Письма в ЖЭТФ, том 92, вып. 7, с. 483 – 489 © 2010 г. 10 октября

# Когерентное и диффузное рассеяния рентгеновских лучей на многокомпонентной сверхрешетке с квантовыми точками

*В. И. Пунегов*[1)], *Н. Н. Фалеев*[+]

*Коми Научный Центр Уральского отд. РАН, 167982 Сыктывкар, Россия*

[+]*Arizona State University, School of ECEE, 7700 S. River Parkway, AZ 85284, Tempe, USA*

Поступила в редакцию 13 июля 2010 г.
После переработки 23 августа 2010 г.

Методом высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии исследованы GaAs-AlAs сверхрешетки (СР) с InAs квантовыми точками (КТ), выращенные методом молекулярно-пучковой эпитаксии. Экспериментально обнаружено, что максимумы сверхструктурного диффузного рассеяния на КТ не совпадают с угловыми положениями когерентных сверхструктурных сателлитов. Для объяснения этого эффекта разработана статистическая теория дифракции на СР с учетом пространственной корреляции КТ. В рамках этой теории показано, что пиковые значения диффузной составляющей могут не совпадать с максимумами когерентного рассеяния. Проведено численное моделирование рассеяния рентгеновских лучей на многокомпонентной СР, результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными.

Эпитаксиальные самоорганизованные квантовые точки (КТ) являются уникальными объектами с точки зрения электронных, оптических и структурных свойств полупроводниковых систем [1]. В структурном плане КТ являются одним из видов локальных искажений строгого трансляционного порядка кристаллической решетки [2]. Поэтому в рентгеновской дифрактометрии КТ играют роль структурных дефектов и являются источниками диффузного рассеяния. Во всех рассмотренных моделях [3 – 6] и имеющихся экспериментальных данных [5 – 10] диффузное рассеяние рентгеновских лучей от модулированных искаженных кристаллов, включая сверхрешетки (СР) с КТ, возникает вокруг сверхструктурных сателлитов когерентного рассеяния.

В данной работе представлены экспериментальные результаты, которые показывают, что максимумы диффузного рассеяния сдвинуты относительно когерентных сверхструктурных сателлитов на некоторое угловое расстояние, определяемое параметрами КТ и прилегающих к ним эпитаксиальных слоев. Объяснению этого, ранее ненаблюдаемого эффекта, посвящена настоящая работа.

GaAs(001)-GaAs-AlGaAs-AlAs гетероструктуры лазерного типа были выращены методом молекулярно-пучковой эпитаксии на точно ориентированных (001)GaAs подложках. Схематическое изображение исследуемых гетероструктур показано на рис.1.

Основные слои – $Al_xGa_{1-x}As$ ($x_{Al} \approx 0.64$, толщина ($T$) $\approx 1.2$ мкм), GaAs ($T \approx 120$ нм), а также тонкие слои GaAs и AlAs в короткопериодных ($T_{SL} \approx 3.6$ нм) сглаживающих сверхрешетках растились при температуре $\approx 600\,^\circ$C, тогда как InAs КТ и слои GaAs, непосредственно прилегающие к ним ($\approx 5$ нм нижний и $\approx 2.5$ нм верхний), осаждались при температуре $\approx 480\,^\circ$C; поток мышьяка при осаждении КТ уменьшался в несколько раз с помощью регулируемого клапана на эффузионном источнике. Скорость осаждения InAs составляла $\approx 0.03 – 0.032$ мл/с.

Для увеличения однородности вертикального размера КТ температура подложки после осаждения верхнего прилегающего слоя GaAs повышалась до $\approx 600\,^\circ$C с целью удаления выступающей верхней части КТ [11]. Затем наращивался слой GaAs толщиной $\approx 5.0$ нм, на котором формировалась короткопериодная AlAs(1.1 нм)/GaAs(2.5 нм) сглаживающая сверхрешетка (9 пар слоев). В исследованных сверхструктурах общее количество периодов с InAs КТ составило 3, 6 и 10; полный период слоев с КТ для первых двух образцов (3 и 6 периодов) составил $\approx 54$ нм, для третьего образца (10 периодов) $\approx 48$ нм.

Рентгенодифракционные измерения проводились в Университете Делавера, США (University of Delaware, USA) на высокоразрешающем дифрактометре XPert-MRD (PANalytical) с многослойным фокусирующим зеркалом, 4-кратным Ge(220) монохроматором бартелевского типа, обеспечивающим расходимость падающего излучения $\approx 12$ угл.с, и трехкратным Ge(220) анализатором с приемной угловой апертурой $\approx 7 – 8$ угл.с. Использование рентгенооптической схемы с бартелевским монохроматором обеспечивает высокую монохроматизацию

[1)]e-mail: vpunegov@dm.komisc.ru

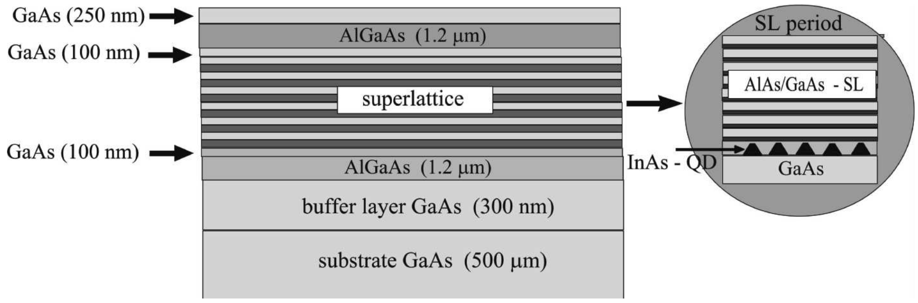


Рис.1. Схема гетероструктуры с многокомпонентной сверхрешеткой. Справа на вставке: схема структуры многокомпонентного периода сверхрешетки с квантовыми точками

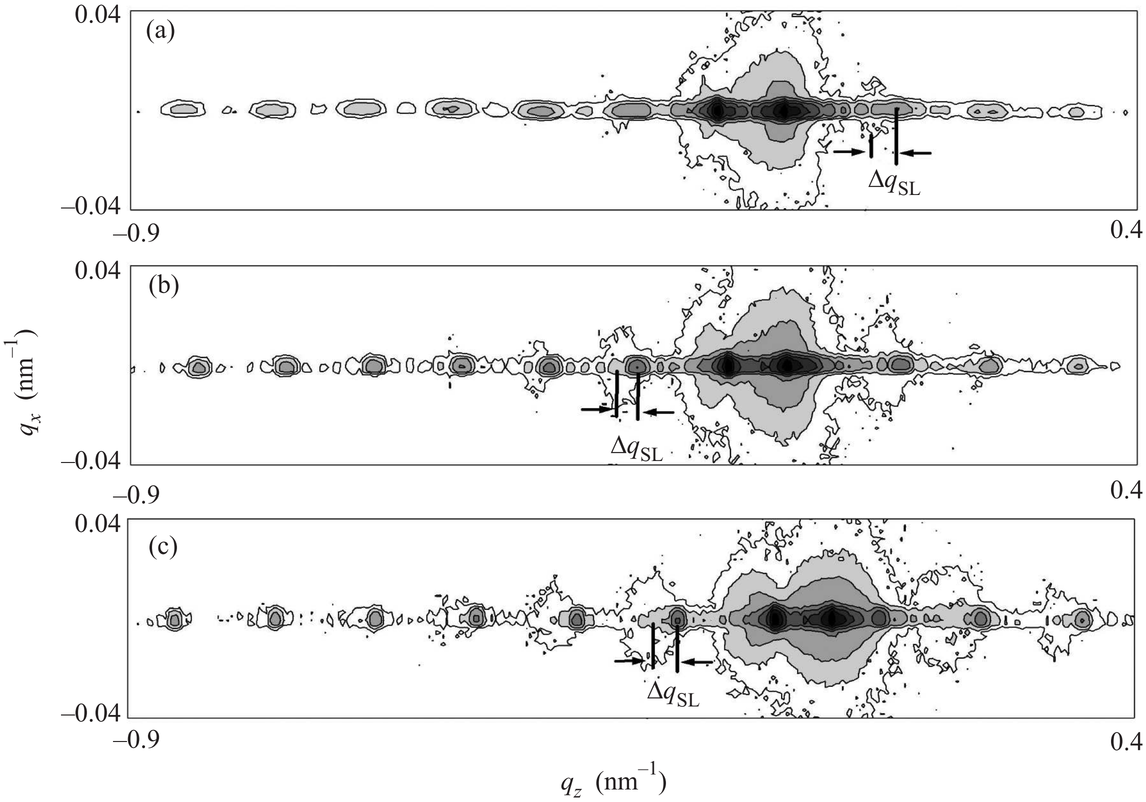


Рис.2. Экспериментальные КРИР от образцов, содержащих: (a) – 3 ; (b) – 6 и (c) – 10 периодов с квантовыми точками. Контуры равной интенсивности представлены в логарифмическом масштабе, отношение интенсивностей между соседними линиями 0.237

и коллимацию падающего $\mathrm{Cu}K_{\alpha 1}$-излучения, а высокоразрешающий анализатор позволяет пространственно разделить когерентную и диффузную компоненты рассеянного излучения для детального анализа кристаллического совершенства исследуемых объектов. Отражение GaAs(004) было использовано для измерения $\omega - 2\theta$ и $\omega$ кривых дифракционного отражения, а также карт распределения интенсивностей рассеяния (КРИР) вблизи узла обратной решетки (reciprocal space maps – RSMs). На рис.2 показаны измеренные карты для образцов, содержащих 3, 6 и 10 периодов с КТ. Если для СР с 3 периодами диффузное рассеяние от КТ проявляется слабо в силу малого числа дефектных слоев (рис.2a), то для двух других образцов явно прослеживается угловой сдвиг дифракционных пятен некогерентного рассеяния относительно когерентных пиков (на рис.2b, с сдвиг обозначен $\Delta q_{\mathrm{SL}}$).

Известно, что угловое положение как когерентного, так и диффузного пиков рентгеновского рассеяния определяется значением параметра решетки отражающих атомных плоскостей [3 – 4]. Если парамет-

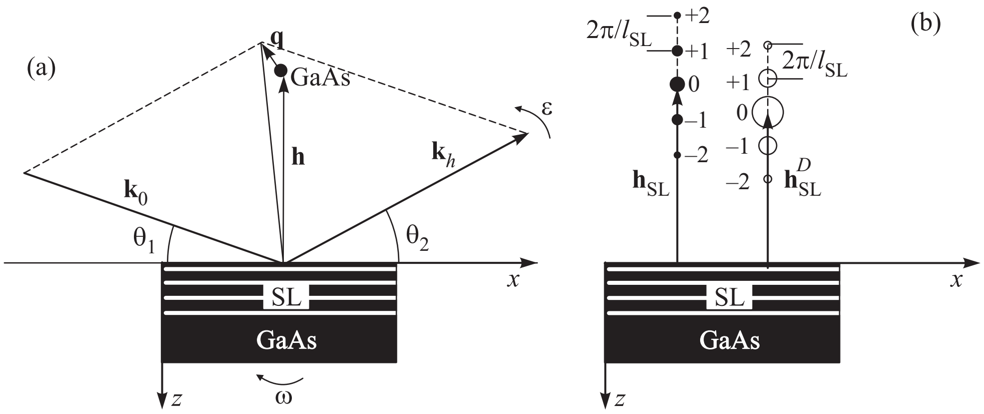


Рис.3. Схематическое изображение рентгеновской дифракции в обратном пространстве: (a) Изображение распределения интенсивности рассеяния вблизи узла обратной решетки. $\mathbf{h}$ – вектор обратной решетки подложки GaAs; (b) схематическое изображение когерентных (слева) и диффузных дифракционных порядков от многокомпонентной СР

ры решетки обоих каналов рассеяния совпадают, то совпадают и максимумы когерентного и диффузного рассеяний. В композиционных материалах (полупроводниковые твердые растворы, сплавы металлов и т.д.) среднее значение параметра решетки определяется пространственным распределением химических элементов. Так, например, для двухкомпонентной сверхрешетки межплоскостное расстояние определяется известной формулой $d_{\mathrm{SL}} = (d_1 l_1 + d_2 l_2)/(l_1 + l_2)$, где $d_{1,2}$ – межплоскостные расстояния первого и второго слоев периода СР, $l_{1,2}$ – соответственно их толщины.

Рассмотрим теперь многокомпонентную сверхрешетку, период которой состоит не из двух чередующихся слоев $(AB)$, а большего числа различных материалов $(ABC\ldots)$. Такие системы получили название политипных СР [12]. Характерным параметром такой СР является ее период, состоящий из слоев разного химического состава, а следовательно, слоев с разным параметром решетки. Пусть $d$ – межплоскостное расстояние кристаллической подложки и $d_p$ – межплоскостные расстояния отдельных слоев периода (с учетом упругой деформации при наличии несоответствия решеток), имеющих толщину $l_p$, где $p = 1, 2\ldots P$ задает номер слоя, $P$ – число слоев в периоде СР. Тогда среднее межплоскостное расстояние политипной СР запишется как [13]

$$d_{\mathrm{SL}} = \sum_{p=1}^{P} d_p l_p / l_{\mathrm{SL}}, \qquad (1)$$

где $l_{\mathrm{SL}} = \sum\limits_{p=1}^{P} l_p$ – толщина периода СР.

Рассеяние рентгеновских лучей от кристаллов удобно рассматривать в обратном пространстве, поскольку дифракция происходит от атомных плоскостей, перпендикулярных вектору обратной решетки $\mathbf{h}$. Величина этого вектора $\mathbf{h} = 2\pi/d$, где $d$ – межплоскостное расстояние подложки. Пусть $\mathbf{k}_{0,h}$ – волновые векторы падающего и отраженного рентгеновских пучков (рис.3a). В трехкристальной дифрактометрии угловое распределение интенсивности рассеяния зависит от величины проекций вектора $\mathbf{q} = \mathbf{k}_h - \mathbf{k}_0 - \mathbf{h}$, задающего отклонение вектора рассеяния от узла обратной решетки [14]:

$$q_x = (2\pi/\lambda)[(\sin\theta_1 + \sin\theta_2)\cdot\omega - \sin\theta_2\cdot\varepsilon],$$

$$q_z = -(2\pi/\lambda)[(\cos\theta_1 - \cos\theta_2)\cdot\omega + \cos\theta_2\cdot\varepsilon],$$

где $\theta_{1,2} = \theta_B \mp \varphi$ – углы, определяющие направления падающей и дифракционной волны относительно входной поверхности кристалла, $\varphi$ – угол скоса отражающих плоскостей к поверхности образца, $\lambda$ – длина волны рентгеновского излучения в вакууме, $\omega$, $\varepsilon$ – угловые отклонения образца и анализатора в используемой схеме.

Определив среднее значение межплоскостного расстояния сверхрешетки (1), можно ввести понятие вектора обратной решетки СР $\mathbf{h}_{\mathrm{SL}}$ (рис.3b), величина которого $h_{\mathrm{SL}} = 2\pi/d_{\mathrm{SL}}$. Рентгеновское излучение, когерентно рассеянное от СР, характеризуется наличием сателлитных максимумов, расположенных в обратном пространстве на расстоянии $Kn$ от максимума нулевого порядка, где $n = 0, \pm1, \pm2\ldots$ – номер дифракционных порядков, $K = 2\pi/l_{\mathrm{SL}}$.

Структура периода СР для диффузного рассеяния может отличаться от структуры периода для когерентного рассеяния (рис.4). В случае, когда СР не содержит КТ и (или) других дефектов структуры, диффузное рассеяние отсутствует. Самоорганизован-

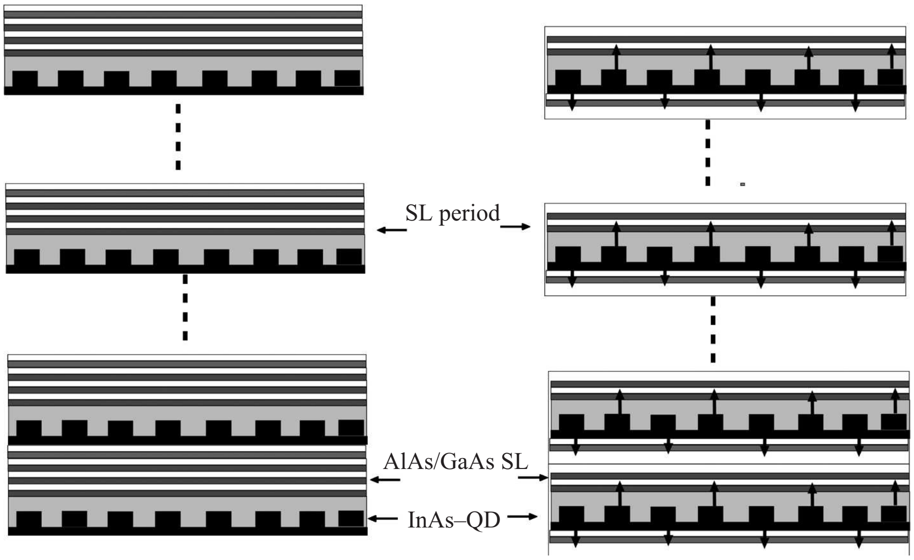


Рис.4. Модели многокомпонентной СР для когерентного (слева) и диффузного (справа) рассеяний. Толщины периодов "когерентно" и "диффузной" СР равны, однако структуры периодов отличаются. Стрелки на модели "диффузной" СР показывают распространение деформаций от КТ в вертикальном направлении и определяют дефектный участок периода СР

ные квантовые точки локально разрушают трансляционный порядок в определенном объеме кристаллической системы. В процессе дифракции эти нарушения (дефекты) случайным образом изменяют фазы рентгеновских волн и становятся источниками диффузного рассеяния [15, 16]. Важной особенностью таких структур является то, что источники диффузного рассеяния (КТ и распространяющиеся от них упругие деформации решетки) могут быть распределены не по всему объему СР, а только в определенных ее участках. Толщина этих дефектных участков, а следовательно, и композиционный (химический) состав могут отличаться от соответствующих характеристик периода политипной СР. При том, что эти участки чередуются по толщине образца с периодом, равным периоду сверхрешетки.

Пусть $S$ – число слоев периода СР ($S \le P$), образующих дефектный участок. По аналогии с (1) найдем среднее межплоскостное расстояние дефектных участков политипной СР:

$$D^D_{\mathrm{SL}} = \sum_{s=1}^{S} d_s l_s / l^D_{\mathrm{SL}}, \tag{2}$$

где $l^D_{\mathrm{SL}} = \sum\limits_{s=1}^{S} l_s$ – толщина дефектного участка. Обозначим $\mathbf{h}^D_{\mathrm{SL}}$ как вектор обратной решетки дефектных участков СР (рис.3b), величина которого $h^D_{\mathrm{SL}} = 2\pi/d^D_{\mathrm{SL}}$.

Таким образом, положение основного (нулевого) пика когерентного рассеяния в обратном пространстве будет определяться вектором $\mathbf{h}_{\mathrm{SL}}$, а положение основного максимума диффузного рассеяния – вектором $\mathbf{h}^D_{\mathrm{SL}}$. Поскольку дефектные слои в структуре СР чередуются с периодом СР $l_{\mathrm{SL}}$, то и сателлитные диффузные максимумы будут отстоять друг от друга на расстояние $K = 2\pi/l_{\mathrm{SL}}$, которое совпадает с периодом когерентных дифракционных порядков (рис.3b).

Решение для амплитудного коэффициента отражения когерентных волн от $N$-периодной политипной СР получено в [13]. Для трехкристальной схемы это решение можно записать в виде

$$R^c(q_x, q_z) = iF_c(q_z)N_c(q_z)W(q_x)\times$$
$$\times \exp\left(i(N-1)\sum_{p=1}^{P} A_p(q_z)l_p\right), \tag{3}$$

где $W(q_x)$ – параметр, характеризующий латеральную засветку поверхности образца падающим рентгеновским пучком. Интерференционная функция Лауэ политипной сверхрешетки имеет вид

$$N_c(q_z) = \sin\left(N\sum_{p=1}^{P} A_p(q_z)l_p\right) \Big/ \sin\left(\sum_{p=1}^{P} A_p(q_z)l_p\right). \tag{4}$$

Здесь $A_p(q_z) = [2\pi(d_p - d)/d_p d - q_z]/2$ – угловой параметр. Структурная амплитуда политипной СР запишется как

$$F_c(q_z) = \sum_{p=1}^{P} a_p f_p \frac{\sin(A_p(q_z)l_p)}{A_p(q_z)}\times$$

$$\times \exp\left(i\sum_{k=1}^{p-1} 2A_k(q_z)l_k + iA_p(q_z)l_p\right), \qquad (5)$$

где $a_p$ и $f_p$ – рассеивающая способность и статический фактор Дебая–Валлера слоя с номером $p$. Вычислив амплитудный коэффициент отражения по формуле (3), получаем распределение интенсивности когерентного рассеяния в обратном пространстве $I_h^c(q_X < q_z) = |R^c(q_x, q_z)|^2$.

Диффузное рассеяние от многослойной системы с квантовыми точками рассмотрено в [5] на основе теории Кривоглаза [15]. В нашем рассмотрении использован формализм статистической теории дифракции Като [16]. Этот подход, в отличие от [15], позволяет одновременно описывать когерентное и диффузное рассеяния рентгеновских лучей. Это, в свою очередь, дает возможность проводить количественный анализ экспериментальных результатов путем сравнения не только КРИР, но и $q_x$- и $q_z$-сечений вблизи узла обратной решетки.

Выражение для интенсивности диффузного рассеяния от СР в обозначениях [17] имеет вид

$$I_h^d(\mathbf{q}) = |a_h|^2(1-f^2)L(q_x,q_y)T_{\mathrm{SL}}(q_z)\tau(\mathbf{q}), \qquad (6)$$

где $a_h$ и $f$ – усредненные по толщине периода СР значения рассеивающей способности и статического фактора Дебая–Валлера, $L(q_x, q_y)$ – интерференционная латеральная площадь корреляции наноструктур,

$$T_{\mathrm{SL}}(q_z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} T_n(q_z) \qquad (7)$$

– интерференционная вертикальная длина корреляции квантовых точек в структуре СР,

$$T_n(q_z) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_z |B_n|^2 \times$$

$$\times \exp(-i[q_z - Kn - 2\pi(d_{\mathrm{SL}}^D - d)/d_{\mathrm{SL}}^D d]\rho_z) G_{\mathrm{SL}}(\rho_z) \qquad (8)$$

– корреляционная длина $n$-го дифракционного порядка (сателлита СР), $G_{\mathrm{SL}}(\rho_z)$ – корреляционная функция вертикального распределения КТ, $B_n = \frac{1}{l}\int_0^l \bar{\phi}_{\mathrm{SL}}(z)\exp(-inKz)dz$, $\bar{\phi}_{\mathrm{SL}}(z)$ описывает профиль деформации СР. Корреляционный объем $\tau(\mathbf{q})$ отвечает за диффузное рассеяние от отдельного дефекта [17] и зависит от формы, размеров КТ, а также учитывает распределение деформаций вокруг нее [17–19].

Согласно соотношениям (7) и (8), распределение диффузного рассеяния в обратном пространстве представляет собой периодическую функцию вдоль $q_z$-сечения. Период расположения диффузных максимумов $K = 2\pi/l_{\mathrm{SL}}$ совпадает с периодом когерентных дифракционных порядков.

Рентгеновское излучение когерентно рассеивается на всех $P$ слоях периода СР, при этом на несовершенных участках СР когерентная компонента ослабляется за счет уменьшения статического фактора Дебая–Валлера. Диффузное рассеяние исходит только от слоев, содержащих ядра дефектов и исходящие от них упругие деформации.

Таким образом, среднее межплоскостное расстояние сверхрешетки для диффузного рассеяния (межплоскостное расстояние дефектного участка СР) $d_{\mathrm{SL}}^D$ в общем случае может отличаться от среднего межплоскостного расстояния СР для когерентного рассеяния $d_{\mathrm{SL}}$. В результате между максимумами когерентного и диффузного рассеяний в обратном пространстве возникает угловой сдвиг $\Delta q_{\mathrm{SL}} = h_{\mathrm{SL}}^D - h_{\mathrm{SL}}$.

В случае, когда дефекты распределены во всех слоях периода, то есть $P = S$, средние межплоскостные расстояния для когерентного и диффузного рассеяний совпадают, $d_{\mathrm{SL}} = d_{\mathrm{SL}}^D$, поэтому совпадают и максимумы этих двух каналов рассеяния, то есть $\Delta q_{\mathrm{SL}} = 0$. В предыдущих исследованиях реализовывался именно этот случай. Как следствие, сдвиг между максимумами когерентного и диффузного рассеяний не наблюдался.

Расчет амплитуды когерентного рассеяния от сверхрешетки выполнен на основе решения (3). Вычисление углового распределения интенсивности когерентного излучения от всей многослойной структуры проводилось на основе рекуррентной процедуры динамической теории дифракции [20]. Диффузное рассеяние рассчитывалось по формулам (6)–(8). В процедуре численных расчетов учитывалось диффузное рассеяние от дефектов подложки (модель хаотически распределенных деформаций [15]), а также верхнего и нижнего толстых слоев AlGaAs.

На рис.5 представлены расчетные карты распределения интенсивности рассеяния рентгеновских лучей вблизи узла (004) обратной решетки GaAs для структур (рис.1), содержащих 3, 6 и 10 периодов с квантовыми точками. Видно, что угловые положения пиковых значений диффузного рассеяния сдвинуты относительно когерентных максимумов. Сравнение экспериментальных данных и расчетных КРИР (см. рис.2 и 5), а также сечений рассеяния показывает, что максимумы диффузного рассеяния сдвинуты в сторону меньших углов на величину $\Delta q_{\mathrm{SL}} = 0.025\,\text{нм}^{-1}$. Это означает, что диффузное рассеяние возникает не по всей толщине периода сверх-

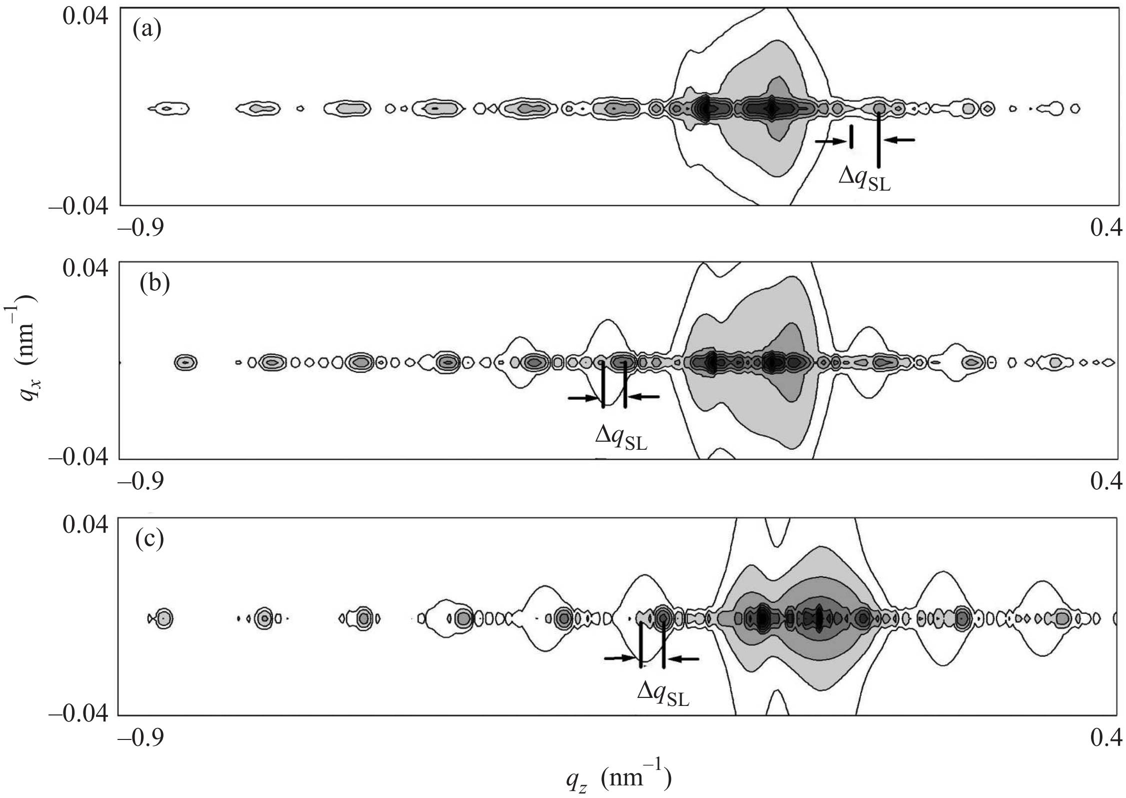


Рис.5. Расчетные КРИР от гетероструктур со СР, содержащих (a) – 3 ; (b) – 6 и (c) – 10 периодов с квантовыми точками (соответственно для образцов рис.2). Контуры равной интенсивности представлены в логарифмическом масштабе, отношение интенсивностей между соседними линиями 0.237

решетки, а только в той ее части, в которой присутствуют КТ и наведенные ими упругие деформации. В частности, результаты расчетов показывают, что в случае шестипериодной СР деформации от КТ распространяются в направлении роста на 40 нм (толщина периода 54 нм), а в случае десятипериодной СР – на 32 нм (толщина периода 48 нм).

В процессе численного моделирования учитывались такие параметры, как разброс по размерам квантовых точек, наличие деформаций вне объема наноструктур, флуктуации пространственных длин корреляции в вертикальном и латеральном направлениях. С учетом применявшейся методики осаждения и усреднения вертикального размера КТ [11] форма их была выбрана в виде усеченного конуса высотой 2.5 нм, радиусы нижнего и верхнего оснований КТ составляли 12 и 9 нм. Так как физика ростовых процессов при любых условиях роста не позволяет создать одинаковые по размерам самоорганизованные КТ, в процессе численного моделирования проводилось статистическое усреднение по высоте и радиусам КТ (метод усреднения по размерам дефектов изложен в [5, 15]). Дисперсия флуктуаций размера КТ в вертикальном и латеральном направлениях составляла 30% от высоты и радиусов наноструктур.

Кроме того, учитывалась флуктуация корреляционной длины в расположении КТ в вертикальном направлении. В нашем случае среднее значение вертикальной длины корреляции между КТ для всех образцов приблизительно равно двум толщинам периода СР, дисперсия корреляционной длины составляет четверть периода СР. Среднее расстояние между КТ находится в пределах $50 \pm 20$ нм.

В представленной работе методами высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии исследованы эпитаксиальные AlAs-AlGaAs-GaAs структуры с периодическими (3, 6 и 10 периодов) проставками, содержащими InAs КТ. Для структур с КТ экспериментально обнаружено угловое пространственное смещение диффузной и когерентной составляющих дифрагируемого рентгеновского излучения. Аналитически показано, что это смещение является результатом отличия среднего параметра решетки политипной СР и среднего параметра решетки дефектных участков СР. Полученные на основе аналитических выражений расчетные карты распределения интенсивностей рассеяния хорошо совпадают с экспериментальными данными (рис.2 и 5). Наблюдаемый эффект смещения обусловлен тем, что сглаживающие короткопериодные AlAs/GaAs сверхрешетки приводят к погашению деформаций от КТ в вертикальном направлении и, тем самым, делят период СР на совершенные и дефектные участки. Кроме того, подобного типа короткопериодные СР эффективно сглаживают поверхностный рельеф, наведенный осажденными квантовыми точками [9].

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект # 10-02-00445-а).

1. Zh. I. Alferov, Rev. Mod. Phys. **72**, 767 (2001).
2. J. Stangl, V. Holy, and G. Bauer, Rev. Mod. Phys. **76**, 725 (2004).
3. В. И. Пунегов, ФТТ **32**, 2476 (1990); V. I. Punegov, Sov. Phys. Solid State **32**, 1438 (1990).
4. В. И. Пунегов, К. М. Павлов, Кристаллография **38**, N 5, 34 (1993); V. I. Punegov and K. M. Pavlov, Crystallogr. Rep. **38**, 602 (1993).
5. A. A. Darhuber, P. Schittenhelm., V. Holý et al., Phys. Rev. B **55**, 15652 (1997).
6. V. I. Punegov, Y. I. Nesterets, and V. D. Roshchupkin, J. Appl. Cryst. **43**, 520 (2010).
7. N. Faleev, K. Pavlov, M. Tabuchi, and Y. Takeda, Jpn. J. Appl. Phys. **38**, 818 (1999).
8. Н. Н. Фалеев, К. М. Павлов, В. И. Пунегов и др., ФТП **33**, 1359 (1999); N. N. Faleev, K. M. Pavlov, V. I. Punegov et al., Semiconductors **33**, 1229 (1999).
9. Н. Н. Фалеев, Ю. Г. Мусихин, А. А. Суворова и др., ФТП **35**, 969 (2001); N. N. Faleev, Yu. G. Musikhin, A. A. Suvorova et al., Semiconductors **35**, 932 (2001).
10. G. Springholz and V. Holy, *Lateral Alignment of Epitaxial Quantum Dots*, Springer, Berlin, 2007, p. 247.
11. Z. R. Wasilewski, S. Fafard, and J. P. McCaffrey, J. Crystal Growth **201/202**, 1131 (1999).
12. L. Esaki, L. L. Chang, and E. E. Mendez, Jap. J. Appl. Phys. **20**, L529 (1981).
13. В. И. Пунегов, Я. И. Нестерец, Письма в ЖТФ **20**, N 16, 62 (1994); V. I. Punegov and Ya. I. Nesterets, Tech. Phys. Lett. **20**, 674 (1994).
14. Ya. I. Nesterets and V. I. Punegov, Acta Cryst. A **56**, 540 (2000).
15. М. А. Кривоглаз, *Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах*, Киев: Наук. думка, 1983; M. A. Krivoglaz, *X-ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals*, Berlin: Springer, 1996.
16. N. Kato, Acta Cryst. A **36**, 763 (1980).
17. В. И. Пунегов, Кристаллография **54**, 415 (2009); V. I. Punegov, Crystallography Reports **54**, 391 ((2009).
18. V. Nenashev and A. V. Dvurechenskii, J. Appl. Phys. **107**, 064322(1-8) (2010).
19. R. Maranganti and P. Sharma, *Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology*, American Scientific Publishers, Valencia, CA, Chap. **118**, p. 1-44, 2006.
20. V. I. Punegov, Phys. Stat. Sol. (a) **136**, 9 (1993).