ЖЭТФ, 2018, том 154, вып. 2 (8), стр. 261–277

ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ДИФРАКЦИИ ОГРАНИЧЕННЫХ РЕНТГЕНОВСКИХ ПУЧКОВ: II. ДИФФУЗНОЕ РАССЕЯНИЕ ПОРИСТЫМ КРИСТАЛЛОМ

В. И. Пунегов [*]

Физико-математический институт Коми научного центра
Уральского отделения Российской академии наук
167982, Сыктывкар, Россия

Поступила в редакцию 16 февраля 2018 г.

Разработана теория диффузного рассеяния ограниченных рентгеновских пучков пористым кристаллом. Рассмотрены модели пор цилиндрической, эллипсоидальной формы, а также в виде прямоугольной и треугольной призм. Для этих пор получены выражения собственных корреляционных функций, статических факторов Дебая – Валлера и корреляционных объемов. Исследовано влияние наклона и пространственной корреляции пор на контуры равной интенсивности диффузного рассеяния. Показан эффект флуктуации размера пор на распределение интенсивности рассеяния.

DOI: 10.1134/S0044451018080059

1. ВВЕДЕНИЕ

В первой части работы рассмотрено когерентное рассеяние рентгеновских лучей пористым кристаллом [1] в рамках формализма статистической динамической теории дифракции Като [2]. Подход, предложенный Като, в отличие от кинематической теории Кривоглаза [3], с одной стороны, является весьма трудоемким, с другой стороны, несет более глубокое физическое содержание, поскольку позволяет одновременно исследовать как когерентное, так и диффузное рассеяние. Эти два канала дифракционного рассеяния связаны друг с другом статическим фактором Дебая – Валлера f. Важность всего этого заключается в том, что в экспериментальных измерениях детектор фиксирует полную интенсивность $I_h^t(\mathbf{q}) = I_h^c(\mathbf{q}) + I_h^d(\mathbf{q})$, где $I_h^c(\mathbf{q}) \sim f^2$ — когерентная и $I_h^d(\mathbf{q}) \sim (1 - f^2)$ — диффузная (некогерентная) составляющие рассеянного излучения, $\mathbf{q}$ — вектор в обратном пространстве, зависящий от угловых параметров дифракционной схемы.

Поры в кристалле играют роль дефектов и являются источниками диффузного рассеяния рентгеновских лучей, угловое распределение которого зависит от формы, размеров, пространственной упорядоченности пор, а также их наклона относительно поверхности образца. Следовательно, диффузное рассеяние может служить основой для неразрушающей диагностики внутренней структуры пористых кристаллов. Целью настоящей работы является развитие теории диффузного рассеяния от кристаллической среды с массивом пор разной конфигурации и пространственного распределения.

2. ДИФФУЗНОЕ РАССЕЯНИЕ

В строгой статистической динамической теории дифракции диффузное рассеяние описывается связанными дифференциальными уравнениями для интенсивностей [2, 4]. В общем случае эти уравнения учитывают как влияние когерентных полей на диффузное рассеяние (первичную экстинкцию), так и многократное динамическое рассеяние диффузных волн (вторичную экстинкцию).

Практически всегда при исследовании пористых кристаллов рентгенодифракционными методами используется геометрия Брэгга, наше рассмотрение будет относиться к этому случаю. Ранее было показано, что в брэгговской геометрии при рассмотрении диффузного рассеяния можно пренебречь вторичной экстинкцией [5]. Поэтому выражение для 3D-распределения интенсивности диффузного рассеяния от пористого кристалла можно записать в виде

[*] E-mail: vpunegov@dm.komisc.ru

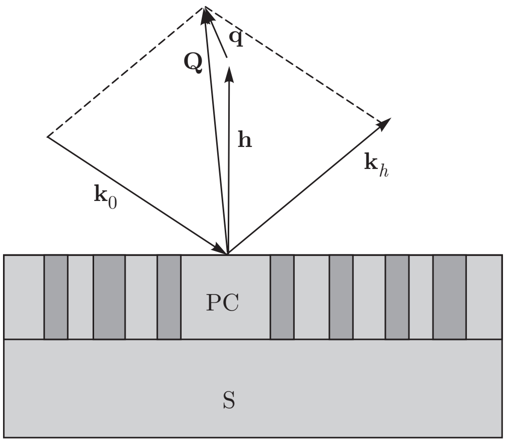

Рис. 1. Схематическое изображение рентгеновской дифракции в обратном пространстве от пористого кристаллического слоя PC на подложке S

$$I_h^d(\mathbf{q}) = \int\limits_{V_0} d\mathbf{r}|a_h|^2(1-f^2)\mathrm{T}(\mathbf{r},\mathbf{q}) \times \\ \times \exp(-2\mu z) I_0^c(\mathbf{r},\mathbf{q}), \quad (1)$$

где $I_0^c(\mathbf{r},\mathbf{q})$ — интенсивность проходящего через пористый кристалл рентгеновского пучка в точке с координатой $\mathbf{r}$, μ — линейный коэффициент поглощения рентгеновских лучей, V_0 — засвеченный рентгеновским пучком объем пористого кристалла, коэффициент a_h характеризует взаимодействие рентгеновского поля с электронной плотностью среды [1]. Основным параметром выражения (1) является корреляционный объем

$$\mathrm{T}(\mathbf{r},\mathbf{q}) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\boldsymbol{\rho} \times \\ \times \exp\left(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{p} + i\mathbf{h}[\langle\mathbf{u}(\mathbf{r}+\boldsymbol{\rho})\rangle - \langle\mathbf{u}(\mathbf{r})\rangle]\right) G(\mathbf{r},\boldsymbol{\rho}), \quad (2)$$

характеризующий угловое распределение интенсивности диффузного рассеяния, где $G(\mathbf{r},\boldsymbol{\rho})$ — обобщенная корреляционная функция, зависящая как от формы пор, так и их пространственного распределения, $\langle\mathbf{u}(\mathbf{r})\rangle$ — усредненная часть поля атомных смещений в пористом кристалле. В обратном пространстве угловое распределение интенсивности рассеяния зависит от вектора $\mathbf{q} = \mathbf{Q} - \mathbf{h}$, характеризующего отклонение вектора рассеяния $\mathbf{Q} = \mathbf{k}_h - \mathbf{k}_0$ от узла вектора обратной решетки $\mathbf{h}$ (рис. 1).

Присутствие коррелятора $\exp(i\mathbf{h}[\langle\mathbf{u}(\mathbf{r}+\boldsymbol{\rho})\rangle - \langle\mathbf{u}(\mathbf{r})\rangle])$ в формуле (2) вызвано крупномасштабными деформациями кристаллической решетки, например, упругим изгибом или деформациями в процессе порообразования.

Известно, что поры в кристалле нарушают трансляционный порядок узлов решетки, тем самым создают случайные локальные смещения $\delta\mathbf{u}(\mathbf{r})$ в периодической структуре материала. Следовательно, поры являются дефектами решетки и в статистической теории дифракции описываются собственной корреляционной функцией [2, 4–8]

$$g(\mathbf{r},\boldsymbol{\rho}) = \frac{\langle\exp(i\mathbf{h}[\delta\mathbf{u}(\mathbf{r}+\boldsymbol{\rho}) - \delta\mathbf{u}(\mathbf{r})])\rangle - f^2}{1-f^2}. \quad (3)$$

Распределение случайных смещений $\delta\mathbf{u}(\mathbf{r})$ определяется размерами и формой пор, а также, в зависимости от выбранной модели, наличием или отсутствием упругих деформаций в окрестности отдельно взятой поры.

Угловое распределение диффузного рассеяния зависит также от взаимного пространственного расположения пор, которое описывается функцией пространственного распределения $W(\mathbf{r},\boldsymbol{\rho})$. Тогда обобщенная корреляционная функция запишется в виде свертки:

$$G(\mathbf{r},\boldsymbol{\rho}) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\boldsymbol{\rho}' W(\mathbf{r},\boldsymbol{\rho}') g(\mathbf{r},\boldsymbol{\rho}'+\boldsymbol{\rho}). \quad (4)$$

Отметим, что пространственная корреляция в расположении пор может быть описана моделями дальнего или ближнего порядка. В случае дальнего порядка имеет место жесткая фиксация равновесных положений всех пор, при этом эти равновесные положения имеют строгий трансляционный порядок, например, в пористом алюминии [9]. Для ближнего порядка значение имеет закон распределения ближайших соседей, при этом отсутствует строгая периодическая фиксация всех соседних пор. В данном случае, если установлен закон распределения для ближайших соседей, то из него можно вывести всю функцию распределения. Ближний порядок может быть описан введением функции радиального распределения [10] либо на основе паракристаллической модели [11–13].

Далее рассмотрим однородный пористый кристалл без крупномасштабных деформаций решетки. В этом случае $G(\mathbf{r},\boldsymbol{\rho}) = G(\boldsymbol{\rho})$ и корреляционный объем представим как фурье-преобразование корреляционной функции

$$\mathrm{T}(\mathbf{q}) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\boldsymbol{\rho}\, G(\boldsymbol{\rho}) \exp(i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\rho}). \quad (5)$$

С учетом (4) интеграл в (5) запишется в виде произведения двух функций:

$$\mathrm{T}(\mathbf{q}) = \tau(\mathbf{q})F(\mathbf{q}), \tag{6}$$

где

$$\tau(\mathbf{q}) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\boldsymbol{\rho}\, g(\boldsymbol{\rho}) \exp(i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\rho}) \tag{7}$$

— собственный корреляционный объем, описывающий угловое распределение диффузного рассеяния от кристалла с некоррелированными порами определенной формы, и

$$F(\mathbf{q}) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\boldsymbol{\rho}\, W(\boldsymbol{\rho}) \exp(i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\rho}) \tag{8}$$

— интерференционный структурный фактор, зависящий от пространственной упорядоченности пор в кристалле.

Термин корреляционный объем ранее был введен в формализм статистической теории дифракции [4,6] по аналогии с корреляционной длиной. Согласно (7), для однородной среды корреляционный объем представляет собой фурье-образ собственной корреляционной функции $g(\boldsymbol{\rho})$. Для пористого кристалла собственная корреляционная функция ставится в прямое соответствие с функцией формы пор. В узле обратной решетки, когда $\mathbf{q} = 0$, получаем

$$\tau(0) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\boldsymbol{\rho}\, g(\boldsymbol{\rho}) = V_p,$$

где V_p — объем поры. Таким образом, нулевая гармоника корреляционного объема равна объему поры.

В трехосевой рентгеновской дифрактометрии в симметричной геометрии Брэгга проекции вектора $\mathbf{q}$ в плоскости дифракции xz выражаются через угловые параметры вращения образца ω и анализатора ε как [1]

$$q_x = \frac{2\pi}{\lambda}(2\omega - \varepsilon)\sin\theta_B,$$

$$q_z = -\frac{2\pi}{\lambda}\varepsilon\cos\theta_B,$$

где θ_B — угол Брэгга для отражающих атомных плоскостей.

Для сопоставления теоретических результатов с экспериментальными данными трехосевой дифрактометрии выражение для интенсивности диффузного рассеяния необходимо проинтегрировать по координате y, перпендикулярной плоскости дифракции xz:

$$I_h^d(q_x, q_z) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dq_y I_h^d(\mathbf{q}). \tag{9}$$

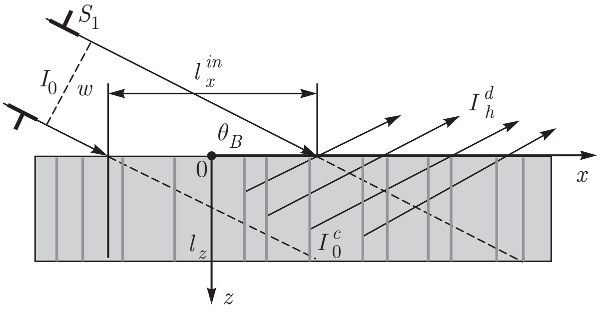

Рис. 2. Схематическое изображение диффузного рассеяния от пористого кристалла в случае пространственно-ограниченного рентгеновского пучка. Штриховыми линиями показано сечение объема кристалла, в котором возникает некогерентное рассеяние

В случае однородной пористой среды решение для интенсивности диффузного рассеяния имеет вид

$$I_h^d(q_x, q_z) = \frac{|a_h|^2(1-f^2)\mathrm{T}(q_x, q_z)}{l_x^{in} l_z} \times$$
$$\times \int\limits_{-l_x^{in}/2}^{l_x^{in}/2} dx \int\limits_0^{l_z} dz \exp(-2\mu z) I_0^c(q_x, q_z; x, z), \tag{10}$$

где l_x^{in} — ширина засветки поверхности кристалла падающим пучком, l_z — толщина кристалла (рис. 2).

В выражении (10) корреляционный объем $\mathrm{T}(\mathbf{r}, \mathbf{q})$ трансформирован в корреляционную площадь

$$\mathrm{T}(q_x, q_z) = \tau(q_x, q_z)F(q_x, q_z),$$

где $\tau(q_x, q_z)$ — собственная корреляционная площадь, зависящая от формы пор, $F(q_x, q_z)$ — двумерный интерференционный структурный фактор, определяющий пространственное распределение пор в кристалле в плоскости дифракции.

Интенсивность проходящего рентгеновского пучка в (10) находится из соотношения

$$I_0^c(q_x, q_z; x, z) = |E_0^c(\eta; x, z)|^2, \tag{11}$$

где амплитуда проходящей когерентной волны $E_0^c(\eta; x, z)$ представлена формулой (14) из работы [1] с угловой переменной $\eta = q_x \operatorname{ctg}\theta_B - q_z$ для трехосевой дифракционной геометрии. Выход диффузного рассеяния определяется объемом кристалла, сечение которого в плоскости дифракции задается границами проходящего рентгеновского пучка и имеет вид параллелограмма (рис. 2).

3. МОДЕЛИ ПОР

В зависимости от технологических условий в кристалле образуются поры разной формы. В частности, поры в виде прямоугольной [14] и треугольной призмы [15], а также цилиндрической [16] и эллипсоидальной (сферической) [17] формы наблюдались на снимках электронной микроскопии.

Собственная корреляционная функция $g(\boldsymbol{\rho})$ описывает вероятность того, что две точки, расположенные на расстоянии ρ друг от друга будут находиться внутри поры. При этом для этой функции всегда выполняются условия $g(0) = 1$ и $g(\infty) = 0$. Собственную корреляционную функцию пор в кристалле можно представить в виде свертки [7, 8]

$$g(\boldsymbol{\rho}) = (1/V_p) \int D(\mathbf{r}) D^*(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho})\, d\mathbf{r}, \qquad (12)$$

где функция $D(\mathbf{r}) = 1 - \exp(i\mathbf{h}\delta\mathbf{u}(\mathbf{r}))$ является характеристикой формы пустот, возникающих в процессе порообразования, и зависит от случайных атомных смещений $\delta\mathbf{u}(\mathbf{r})$, V_p — объем поры. Геометрическая трактовка $g(\boldsymbol{\rho})$ состоит в том, что эта функция равна отношению объема пересечения двух пор

$$\nu_p(\boldsymbol{\rho}) = \int D(\mathbf{r}) D^*(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho})\, d\mathbf{r}$$

к объему поры V_p. Нетрудно видеть, что $\nu_p(0) = V_p$ и собственная корреляционная функция принимает максимальное значение $g(0) = 1$.

Другим важным параметром, который характеризует нарушение кристаллической решетки из-за возникновения локальных внутренних пустот, является статический фактор Дебая – Валлера f_p. Пусть c_p — концентрация пор в кристаллической матрице, тогда с помощью функции формы $D(\mathbf{r})$ можно также записать выражение для статического фактора Дебая – Валлера:

$$f_p = \exp\left(-c_p \int D(\mathbf{r})\, d\mathbf{r}\right) = \\ = \exp(-c_p V_p) = \exp(-P), \qquad (13)$$

где P — относительный объем пустот в кристалле или, иными словами, его пористость. Выражение для корреляционного объема (7) можно записать как

$$\tau(\mathbf{q}) = |D(\mathbf{q})|^2 / V_p, \qquad (14)$$

где $D(\mathbf{q}) = \int D(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})\, d\mathbf{r}$ — фурье-образ функции $D(\mathbf{r})$.

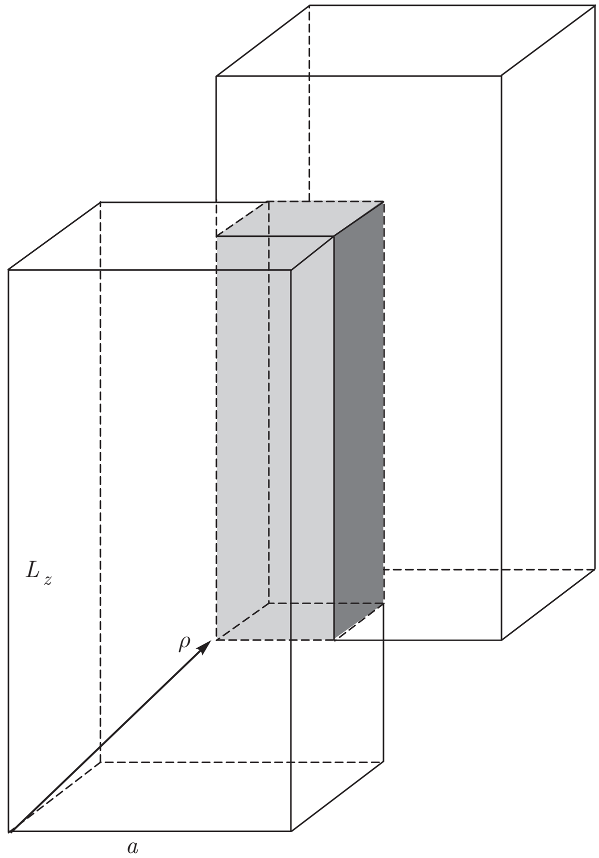

Рис. 3. Модель пор в форме прямоугольного параллелепипеда. Объем пересечения двух пор показан в виде затемненной фигуры

Таким образом, выше приведены общие выражения для собственной корреляционной функции (12), статического фактора Дебая – Валлера (13) и корреляционного объема (14) в удобном для вычислений виде. Отметим, что в этих соотношениях берется в расчет произвольная форма пор. Ранее модели пор рассматривались в разных работах. Поскольку отсутствует сравнение углового распределения диффузного рассеяния от кристаллов с пустотами разной формы, ниже кратко будут представлены выражения для корреляционных функций, статического фактора Дебая – Валлера и корреляционного объема, а также проведен сравнительный анализ карт интенсивностей рассеяния от четырех моделей пор.

Модель пор в форме прямоугольного параллелепипеда (модель № 1) использована в работе [18] для описания углового распределения диффузного рассеяния от пористого германия. Для поры высотой L_z и стороной квадратного основания a (рис. 3) собственная корреляционная функция запишется в виде произведения

$$g(\boldsymbol{\rho}) = \prod_j g_j(\rho_j, L_j), \tag{15}$$

где

$$j = x, y, z; \quad L_j = a, a, L_z,$$

$$g_j(\rho_j, L_j) = \begin{cases} 1 - |\rho_j|/L_j, & |\rho_j| \le L_j, \\ 0, & |\rho_j| > L_j. \end{cases}$$

Статический фактор Дебая – Валлера кристалла с порами в форме прямоугольного параллелепипеда равен $f_p = \exp(-c_p a^2 L_z)$. Корреляционный объем для рассматриваемой модели представим в виде произведения трех корреляционных длин во взаимно перпендикулярных направлениях:

$$\tau(\mathbf{q}) = \prod_j \tau_j(q_j) = \prod_j L_j \operatorname{sinc}^2(q_j L_j/2), \tag{16}$$

где $\operatorname{sinc}(x) = \sin(x)/x$.

Более сложной, чем модель № 1, является модель кристалла с порами в виде треугольной призмы (модель № 2) [19]. Собственная корреляционная функция для пор в форме треугольной призмы высотой L_z и латеральным сечением в виде равностороннего треугольника со стороной a (рис. 4) может быть записана в виде произведения

$$g(\boldsymbol{\rho}) = g_{tr}(\rho_x, \rho_y, a) g_z(\rho_z, L_z), \tag{17}$$

где вертикальная корреляционная функция $g_z(\rho_z, L_z)$ аналогична соответствующему параметру прямоугольного параллелепипеда (15). Двумерная латеральная корреляционная функция ведет себя по-разному в зависимости от геометрии пересечения треугольников (рис. 4) и имеет вид

$$g_{tr}(\rho_x, \rho_y, a) = \begin{cases} \left(1 - (1/a)\left(|\rho_x| + |\rho_y|/\sqrt{3}\,\right)\right)^2, & |\rho_x| < |\rho_y/\sqrt{3}\,| \le a/2, \\ \left(1 - (2/a)|\rho_y|/\sqrt{3}\,\right)^2, & |\rho_y/\sqrt{3}\,| < |\rho_x| \le a. \end{cases}$$

В остальных случаях $g_{tr}(\rho_x, \rho_y, a) = 0$. Статический фактор Дебая – Валлера запишется с использованием геометрических параметров поры как $f_p = \exp(-c_p V_p)$, где $V_p = \left(\sqrt{3}/4\right) a^2 L_z$ — объем поры в форме треугольной призмы. В рамках рассматриваемой модели № 2 решение для корреляционного объема запишется в виде произведения латеральной корреляционной площади $\tau_{tr}(q_x, q_y)$ и вертикальной корреляционной длины $\tau_z(q_z)$:

$$\tau(\mathbf{q}) = \tau_{tr}(q_x, q_y)\tau_z(q_z), \tag{18}$$

где вертикальная длина корреляции $\tau_z(q_z)$ имеет вид (15). Собственная корреляционная площадь латерального сечения треугольной призмы запишется как

$$\tau_{tr}(q_x, q_y) = \frac{\sqrt{3}\,a^2}{[p_x^2 - p_y^2]^2} \left\{ 1 + \frac{p_y}{p_x}\sin(p_x) \times \right.$$
$$\left. \times \left(\frac{p_y}{p_x}\sin(p_x) - 2\sin(p_y)\right) + (\cos(p_x) - 2\cos(p_y))\cos(p_x) \right\}.$$

Здесь для удобства введены безразмерные угловые параметры $p_x = q_x a/2$, $p_y = \sqrt{3}\, q_y a/2$ и $p_z = q_z L_z/2$. Интересно отметить, что в узле обратной решетки латеральная корреляционная площадь равна площади равностороннего треугольника $\tau_{tr}(0, 0) = \left(\sqrt{3}/4\right) a^2$, вертикальная корреляционная длина равна высоте треугольной призмы $\tau_z(0) = L_z$ и, наконец, корреляционный объем равен объему поры: $\tau(0) = \left(\sqrt{3}/4\right) a^2 L_z$.

Цилиндрическая модель пор (модель № 3) использована в [20] для анализа диффузного рассеяния от пористого слоя InP. Собственная корреляционная функция для цилиндрических пустот радиусом основания R и высотой L_z (рис. 5), равная отношению объема пересечения двух цилиндров к объему $V_p = \pi R^2 L_z$, представима в виде произведения

$$g(\boldsymbol{\rho}) = g_0(\rho_x, \rho_y, R) g_z(\rho_z, L_z). \tag{19}$$

Здесь собственная корреляционная функция $g_z(\rho_z, L_z)$ аналогична соответствующей вертикальной функции для пор в форме прямоугольной и треугольной призмы и описывается формулой (15). Латеральная корреляционная функция $g_0(\rho_x, \rho_y, R) = g_0(\rho_0, R)$, где $\rho_0 = \sqrt{\rho_x^2 + \rho_y^2}$, запишется в виде

$$g_0(\rho_0, R) = \begin{cases} \dfrac{2}{\pi}\arcsin\left(\sqrt{1 - \dfrac{\rho_0^2}{4R^2}}\right) - \dfrac{\rho_0}{\pi R}\sqrt{1 - \dfrac{\rho_0^2}{4R^2}}, & \rho_0 \le 2R, \\ 0, & \rho_0 > 2R. \end{cases}$$

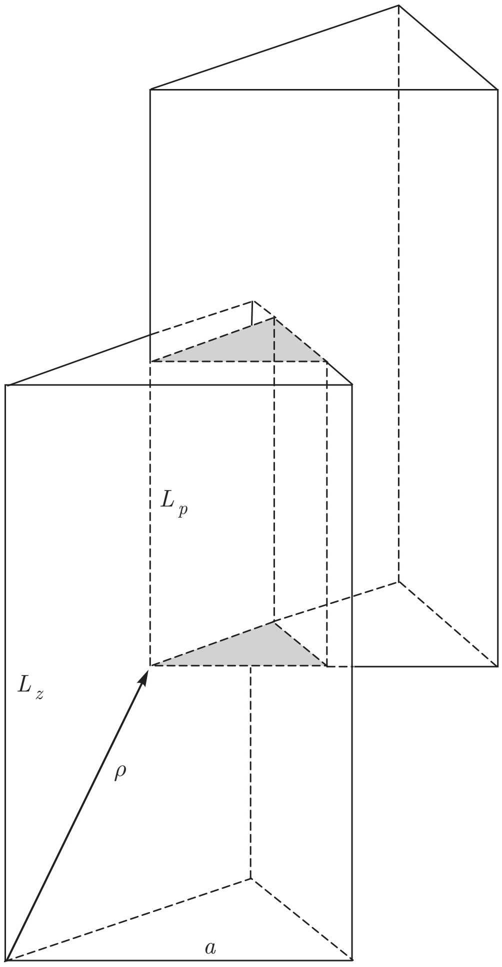

Рис. 4. Модель пор в форме треугольной призмы. Объем пересечения двух пор показан в виде затемненной фигуры

Статический фактор Дебая–Валлера для цилиндрических пор равен $f_p = \exp(-c_p \pi R^2 L_z)$.

Аналитическое решение для корреляционного объема цилиндрических пор имеет вид

$$\tau(\mathbf{q}) = \pi R^2 L_z \left(\frac{2 J_1(q_0 R)}{q_0 R} \right)^2 \left(\operatorname{sinc} \frac{q_z L_z}{2} \right)^2, \qquad (20)$$

где $J_1(q_0 R_z)$ — функции Бесселя первого порядка, $q_0 = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$.

Модель пор в виде вытянутого вдоль вертикальной оси z сфероида (модель №4), форма которого задается уравнением

$$\frac{x^2 + y^2}{R^2} + \frac{z^2}{b_z^2} = 1,$$

рассмотрена в работе [21], где R — радиус (горизонтальная полуось), $L_z = 2b_z$ — высота (b_z — вертикальная полуось) сфероида (рис. 6). Собственная корреляционная функция для такой модели пор имеет следующее выражение:

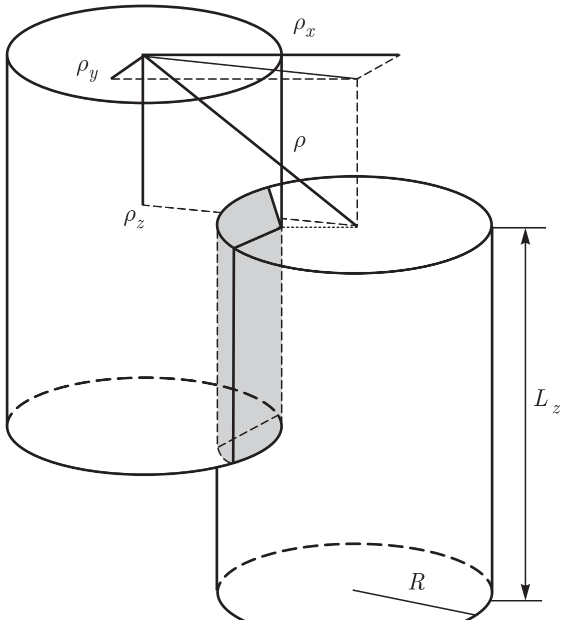

Рис. 5. Модель пор цилиндрической формы. Объем пересечения двух пор показан в виде затемненной фигуры

$$g(\rho) = -\frac{3\rho}{4R} \xi(\varepsilon, \theta) + \frac{\rho^3}{16 R^3} \xi(\varepsilon, \theta)^3, \qquad 0 \le \rho \le 2R/\xi(\varepsilon, \theta). \qquad (21)$$

В остальных случаях эта функция равна нулю. Здесь $\xi(\varepsilon, \theta) = (1 - \varepsilon^2 \cos^2 \theta)^{1/2}$, θ — полярный угол между осью z и вектором $\boldsymbol{\rho}$, $\varepsilon = (1 - (R/b_z)^2)^{1/2} < 1$ — коэффициент эллиптичности (эксцентриситет), определяющий форму сфероида. В случае $R = b_z$, $\varepsilon = 0$ имеем $\xi(0, \theta) = 1$ и выражение (21) трансформируется в формулу для собственной корреляционной функции сферы радиуса R [7]. Статический фактор Дебая–Валлера кристалла со сфероидальной формой пор равен $f = \exp(-c_p 4\pi b_z R^2/3)$. Собственный корреляционный объем, описывающий угловое распределение интенсивности диффузного рассеяния от кристалла с вытянутыми сфероидальными порами, имеет вид

$$\tau(\mathbf{q}) = \left| \int_{-l_z}^{l_z} (R_z/q_0) J_1(q_0 R_z) \exp(i q_z z)\, dz \right|^2, \qquad (22)$$

где $J_1(q_0 R_z)$ — функция Бесселя первого порядка, $q_0 = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$, $R_z = R\sqrt{1 - z^2/b_z^2}$.

Представленные выше решения для собственных корреляционных функций и корреляционных объ-

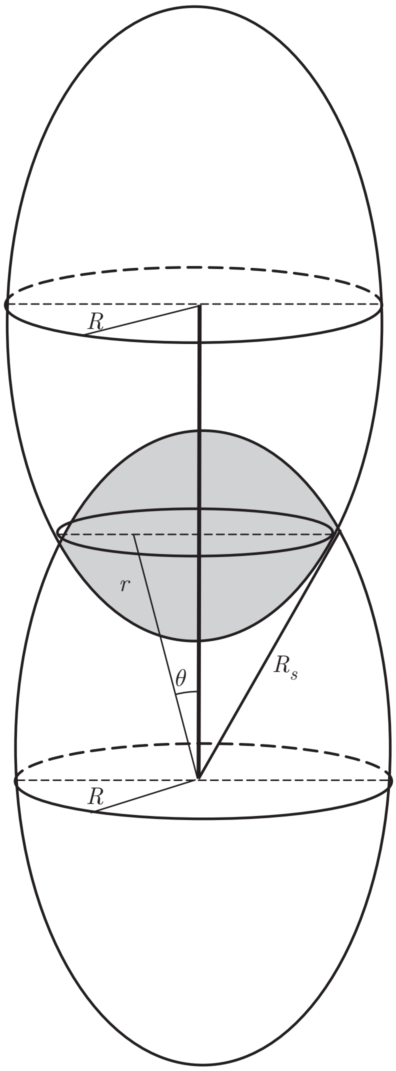

Рис. 6. Модель сфероидальных пор. Объем пересечения двух пор показан в виде затемненной фигуры

емов (корреляционных площадей) пористых кристаллов с порами прямоугольного, треугольного, цилиндрического латерального сечения и сфероидальной формы (модели № 1–4) используем в численном моделировании. Для адекватной оценки интенсивности диффузного рассеяния в обратном пространстве примем в рассмотрение модели пор одинаковой высоты $L_z = 300$ нм и одинакового объема $V_p = 3 \cdot 10^6$ нм^3. Латеральные размеры $2R$ разных моделей пор будут различаться. В частности, для пор квадратного сечения сторона квадрата $a = 100$ нм, для цилиндрических пор радиус цилиндра $R_{cyl} = 56$ нм, для пор сфероидальной формы радиус (горизонтальная полуось) $R_{sph} = 69$ нм. Несколько сложнее ситуация с порами треугольной формы, поскольку латеральный размер зависит от азимутальной ориентации пор. В случае когда основание треугольного сечения лежит в плоскости дифракции, латеральным размером является сторона треугольника $a = 152$ нм. При повороте треугольного сечения на азимутальный угол $\pi/2$ латеральным размером будет служить высота треугольника $h_x = 132$ нм (рис. 4).

На рис. 7 показаны латеральные сечения собственных корреляционных функций пор $g(\rho_x, \rho_y)$ разной формы. Собственная корреляционная функция пор квадратного сечения имеет ромбообразный вид и показана на рис. 7*а*. Собственная корреляционная функция пор треугольного сечения представлена на рис. 7*б*. Несмотря на то что сечение пор имеет ось симметрии третьего порядка, собственная корреляционная функция имеет гексагональную симметрию. Поскольку латеральные сечения рассматриваемых цилиндрических и сфероидальных пор имеют форму окружностей с радиусами $R_{cyl} = 56$ нм и $R_{sph} = 69$ нм, и контуры равного значения собственных корреляционных функций $g_0(\rho_x, \rho_y, R)$ представляют собой вложенные окружности разного радиуса (рис. 7*в,г*).

Собственные корреляционные функции в плоскости рентгеновской дифракции $g(\rho_x, \rho_z)$ для пор прямоугольного, треугольного и цилиндрического сечений имеют одинаковую вертикальную составляющую $g_z(\rho_z, L_z)$. Несмотря на то что латеральные компоненты этих функций различны, их двумерные зависимости визуально слабо различаются. По этой причине приводим лишь $g(\rho_x, \rho_z)$ для цилиндрической формы пор (рис. 8*а*). Центральная часть этой функции сфероида имеет форму вытянутого ромба. Вертикальное сечение собственной корреляционной функции пор сфероидальной формы имеет вид вложенных эллипсов (рис. 8*б*). Поскольку радиус латерального сечения сфероидальных пор на 10 нм превышает соответствующий радиус цилиндрических пор, их собственная корреляционная функция сжата в вертикальном направлении и более размыта в горизонтальном направлении.

Угловые распределения диффузного рассеяния от кристаллов с хаотическим расположением пор зависят от их корреляционных объемов. В трехкристальной схеме интенсивность диффузного рассеяния пропорциональна корреляционной площади в плоскости дифракции

$$I_h^d(q_x, q_z) \sim \tau(q_x, q_z) = \int_{-\infty}^{\infty} dq_y \tau(\mathbf{q}).$$

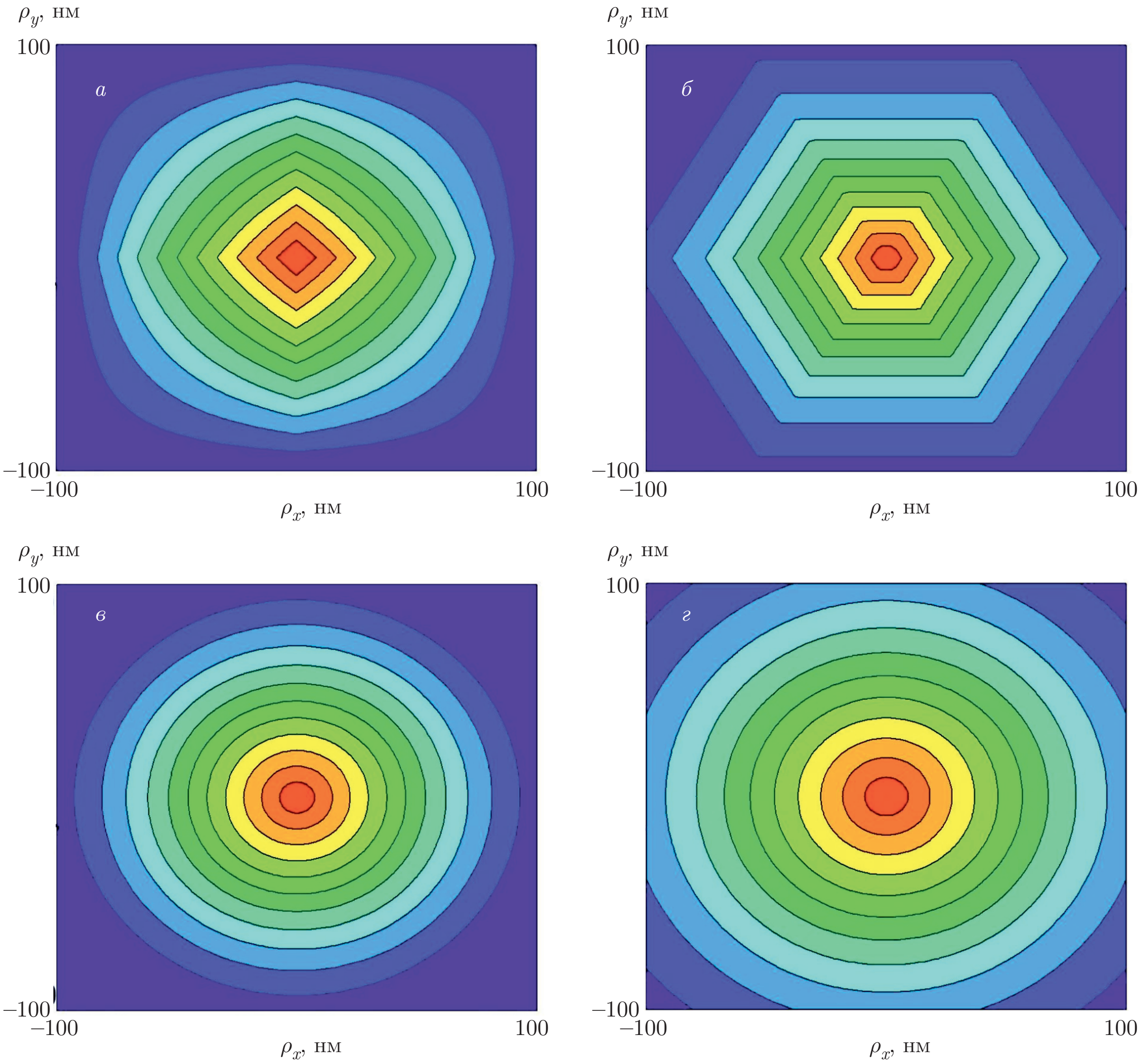

Рис. 7. (В цвете онлайн) Собственные корреляционные функции горизонтального сечения пор разной формы: *а* — поры квадратного сечения, *б* — поры треугольного сечения, *в* — цилиндрические поры, *г* — сфероидальные поры. Контуры равных числовых значений корреляционных функций представлены в линейном масштабе, максимальное значение, равное единице, показано красным цветом, значения между соседними линиями равны 0.083

Таким образом, карты распределения интенсивности диффузного рассеяния в обратном пространстве (reciprocal space map (RSM)) с точностью до нормировочного множителя совпадают с контурами корреляционной площади в плоскости дифракции. Отличия возникают при учете динамических эффектов в диффузном рассеянии и в случае, когда поры имеют ближний или дальний порядок в их расположении.

На рис. 9 представлены расчетные карты RSM диффузного рассеяния для разных моделей пор при гипотетическом условии, что все поры в кристалле имеют абсолютно одинаковые размеры. На этом и других рисунках контуры равной интенсивности приведены в логарифмическом масштабе, отношение интенсивностей соседних линий равно 0.42. Для удобства максимальное значение интенсивности диффузного рассеяния нормировано на единицу (красный цвет).

Из рисунка следует, что угловое распределение интенсивности от кристалла со сфероидальной формой пор (рис. 9*г*) имеет существенное отличие от диффузного рассеяния на кристалле с другими формами пор. Отметим, что для пор квад-

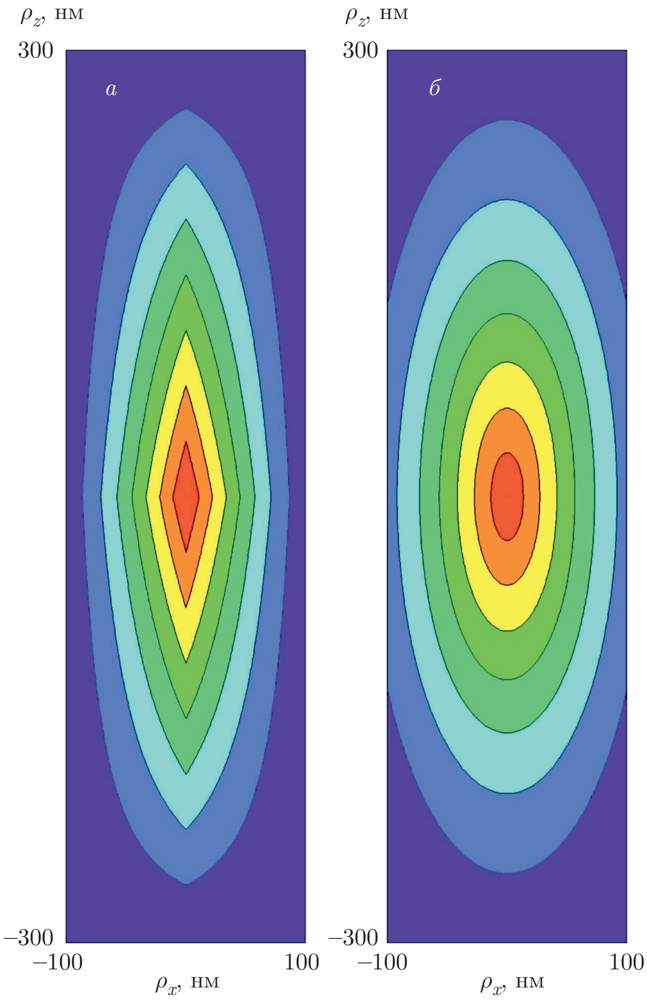

Рис. 8. (В цвете онлайн) Собственные корреляционные функции вертикального сечения пор: *а* — цилиндрические поры, *б* — сфероидальные поры. Контуры равных числовых значений корреляционных функций представлены в линейном масштабе, максимальное значение, равное единице, показано красным цветом, значения между соседними линиями равны 0.083

ратного, треугольного и цилиндрического сечения (рис. 9*а,б,в*) осцилляции интенсивности в вертикальном направлении имеют один и тот же период $2\pi/L_z \approx 20$ мкм, обратно пропорциональный вертикальному размеру пор L_z. В случае сфероидальных пор контуры равной интенсивности формируют топологический рисунок в виде вложенных эллипсов (рис. 9*б*). Осцилляционный характер интенсивности диффузного рассеяния для данной модели, согласно (22), определяется поведением функций Бесселя $J_1(q_0R_z)$.

4. ВЛИЯНИЕ ФЛУКТУАЦИЙ РАЗМЕРОВ И ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ОРИЕНТАЦИИ ПОР НА ДИФФУЗНОЕ РАССЕЯНИЕ

В настоящее время технология электрохимического травления не позволяет формировать в кристалле поры одинакового размера. Для того чтобы приблизить результаты численных расчетов к экспериментальным данным, необходимо проводить статистическое усреднение по размерам пор. Для этой цели можно использовать логарифмическое нормальное распределение [8]

$$p_{LN}(L) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,L\sigma_{LN}} \times \\ \times \exp\left\{-\frac{\left[\ln(L/\langle L\rangle)+\sigma_{LN}^2/2\right]^2}{2\sigma_{LN}^2}\right\}, \quad L \ge 0, \quad (23)$$

где

$$\langle L\rangle = \int_0^\infty L p_{LN}(L)\,dL$$

— средний размер пор в латеральном или вертикальном направлениях. Дисперсия размера пор

$$\sigma_L^2 = \int_0^\infty (L - \langle L\rangle)^2 p_{LN}(L)\,dL$$

и положение максимума L_{max} в распределении пор по размерам запишутся как

$$\sigma_L^2 = \left[\exp(\sigma_{LN}^2) - 1\right]\langle L\rangle^2,$$

$$L_{max} = \exp(-3\sigma_{LN}^2/2)\langle L\rangle.$$

Такое распределение выбрано для того, чтобы избежать вероятности отрицательных размеров пор. С другой стороны, малый разброс по размерам пор приводит к совпадению с нормальным распределением: $\sigma_L^2 \approx \sigma_{LN}^2\langle L\rangle^2$, $L_{max} \approx \langle L\rangle$.

Как отмечено выше, самоорганизованные поры в кристалле редко имеют одинаковый размер, поэтому при анализе экспериментальных данных методом численного моделирования необходимо проводить статистическое усреднение по размерам пор с использованием формулы (23). Рисунок 10 демонстрирует влияние флуктуации размеров пор на угловое распределение диффузного рассеяния вблизи узла обратной решетки. Форма и средние размеры пор находятся в полном соответствии с рис. 9. Дисперсия разброса пор в вертикальном и латеральном направлениях была одинакова и составляла 30 % от соответствующего размера.

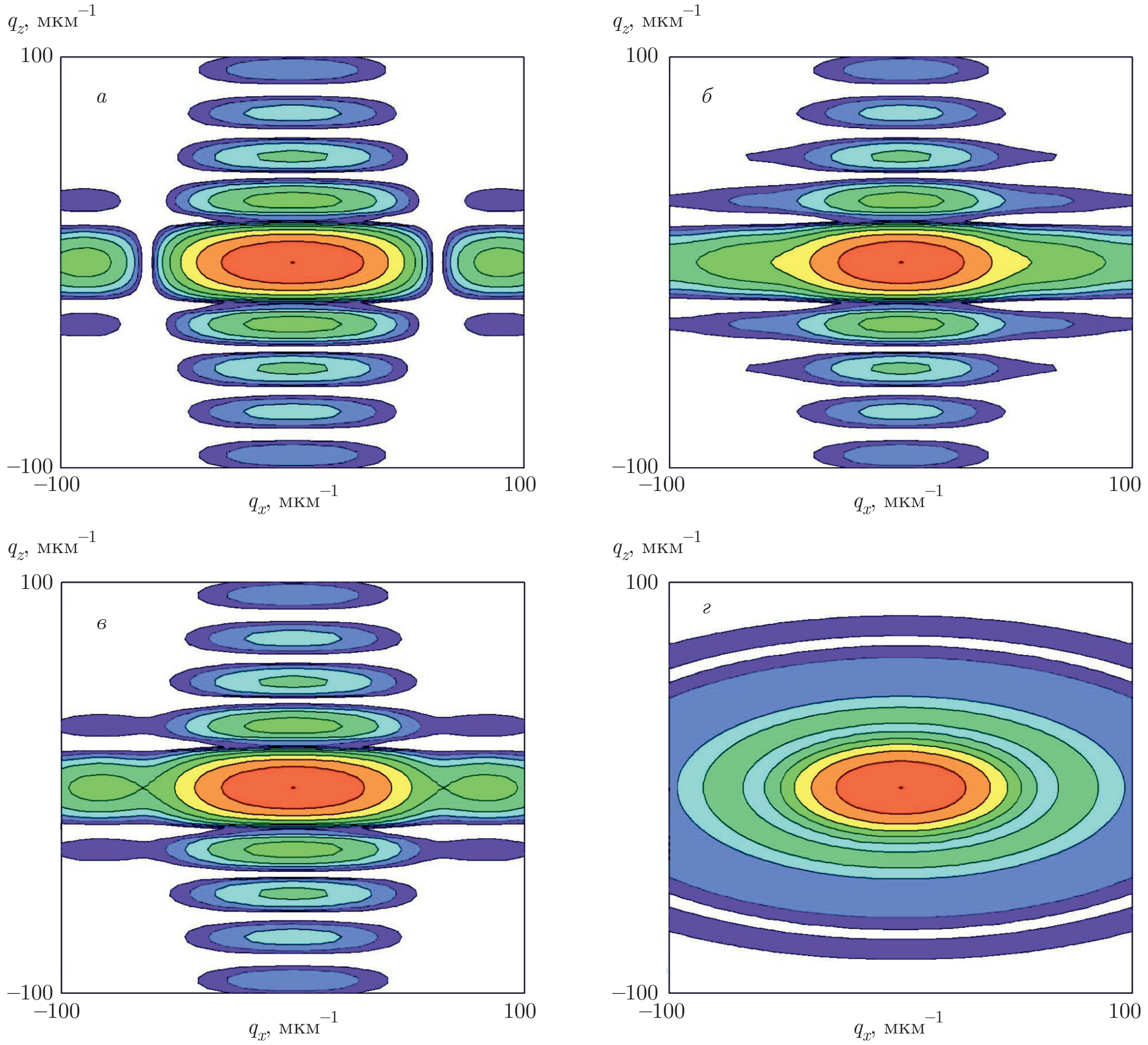

Рис. 9. (В цвете онлайн) Карты RSM диффузного рассеяния пористым кристаллом с одинаковыми по размерам порами: *а* — поры квадратного сечения, *б* — поры треугольного сечения, *в* — цилиндрические поры, *г* — сфероидальные поры

Сравнительный анализ результатов расчета диффузного рассеяния, представленных на рис. 9 и 10, показывает, что флуктуации в размерах пор приводят к сглаживанию изодиффузных линий, подавлению осцилляционной структуры на картах распределения интенсивности рассеяния. При этом отметим, что разброс размеров пор приводит к исчезновению характерных черт диффузного рассеяния от кристалла с порами фиксированной формы. Действительно, распределения интенсивности рассеяния, вызванного порами прямоугольного, треугольного и цилиндрического сечений, визуально слабо различается. Заметное различие проявляется лишь для пор сфероидальной формы (рис. 10*г*). Отсюда следует вывод, что важным параметром, характеризующим диффузное рассеяние от кристалла с порами разных размеров, является не их форма, а отношение диаметра поры к ее высоте. В нашем случае этот параметр, определенный как $\eta = 2R/L_z$, равен 0.33, 0.51, 0.37 и 0.46 соответственно для прямоугольных, треугольных, цилиндрических и сфероидальных пор.

Поры в кристалле имеют не только разные размеры, но и разные направления относительно поверхности материала. В общем случае пустоты в кристаллической среде делятся на кристаллографи-

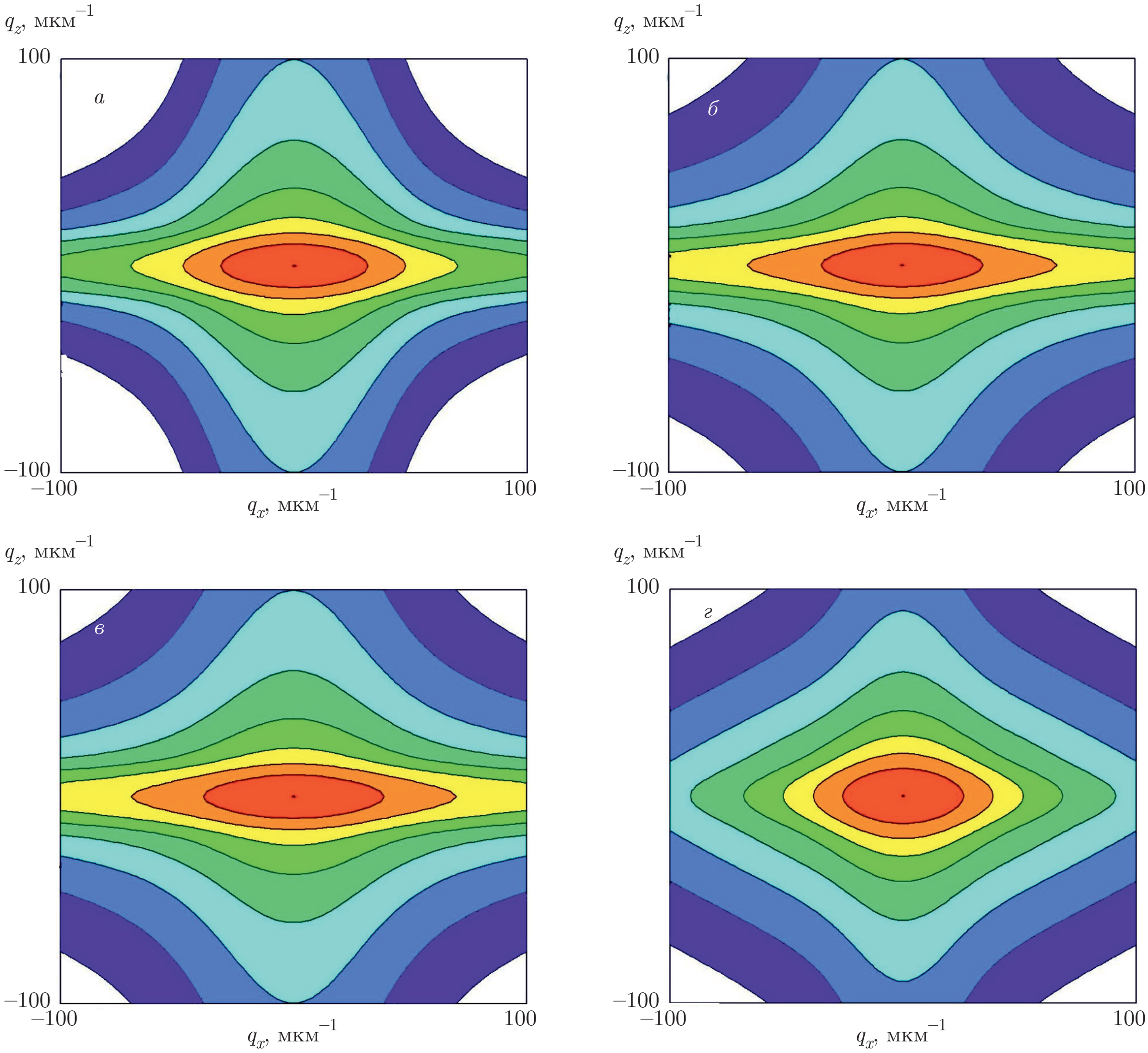

Рис. 10. (В цвете онлайн) Карты RSM диффузного рассеяния пористым кристаллом с учетом флуктуации размеров пор: *а* — поры квадратного сечения, *б* — поры треугольного сечения, *в* — цилиндрические поры, *г* — сфероидальные поры

ческие и токовые поры. Токовые поры, как правило, формируются при относительно больших токовых режимах и направлены перпендикулярно к поверхности кристалла. Кристаллографические поры обычно возникают вдоль одного из кристаллографических направлений и образуют угол α относительно вертикальной оси. Например, в кристалле InP этот угол составляет приблизительно 57°. Поэтому при анализе собственной корреляционной функции ее пространственные параметры в плоскости рентгеновской дифракции претерпевают изменения согласно правилам преобразования декартовой системы координат при повороте осей: $g(\rho_x, \rho_z) \to g(\bar{\rho}_x, \bar{\rho}_z)$, где $\bar{\rho}_x = \rho_x \cos\alpha + \rho_z \sin\alpha$, $\bar{\rho}_z = \rho_z \cos\alpha - \rho_x \sin\alpha$. Это, в свою очередь, влечет изменения в угловом распределении интенсивности диффузного рассеяния, т. е. собственная корреляционная площадь пор в данном случае вычисляется по формуле

$$\tau(q_x, q_z) = \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{\rho}_x \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{\rho}_z g(\bar{\rho}_x, \bar{\rho}_z) \times \\ \times \exp\left(i[q_x\bar{\rho}_x + q_z\bar{\rho}_z]\right). \quad (24)$$

Таким образом, пространственная ориентация пор однозначно влияет на формирование изодиффузных линий, что впервые наблюдалось в работе [22].

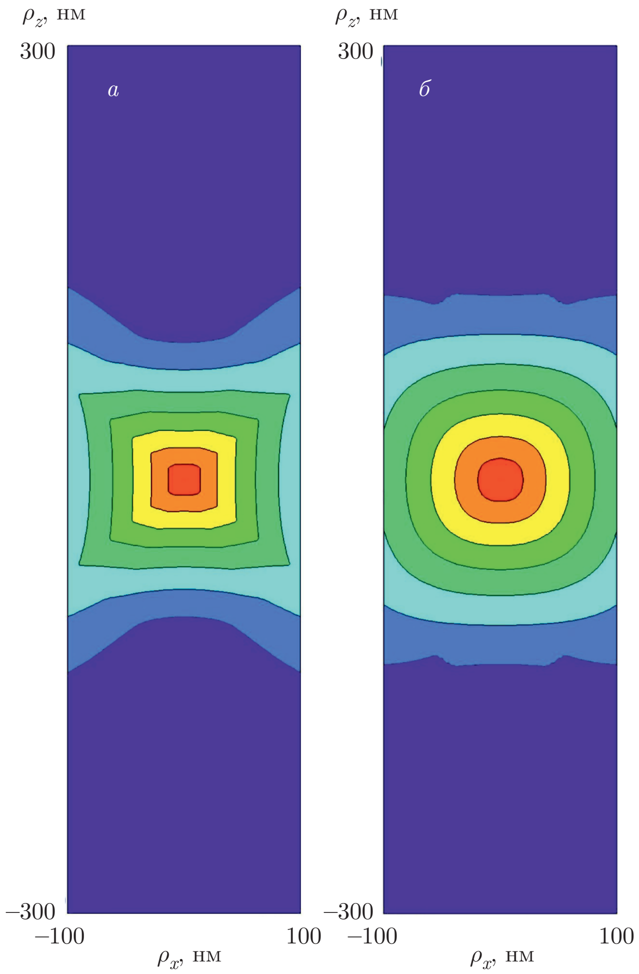

Рис. 11. (В цвете онлайн) Собственные корреляционные функции $g(\rho_x, \rho_z)$ наклонных цилиндрических (*а*) и сфероидальных (*б*) пор

Как правило, в кристаллах формируются поры с равновероятными наклонами в обе стороны. Иными словами, при построении собственной корреляционной функции необходимо брать во внимание поворот двух координатных осей на углы $\pm\alpha$. В результате собственная корреляционная функция наклонных пор является результатом преобразования вида

$$g(\rho_x, \rho_z) = \left[g\left(\rho_x^{(+)}, \rho_z^{(+)}\right) + g\left(\rho_x^{(-)}, \rho_z^{(-)}\right)\right]/2,$$

где

$$\rho_x^{(\pm)} = \rho_x \cos(\pm\alpha) + \rho_z \sin(\pm\alpha),$$
$$\rho_z^{(\pm)} = \rho_z \cos(\pm\alpha) - \rho_x \sin(\pm\alpha).$$

На рис. 11 показаны двумерные собственные корреляционные функции $g(\rho_x, \rho_z)$ наклонных цилиндрических и сфероидальных пор. Поведение этих функций существенно отличается от соответствующих зависимостей вертикальных пор (ср. рис. 8 и 11).

Карты распределения диффузного рассеяния от наклонных пор в форме цилиндра и сфероида демонстрирует рис. 12. Поры одного размера вызывают осцилляционное поведение интенсивности рассеяния (рис. 12*а* и 12*б*). Направления тяжей диффузного рассеяния связаны с углом наклона пор.

Статистическое усреднение по размерам пор сглаживает контуры равной интенсивности, при этом теряется осцилляционное поведение диффузного рассеяния. Отметим, что несмотря на существенный разброс размеров пустот в кристалле ($\sigma_L = 0.3\langle L\rangle$), характерные особенности в угловом распределении интенсивности цилиндрических и сфероидальных пор сохраняются (рис. 12*в,г*).

5. БЛИЖНИЙ ПОРЯДОК В РАСПОЛОЖЕНИИ ПОР. ПАРАКРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Самоорганизованные в результате электрохимического травления поры, как правило, не формируют регулярную латеральную решетку. Жесткая фиксация равновесных положений пор, характерная для трансляционной инвариантности, здесь отсутствует. В результате в латеральной плоскости возникает упорядоченность пор, свойственная искаженным одно- или двумерным квазипериодическим решеткам. Размещение пор в такой латеральной решетке может быть описано моделями ближнего порядка. Влияние пространственной корреляции пор можно исследовать в рамках паракристаллической модели [18]. Поскольку поры, в отличие от квантовых точек [13, 23], не имеют вертикальной корреляции, угловое распределение диффузного рассеяния будет зависеть только от латерального структурного фактора [11, 18], который запишется как произведение структурных факторов базисных направлений a и b:

$$F_L(q_x, q_y) = F_{L,a}(q_x) F_{L,b}(q_y), \qquad (25)$$

где, например, для направления a имеем

$$F_{L,a}(q_x) = \int_{-\infty}^{\infty} d\rho_x \exp(iq_x\rho_x) W_L^a(\rho_x). \qquad (26)$$

Такой же вид имеет фактор $F_{L,b}(q_y)$. Латеральная корреляционная функция при бесконечно большом числе пор может быть представлена как

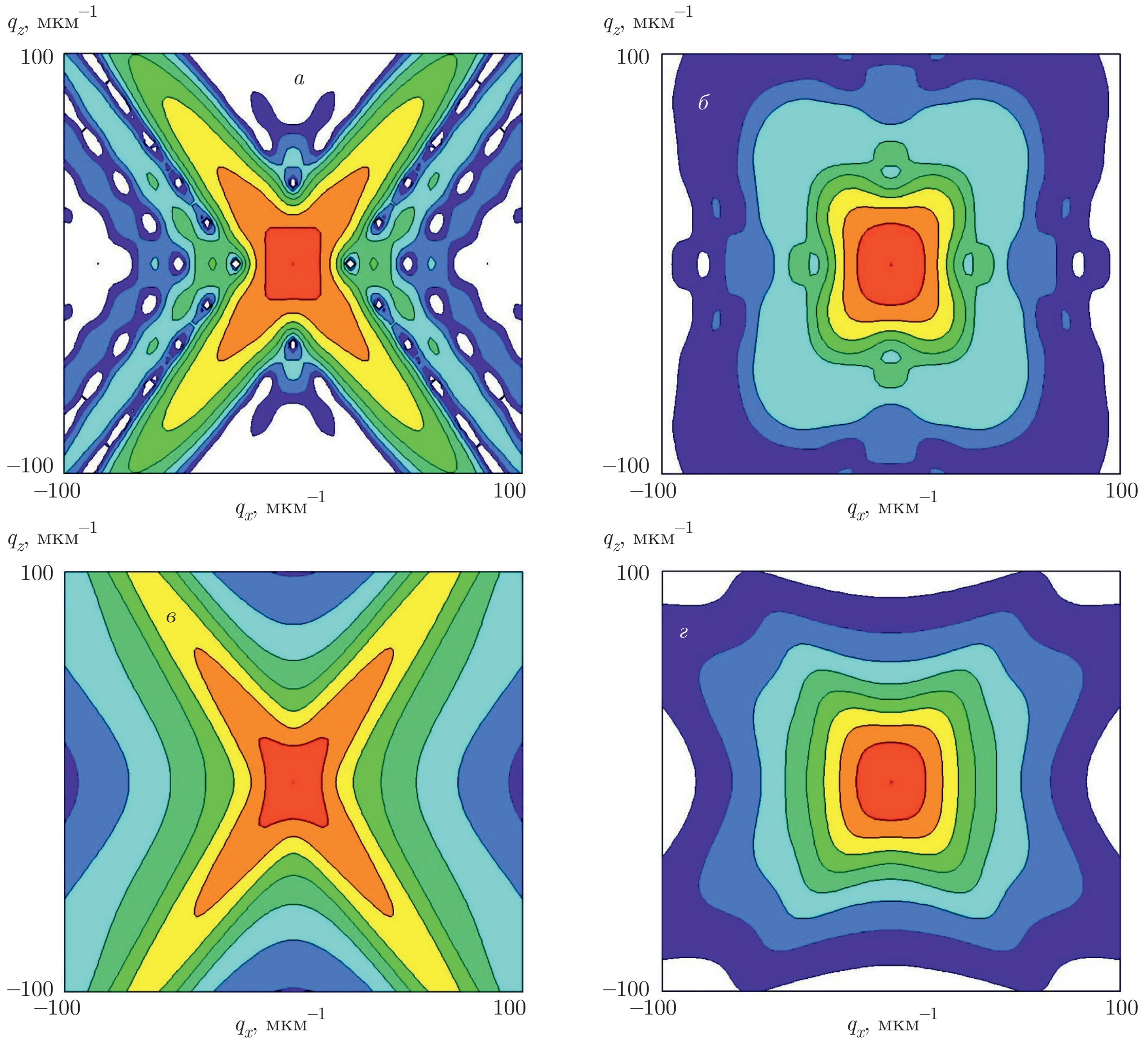

Рис. 12. (В цвете онлайн) Карты RSM диффузного рассеяния пористым кристаллом с наклонными порами без учета флуктуаций размера пор (*а*,*б*) и с учетом (*в*,*г*); *а*,*в* — цилиндрические поры; *б*,*г* — сфероидальные поры

$$W_L(\rho_x, \rho_y) = H_0(\rho_x, \rho_y) + \\ + \sum_m \sum_n \left(H_m^a(\rho_x, \rho_y) \otimes H_n^b(\rho_x, \rho_y)\right) = \\ = W_L^a(\rho_x, \rho_y) \otimes W_L^b(\rho_x, \rho_y),$$

где знаком $\otimes$ обозначена свертка функций.

Строго говоря, функции $W_L^{a,b}(\rho_x, \rho_y)$ в отсутствие пространственной корреляции двух базисных направлений описывают одномерные распределения пор. В этом случае зависимость от второй пространственной координаты обусловлена только случайными смещениями из положений линейной цепочки [24]. В данном приближении рассмотрение можно проводить для одного из заданных базисными векторами направлений. Далее будем считать, что вдоль второго базисного направления выполнено усреднение, что в конечном итоге приводит к одномерной квазипериодической структуре.

Степень латерального разупорядочения пор ставится в соответствие с «размытием» функций $H_m^a(\rho_x)$. Среднее расстояние между первыми соседними порами в линейной цепочке находится по формуле

$$a = \langle \rho_x \rangle = \int_0^\infty d\rho_x \rho_x H_1^a(\rho_x),$$

при этом выполняется условие нормировки

$$\int_0^\infty d\rho_x H_1^a(\rho_x) = 1.$$

Распределение вторых соседних пор описывается функцией $H_2^a(\rho_x)$, которая образуется умножением $H_1^a(\rho_x-\rho_x')$ на вероятность нахождения первой поры в точке ρ', т. е. $H_1^a(\rho_x')$, и интегрированием по всем значениям ρ_x':

$$H_2^a(\rho_x) = \int_0^\infty H_1^a(\rho_x')H_1^a(\rho_x-\rho_x')\,d\rho_x' = \\ = H_1^a(\rho_x)\otimes H_1^a(\rho_x) = H_1^a(\rho_x)^{\otimes 2}.$$

Свертывание функции дает дополнительное размытие, при этом высота пика уменьшается. Для пор с номером m, получаем

$$H_m^a(\rho_x) = H_1^a(\rho_x)^{\otimes m}.$$

Функция распределения в направлении базисного вектора **a** запишется в виде

$$W_L^a(\rho_x) = H_0(\rho_x)+\sum_{m=1}^{N_a}\left(H_1^a(\rho_x)^{\otimes m}+H_{-1}^a(\rho_x)^{\otimes m}\right).$$

Таким образом, $W_L^a(\rho_x)$ полностью определяется первой парной корреляционной функцией $H_1^a(\rho_x)$. Многократное свертывание функций быстро размазывает пики с увеличением числа m, так что максимумы функций начинают перекрываться с соседними пиками, функция $W_L^a(\rho_x)$ с возрастанием ρ_x перестает осциллировать и в конечном итоге принимает постоянное значение. С учетом нормировки среднее значение $H_1^a(\rho_x)$ на интервале $(0,a)$ равно

$$\langle H_1^a(\rho_x)\rangle = \frac{1}{a}\int_0^a d\rho_x H_1^a(\rho_x) = \frac{1}{a}.$$

Ввиду того, что максимумы функций $H_m^a(\rho_x)$, где $m=\pm1,\pm2,\pm3\ldots$, располагаются на одном и том же расстоянии a друг от друга, их средние значения, а также среднее значение всей функции $\langle W_L^a(\rho_x)\rangle$ равно $1/a$.

Кроме того, отметим, что среднее расстояние от начала координат до поры с номером m равно

$$ma = \int_0^\infty d\rho_x\rho_x H_m^a(\rho_x),$$

где a в данном случае имеет смысл среднестатистического периода ближнего порядка. Размытие пиков латеральной функции распределения пор можно характеризовать величиной среднего квадратичного отклонения. Для первого пика $H_1^a(\rho_x)$ это отклонение равно

$$(\Delta_1^a)^2 = \langle(\rho_x-a)^2\rangle = \int_0^\infty d\rho_x(\rho_x-a)^2 H_1^a(\rho_x).$$

Можно показать, что дисперсия Δ_m^a для функции $H_m^a(\rho_x)$ связана с дисперсией первой функции распределения $H_1^a(\rho_x)$ соотношением $\Delta_m^a = \Delta_1^a\sqrt{m}$. Если для двумерной решетки пространственное расположение пор описывается нормальной (гауссовой) функцией распределения, то в общем случае первая парная корреляционная функция примет вид

$$H_{1,G}^a(\rho_x,\rho_y) = \frac{\exp\left(-\left[\dfrac{(\rho_x-a)^2}{(\Delta_1^a)^2} - 2\delta\dfrac{(\rho_x-a)\rho_y}{\Delta_1^a\Delta_1^b} + \dfrac{\rho_y^2}{(\Delta_1^b)^2}\right]/2(1-\delta^2)\right)}{2\pi\Delta_1^a\Delta_1^b\sqrt{1-\delta^2}},$$

где

$$\delta = \frac{\langle\rho_x\rho_y\rangle - \langle\rho_x\rangle\langle\rho_y\rangle}{\Delta_1^a\Delta_1^b}$$

и — корреляционный коэффициент [24]. Если базисные направления и латеральное распределение пор независимы друг от друга, т. е. $\langle\rho_x\rho_y\rangle = \langle\rho_x\rangle\langle\rho_y\rangle$, выполнение усреднения вдоль базисного направления приводит к выражению

$$H_{1,G}^a(\rho_x) = \left(\sqrt{2\pi}\,\Delta_1^a\right)^{-1}\exp\left(-\left[\frac{(\rho_x-a)^2}{2(\Delta_1^a)^2}\right]\right).$$

При конечном числе пор колоколообразные функции $H_m^a(\rho_x)$ должны быть нормированы на разность $(N_a-|m|)$, так как вес пиков $W_L^a(\rho_x)$ уменьшается с возрастанием $|m|$. Поэтому следует писать, например, для базисного направления a

$$W_L^a(\rho_x) = \delta(\rho_x) + \sum_{m=1}^{N_a}\frac{N_a-|m|}{N_a}\times \\ \times\left(H_m^a(\rho_x)+H_{-m}^a(\rho_x)\right). \quad (27)$$

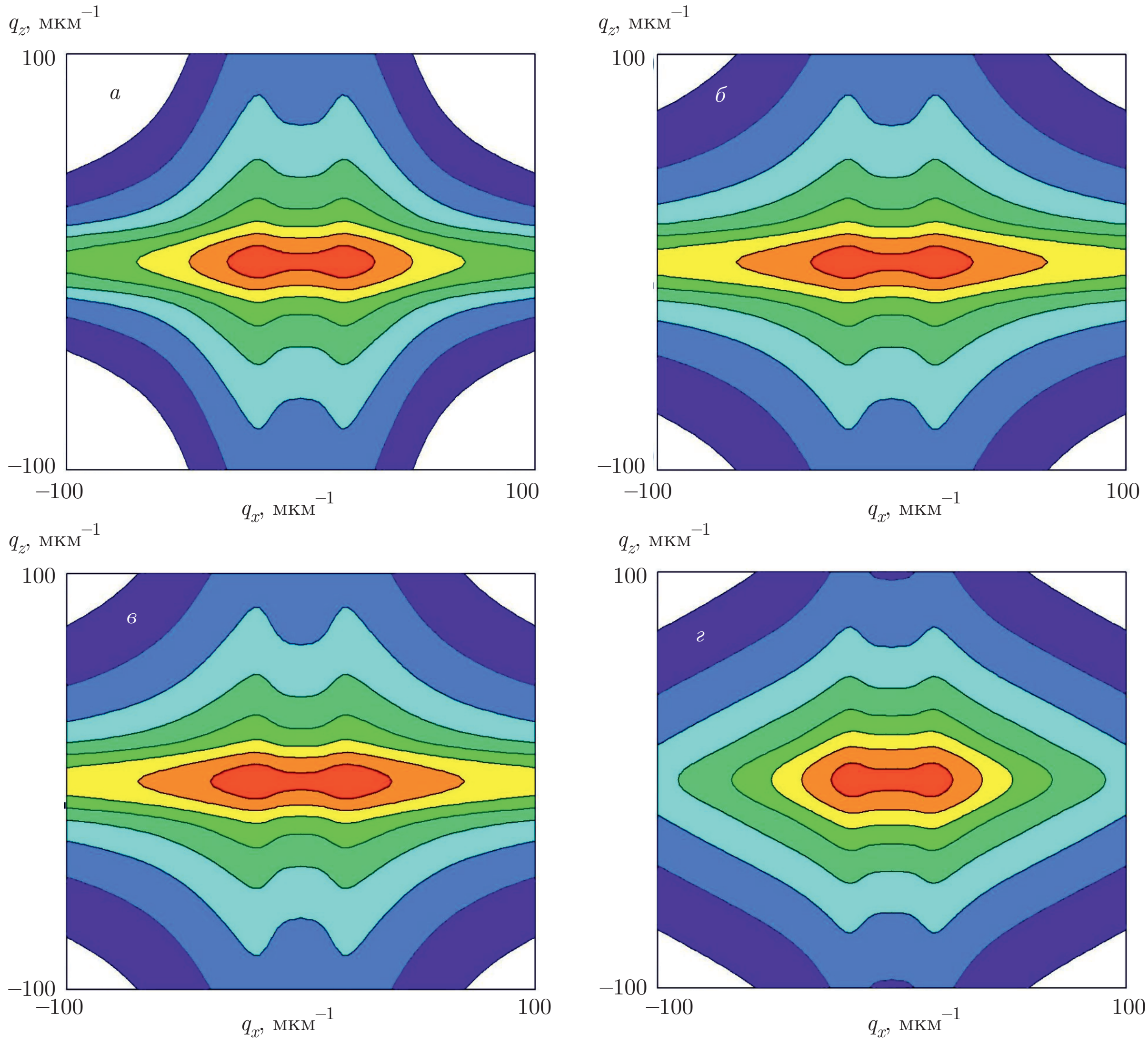

Рис. 13. (В цвете онлайн) Карты RSM диффузного рассеяния пористым кристаллом с учетом флуктуации размеров пор и ближнего порядка в расположении пор: *а* — поры квадратного сечения, *б* — поры треугольного сечения, *в* — цилиндрические поры, *г* — сфероидальные поры

С учетом (27) интерференционный структурный фактор (26) представим в виде конечной суммы ряда

$$F_{L,a}(q_x) = 1+\frac{2}{N_a}\,\mathrm{Re}\left(\sum_{m=1}^{N_a}(N_a-m)Z_a(q_x)^m\right), \quad (28)$$

где

$$Z_a(q_x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\rho_x \exp(iq_x\rho_x)H_1^a(\rho_x).$$

После несложных математических преобразований (28) переходит в аналитическое решение, удобное для численных расчетов [12]:

$$F_{L,a}(q_x) = 1 + \frac{2}{N_a}\times$$
$$\times\,\mathrm{Re}\left(\frac{Z_a(q_x)\left([1-Z_a(q_x)]N_a-[1-Z_a(q_x)^{N_a}]\right)}{[1-Z_a(q_x)]^2}\right). \quad (29)$$

Аналогичный вид имеет структурный фактор $F_{L,b}(q_y)$.

В рамках теории вероятностей первая парная корреляционная функция $H_1^a(\rho_x)$ носит название плотности распределения, а ее фурье-образ $Z_a(q_x)$, соответственно называют характеристической функцией. Для наиболее известных и часто встречающихся распределений, в частности распределений Гаусса, Коши и Лапласа, характеристическая функция может быть представлена в виде

$$Z_a(q_x) = P_a(q_x) \exp(iq_x a), \tag{30}$$

где, например, для нормального распределения параметр в правой части (30) запишется как

$$P_a^G(q_x) = \exp\left(-(\Delta_1^a q_x)^2/2\right).$$

Для распределений Коши

$$H_{1,C}^a(\rho_x) = \frac{1}{\pi\Delta_1^a} \frac{\Delta_1^a}{(\Delta_1^a)^2 + (\rho_x - a)^2}$$

и Лапласа

$$H_{1,L}^a(\rho_x) = \frac{1}{2\Delta_1^a} \exp\left(-\frac{|\rho_x - a|}{\Delta_1^a}\right),$$

соответственно имеем

$$P_a^C(q_x) = \exp\left(-|\Delta_1^a q_x|\right)$$

и

$$P_a^L(q_x) = \frac{1}{1 + (\Delta_1^a q_x)^2}.$$

При бесконечно большом числе пор ($N_a \to \infty$) формула (29) упрощается и имеет вид

$$F_{L,a}(q_x) = \frac{1 - [P_a(q_x)]^2}{1 + [P_a(q_x)]^2 - 2P_a(q_x)\cos(q_x a)}. \tag{31}$$

На рис. 13 показаны двумерные карты распределения интенсивности диффузного рассеяния пористым кристаллом с учетом флуктуации размеров пор и с пространственной латеральной корреляцией в расположении пор.

Интенсивность диффузного рассеяния с учетом пространственной корреляции нормировалась на единицу и рассчитывалась по формуле

$$I_h^d(q_x, q_z) \sim \tau(q_x, q_z) F_{L,a}(q_x),$$

где интерференционный структурный фактор $F_{L,a}(q_x)$ соответствовал выражению (31).

Среднее расстояние между порами составляло $a = 200$ нм, дисперсия первой функции распределения $\Delta_1^a = 140$ нм, что указывает на достаточно плохой ближний порядок. Тем не менее, учет ближнего порядка заметно видоизменяет угловое распределение диффузного рассеяния. Вместо куполообразного распределения интенсивности рассеяния, что наблюдалось при хаотическом распределении пор, появляется провал в центральной части углового спектра (ср. с рис. 10).

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В разработанной выше теории получены решения, но не представлены результаты влияния первичной экстинкции на диффузное рассеяние рентгеновских лучей пористым кристаллом. Они будут показаны в следующей части работы при анализе экспериментальных данных. Вместе с тем, изложенный в работе формализм может быть перенесен на исследование диффузного рассеяния от кристаллов или других пространственно-периодических структур (многослойных систем рентгеновской оптики, жидких кристаллов, оптики фотонных кристаллов и т. д.) с многогранным разнообразием структурных дефектов.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке в рамках программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 18-10-2-23) и РФФИ (проекты №№ 17-02-00090-а, 16-43-110350).

ЛИТЕРАТУРА

1. В. И. Пунегов, ЖЭТФ **154**, (2018).

2. N. Kato, Acta Cryst. A **36**, 763 (1980).

3. M. A. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals*, Springer, Berlin (1996).

4. K. M. Pavlov and V. I. Punegov, Acta Cryst. A **56**, 227 (2000).

5. В. И. Пунегов, А. В. Харченко, Кристаллография **43**, 1078 (1998).

6. Ya. I. Nesterets and V. I. Punegov, Acta Cryst. A **56**, 540 (2000).

7. В. А. Бушуев, *Угловое распределение интенсивностей динамической дифракции рентгеновских лучей в кристаллах с микродефектами в геометриях Лауэ и Брэгга*, ВИНИТИ № 486-В88 (1988).

8. В. И. Пунегов, Кристаллография **54**, 415 (2009).

9. H. Masuda, in: *Ordered Porous Nanostructures and Applications*, ed. by R. B. Wehrspohn, Springer, New York (2005), p. 37.

10. В. А. Бушуев, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования № 9, 29 (2007).

11. В. И. Пунегов, А. А. Ломов, Письма в ЖТФ **34**, 30 (2008).

12. В. И. Пунегов, Письма в ЖТФ **37**, 8 (2011).

13. В. И. Пунегов, УФН **185**, 449 (2015).

14. P. Granitzer, K. Rumpf, P. Pölt et al., Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures **38**, 205 (2007).

15. I. M. Tiginyanua, I. V. Kravetsky, J. Monecke et al., Appl. Phys. Lett. **77**, 2415 (2000).

16. H. Föll, M. Leisner, A. Cojocaru et al., Electrochimica Acta **55**, 327 (2009).

17. D. Nohavica, P. Gladkov, Z. Jarchovský et al., Acta Metallurgica Slovaca **14**, 240 (2008).

18. А. А. Ломов, В. А. Бушуев, В. А. Караванский и др., Кристаллография **48**, 362 (2003).

19. В. И. Пунегов, Кристаллография **58**, 652 (2013).

20. A. A. Lomov, V. I. Punegov, D. Nohavica et al., J. Appl. Cryst. **47**, 1614 (2014).

21. В. И. Пунегов, Письма в ЖТФ **38**, 53 (2012).

22. V. I. Punegov, A. A. Lomov, and K. D. Shcherbachev, Phys. Stat. Sol. (a) **204**, 2620 (2007).

23. В .И. Пунегов, Письма в ЖТФ **39**, 54 (2013).

24. J. L. Eads and R. P. Millane, Acta Cryst. A **57**, 507 (2001).