda - \lambda_1}{\lambda_1} \text{tg}(\theta_B^S) \right) \times \\ \times P_A^2 \left( \Delta\theta + 2\beta - \frac{\lambda - \lambda_1}{\lambda_1} \text{tg}(\theta_B^A) \right), \quad (5)$$

где  $\alpha$  и  $\beta$  – отстройки от угла Брэгга образца при  $\theta/2\theta$ - и  $\omega$ -сканировании,  $g(\lambda)$  – аппаратная функция спектрального распределения, определяемая выражением (1),  $g_0(\Delta\theta)$  – аппаратная функция углового распределения (4),  $\lambda_1$  – длина волны, соответствующая углу Брэгга,  $P_M, P_S, P_A$  – коэффициенты дифракционного отражения от монохроматора, образца и анализатора,  $\theta_B^M, \theta_B^S, \theta_B^A$  – углы Брэгга для монохроматора, образца и анализатора.

*Расчет коэффициентов дифракционного отражения.* Угловую зависимость коэффициента ди-

фракционного отражения для идеального полу-бесконечного кристалла можно представить в виде

$$P(\nu) = \left| \frac{\gamma_h |2\gamma_0 \epsilon(\nu) - \chi_0|}{\gamma_0 C \chi_{-h}} \right|^2, \quad (6)$$

где  $\gamma_0$  и  $\gamma_h$  – направляющие косинусы, определяемые как

$$\begin{aligned} \gamma_0 &= \cos(\mathbf{n}, \mathbf{k}_0), \\ \gamma_h &= \cos(\mathbf{n}, \mathbf{k}_h), \end{aligned} \quad (7)$$

где  $\mathbf{k}_0$  и  $\mathbf{k}_h$  – волновые векторы падающей и дифрагированной волн соответственно,  $\mathbf{n}$  – нормаль к поверхности,  $C$  – поляризационный множитель ( $C = 1$  для  $\sigma$ -поляризации,  $C = \cos 2\theta_B$  для  $\pi$ -поляризации),  $\chi_0, \chi_h, \chi_{-h}$  – фурье-компоненты поляризуемости кристалла для падающей и дифрагированной волн,  $\epsilon(\nu)$  – корень дисперсионного уравнения для геометрии Брэгга, определяемый выражением

$$\begin{aligned} \epsilon(\nu) &= \frac{1}{4\gamma_0} (\chi_0 - 2\Delta\nu \sin(\theta_B)) \pm \\ &\pm \sqrt{(2\chi_0 + 2\Delta\nu \sin(\theta_B))^2 - 4C\chi_0\chi_{-h}} \end{aligned} \quad (8)$$

Знак в выражении (8) выбирается так, чтобы мнимая часть  $\epsilon(\nu)$  была положительной.

*Численное интегрирование.* Для численного расчета двойного интеграла по переменным  $\lambda$  и  $\Delta\theta$  в формуле (5) применялся метод Симпсона [19]. Диапазоны интегрирования определялись аппаратными функциями спектрального и углового распределения. Шаг интегрирования по переменной  $\lambda$  составлял  $1.5 \times 10^{-5}$  нм, по переменной  $\Delta\theta$  – 1".

*Учет поляризации.* Излучение рентгеновской трубки предполагалось неполяризованным, при расчете учитывалось наличие  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризованных компонент. Итоговая интенсивность определялась выражением

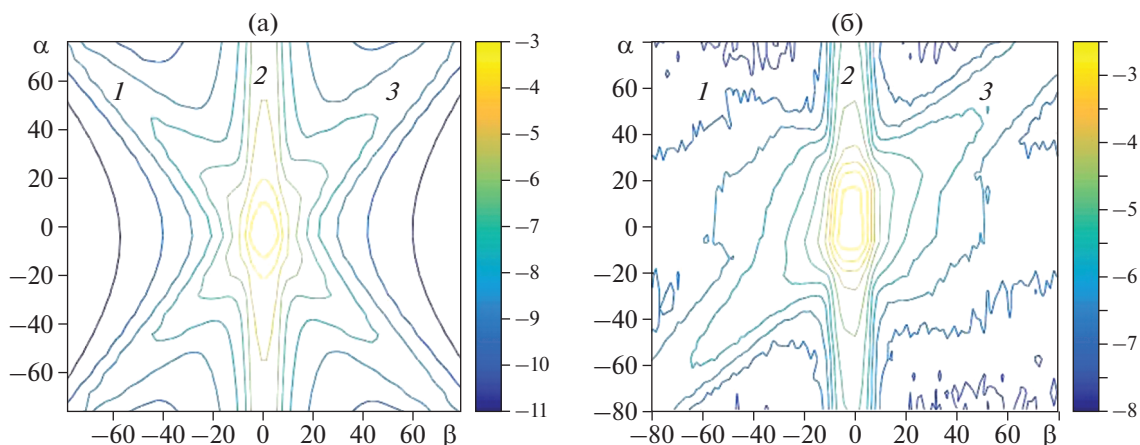
$$I(\alpha, \beta) = \frac{I(\alpha, \beta)_\sigma + I(\alpha, \beta)_\pi}{2}, \quad (9)$$

где  $I(\alpha, \beta)_\sigma$  и  $I(\alpha, \beta)_\pi$  – рассчитанные по формуле (1) интенсивности карт рассеяния для  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризаций.

### РАСЧЕТ КОП И СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

На рис. 3 представлена расчетная и экспериментальная КОП для случая: линия  $\text{Cu}K_{\alpha 1}$  ( $\lambda = 0.154056$  нм), двухкристалльный монохроматор и анализатор – материал Ge, отражение 220, образец – материал Si, отражение 220.

Расчитанная КОП с учетом спектрально-угловых аппаратных функций дифрактометра пред-



**Рис. 3.** Расчетная (а) и экспериментальная (б) КОП для образца Si вблизи узла обратной решетки 220. Построение показано в угловых отстройках  $\beta$ ,  $\alpha$  от точного брэгговского положения; 1 и 3 – полосы псевдопиков анализатора и монокроматора соответственно, 2 – полоса главного пика.

ставлена на рис. 3а. Значения фурье-компонент поляризуемости для Ge (220) и Si (220) взяты из [20]. При расчете шаг по оси  $\alpha$  составлял  $7.2''$ , шаг по оси  $\beta$  –  $1.44''$ . Цифрами 1, 2, 3 отмечены полосы отражений анализатора, образца и монокроматора соответственно. Полоса 1 возникает вследствие наличия на анализаторе угловой расходимости в плоскости дифракции падающего на анализатор пучка. Полосы 2 и 3 появляются в результате спектральной расходимости падающего на образец и монокроматор пучка, а продольное сечение полосы 2 представляет собой кривую дифракционного отражения образца. На рис. 3б представлена экспериментальная КОП. В эксперименте шаг по оси  $\alpha$  составлял  $7.2''$ , шаг по оси  $\beta$  –  $1.44''$ .

Проведено сравнение экспериментальных и расчетных сечений карты рассеяния в трехкристальной схеме вдоль линий анализатора (рис. 4а), монокроматора (рис. 4б) и главного пика (рис. 4в). Экспериментальные данные нормировались на значение интенсивности пучка, измеренное без монокроматора, анализатора и образца при детекторе, выставленном на прямой пучок. Уровень шума определялся как усредненное значение нормированной экспериментальной интенсивности вдали от линий анализатора, монокроматора и главного пика и составлял  $2.7 \times 10^{-8}$ .

При наложении кривых экспериментальные данные сдвинуты по угловой шкале на одну угловую секунду. Экспериментальное и расчетное сечения главного пика показывают хорошее согласие. Наблюдается несоответствие характера убывания интенсивности между расчетными и экспериментальными сечениями вдоль линий анализатора и монокроматора, что, по мнению авторов, может быть обусловлено влиянием диффузного рассея-

ния. Так как интенсивность на хвостах главного пика на несколько порядков превышает интенсивность для псевдопиков анализатора и монокроматора, то диффузное рассеяние не оказывает на линию главного пика заметного влияния.

Для определения закона убывания интенсивности на хвостах сечений КОП проведена аппроксимация хвостов сечений степенной функцией вида

$$F(\vartheta) = G(\vartheta)^{-m}, \quad (10)$$

где  $G$  – амплитуда,  $\vartheta$  – угол вдоль сечения,  $m$  – показатель степени.

Поиск параметров степенной функции ( $G$ ,  $m$ ) для наилучшего описания хвоста сечения КОП проводился путем поиска минимума функционала, описывающего расхождение между хвостом сечения и степенной функцией.

Для расчетных хвостов сечения КОП:

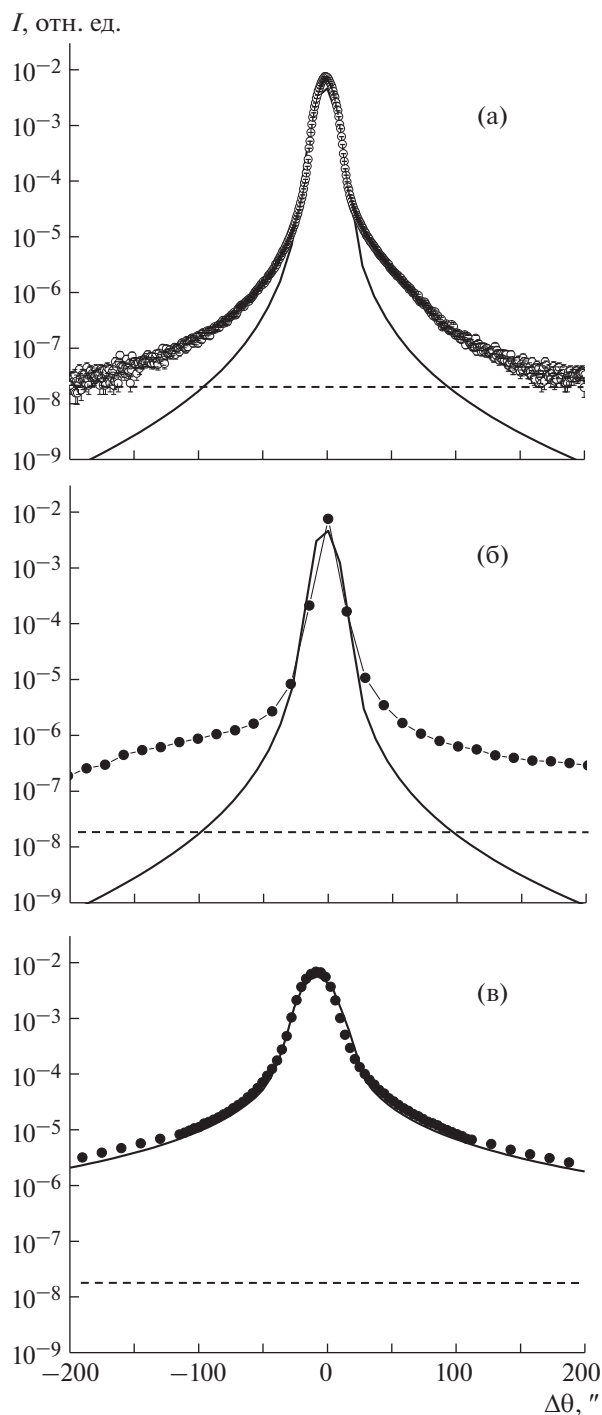
$$\chi^2 = \frac{1}{n-2} \sum_{j=1}^n \frac{(I_{\text{calc}}(\vartheta_j) - F(\vartheta_j))^2}{1}, \quad (11)$$

где  $n$  – число точек на хвосте сечения,  $I_{\text{calc}}(\vartheta_j)$  – расчетные значения сечений,  $F(\vartheta_j)$  – значения степенной функции.

Для экспериментальных хвостов сечения КОП:

$$\chi^2 = \frac{1}{n-2} \sum_{j=1}^n \frac{(I_{\text{exp}}(\vartheta_j) - F(\vartheta_j))^2}{\sigma_{\text{exp}}^2(\vartheta_j)}, \quad (12)$$

где  $I_{\text{exp}}(\vartheta_j)$  – экспериментальные значения сечений,  $\sigma_{\text{exp}}^2(\vartheta_j)$  – погрешности экспериментальных значений сечений.



**Рис. 4.** Сечения КОП для образца Si вблизи узла обратной решетки 220: линии анализатора (а), монохроматора (б) и главного пика (в). Точки – эксперимент, сплошные кривые – расчет. Горизонтальными пунктирными прямыми отмечен уровень шума.

Минимизация выражений (11, 12) проводилась в математической среде MATLAB. Использовалась встроенная функция “lsqnonlin matlab” (минимизации нелинейным методом наименьших квадратов) со следующими параметрами: метод

минимизации – градиентный спуск, расчет матрицы Якоби – численный. Задавались следующие критерии остановки алгоритма минимизации: достижение максимального числа итераций 1000, уменьшение шага изменения градиента ниже значения  $10^{-30}$ .

На рис. 5 приведено наложение хвостов экспериментальных и расчетных сечений КОП и степенной функции. Для расчетных сечений КОП получены следующие значения  $\chi^2$ , амплитуды и показателя степени: сечение вдоль линии анализатора  $\chi^2 = 10^{-21}$ ,  $G = 1.42$ ,  $m = 4.01$ ; сечение вдоль линии монохроматора  $\chi^2 = 10^{-20}$ ,  $G = 1.3$ ,  $m = 3.96$ ; сечение вдоль линии главного пика  $\chi^2 = 10^{-16}$ ,  $G = 0.18$ ,  $m = 2.12$ . Интенсивность на хвосте сечения КОП вдоль линии анализатора (рис. 5а, слева) и монохроматора (рис. 5б, слева) убывает как четвертая степень угла, что соответствует заложенным в расчете условиям дифракции на двухкристалльном монохроматоре и анализаторе. Интенсивность на хвосте сечения КОП вдоль линии главного пика (рис. 5в, слева) убывает как вторая степень угла, что соответствует кривой качания от идеального кристалла.

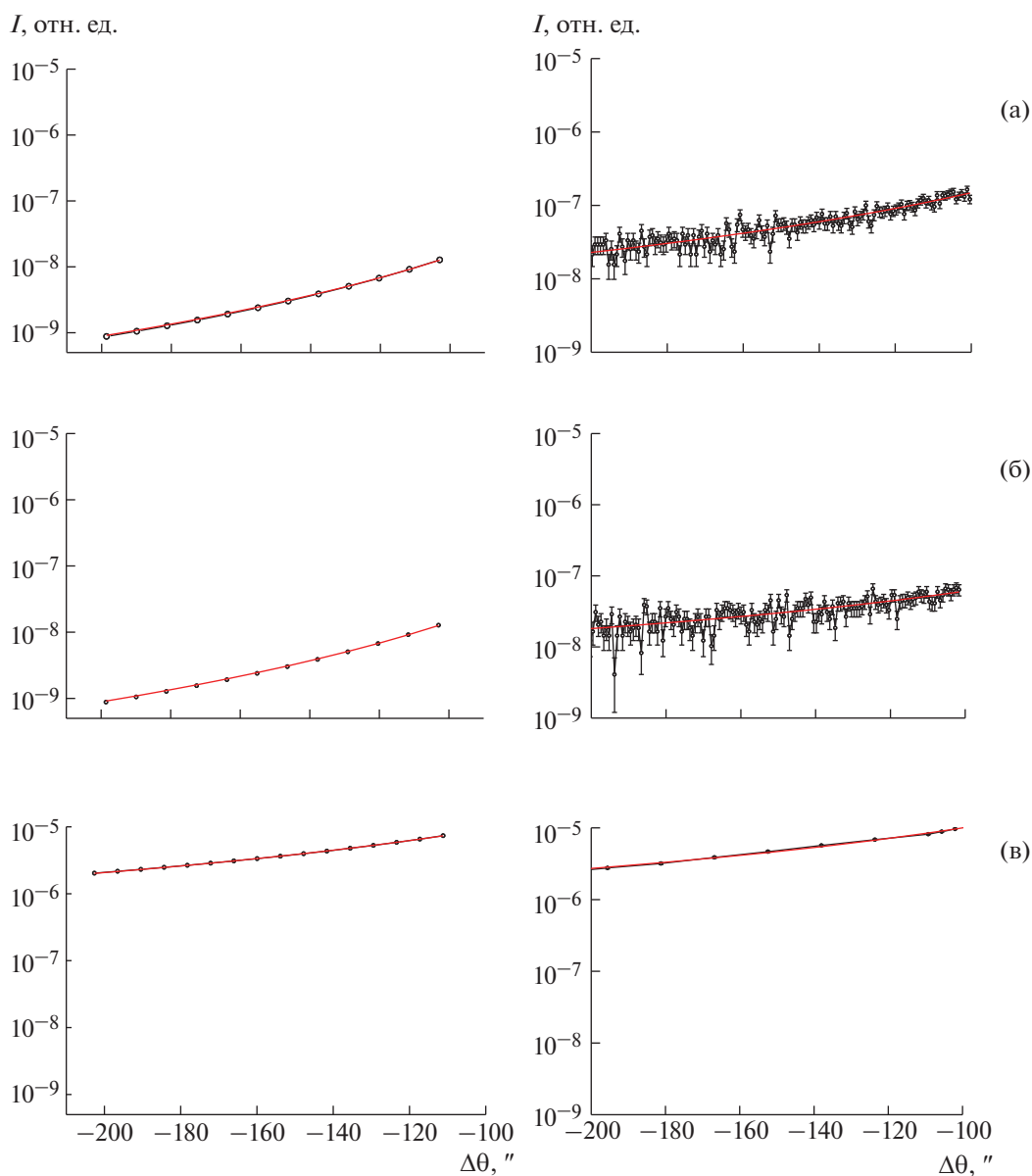
Для экспериментальных сечений КОП получены следующие значения  $\chi^2$ ,  $G$ ,  $m$ : сечение вдоль линии анализатора  $\chi^2 = 1.04$ ,  $G = 0.03$ ,  $m = 2.7$  (рис. 5а, справа); сечение вдоль линии монохроматора  $\chi^2 = 1.4$ ,  $G = 2 \times 10^{-4}$ ,  $m = 1.75$  (рис. 5б, справа); сечение вдоль линии главного пика  $\chi^2 = 2.3$ ,  $G = 0.05$ ,  $m = 1.88$  (рис. 5в, справа).

## ВЫВОДЫ

Проведены экспериментальные и теоретические исследования трехкристалльной схемы высоко разрешающей дифрактометрии методом КОП. Проведен анализ влияния спектрально-угловых функций рентгеновской трубки и щелей на распределение интенсивности. Для описания аппаратной функции применен подход на основе сочетания аналитических (1) и заданных в численной форме функций (4).

Проведено сравнение экспериментальных и расчетных сечений КОП. Получено хорошее совпадение данных в области главного пика. Различия на хвостах сечений псевдопиков анализатора и монохроматора может быть обусловлено влиянием диффузного рассеяния. Дальнейшие исследования и учет вклада диффузного рассеяния позволят разработать более детальный подход для количественного анализа КОП.

Проведенные исследования будут способствовать развитию метода трехкристалльной рентгеновской дифракции в части количественного анализа дефектной структуры кристаллов.



**Рис. 5.** Аппроксимации расчетных (слева) и экспериментальных (справа) хвостов сечений КОП для кристалла Si, отражение 220, вдоль линий анализатора (а), монохроматора (б) и главного пика (в). Точки – расчетные и экспериментальные значения, линии – аппроксимация степенной функцией.

Авторы выражают благодарность Ю.В. Писаревскому за участие в обсуждении полученных результатов и О.А. Кондратьеву за помощь в проведении экспериментов.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты 16-29-14057 офи\_м, 16-32-60120 мол\_а\_дк).

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. *Афанасьев А.М., Ковальчук М.В., Лобанович Э.Ф. и др. // Кристаллография. 1981. Т. 26. Вып. 1. С. 28.*
2. *Holy V., Pietsch U., Baumbach T. High-Resolution X-ray Scattering from Thin Films and Multilayers. Springer, 1999. 253 p.*
3. *Charniy L.A., Morozov A.N., Scherbachov K.D. et al. // J. Cryst. Growth. 1992. V. 116. P. 369.*
4. *Бублик В.Т., Мацнев С.Ю., Щербачев К.Д. и др. // ФТТ. 2003. Т. 45. № 10. С. 1825.*
5. *Lomov A.A., Punegov V.I., Nohavica D. et al. // J. Appl. Cryst. 2014. V. 47. P. 1614.*

6. Щербачев К.Д., Бублик В.Т., Шалимов А. // Изв. вузов. Материалы электронной техники. 2005. № 4. С. 72.
7. Бублик В.Т., Щербачев К.Д., Воронова М.И., Жевнеров Е.В. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исслед. 2010. № 9. С. 89.
8. Kaganer V.M., Jenichen B., Ploog K.H. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2001. V. 34. № 4. P. 645.
9. Чуев М.А., Пашаев Э.М., Квардаков В.В. и др. // Кристаллография. 2015. Т. 60. № 2. С. 194.
10. Mikhalychev A., Benediktovitch A., Ulyanenkova T. et al. // J. Appl. Cryst. 2015. V. 48. № 3. P. 679.
11. Alexander L.E. // J. Appl. Phys. 1954. V. 25. № 2. P. 155.
12. Cheary R.W., Coelho A.A., Cline J.P. // J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol. 2004. V. 109. № 1. P. 1.
13. Zuev A.D. // J. Appl. Cryst. 2006. V. 39. P. 304.
14. Lambert S., Guillet F. // J. Appl. Cryst. 2008. V. 41. P. 153.
15. Lai B., Cerrina F. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 1986. V. 246. № 1–3. P. 337.
16. Ковальчук М.В., Ковьев Э.К., Козелихин Ю.М. и др. // Приборы и техника эксперимента. 1976. № 1. С. 194.
17. Копуа Т. // Rigaku J. 2009. V. 25. № 2. P. 1.
18. Марченков Н.В., Чуховский Ф.Н., Благов А.Е. // Кристаллография. 2015. Т. 60. № 2. С. 194.
19. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. 636 с.
20. <http://x-server.gmca.aps.anl.gov>.