

УДК 548.4+548.734

В.М.Мельник, В.І.Богачевський

Луцький національний технічний університет.

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДИФРАКЦІЇ РЕНТГЕНІВСЬКИХ ПРОМЕНІВ В МОНОКРИСТАЛІЧНОМУ СЕРЕДОВИЩІ З ТОНКИМ ГЛАДКО-ГРАНИЧНИМ ПЛАНАРНИМ ДЕФЕКТОМ

Досліджувалась топологія екстинкційних маятникових смуг інтенсивності дифрагованих рентгенівських променів в дельті Бормана у випадку брегівської геометрії дифракції на основі комп'ютерного моделювання планарних дефектів та чисельного розв'язування рівнянь Такагі-Топена. У випадку тонкого шару з плоскими межами виявлено особливості дифракції рентгенівських променів на межі дефекту. Встановлено явище багаторазового відбиття блохівських хвиль від поверхні дефекту, каналювання енергії хвильових полів вздовж межі поділу, ефект незалежного сплеску інтенсивності від меж планарного дефекту в просторовому розподілі інтенсивності дифрагованого випромінювання вздовж поверхні кристалу, що допомагає визначити положення дефекту.

Ключові слова: *дифракція, топограма, планарний дефект структури, заборонений шар, просторовий розподіл інтенсивності.*

Постановка проблеми. Дифракція рентгенівських променів на відбиття (в геометрії Брега) добре відома і неодноразово аналізувалася як теоретично так і експериментально [1-3]. На відміну від випадку дифракції на проходження (в геометрії Лауе), в геометрії Брега існують декілька важливих особливостей: головний максимум дифракції формується в тонкому при поверхневому шарі, що рівний довжині лінії екстинкції, а дифрагована інтенсивність максимумів слабо чутлива до деформацій кристалічної ґратки.

Не дивлячись на всі перераховані обмеження брегівської схеми дифракції експериментально були виявлені деякі корисні властивості її для дослідження дефектів [4-6]. Була також представлена теорія кількісного аналізу топографічних зображень [7] окремих дефектів з кулонівським законом розподілу деформацій, а також проаналізовані вклади самих механізмів, що беруть участь в формуванні топографічного зображення. Поряд з цим, обговорювалися можливості секційної топографії при з'йомці в геометрії на відбиття [8], які ще не так широко використовуються в експерименті. Було також проаналізовано, що хоча для спостереження маятникових коливань дифрагованої інтенсивності в цій схемі дифракції потрібне дотримання досить жорстких дифракційних умов [9-12], проте в ряді випадків може бути отримана досить корисна інформація про дефектну структуру в тонких при поверхневих шарах.

До класу специфічних планарних дефектів в твердотільних середовищах відносяться і захоронені шари – складний тип спотворення кристалічної ґратки, що виникає внаслідок іонного бомбардування монокристалу, який являє собою сукупність точкових дефектів і їх комплексів, локалізованих в першому наближенні на строго визначених глибинах в межах деякого плоского шару, паралельного поверхні кристалу. При розподілі прискорених частинок по швидкостях вони закінчують свій шлях в кристалі на дещо різних глибинах і їх границя ніяк не являється плоскою.

Одним із можливих підходів для вивчення природи взаємодії рентгенівських хвиль з планарними дефектами являється проблема комп'ютерного моделювання дифракційного експерименту за допомогою чисельного розв'язання рівнянь Такагі-Топена [21,22]. Вказаний метод дозволяє визначити оптимальні дифракційні умови експерименту і прогнозувати характер очікуваних результатів.

Аналіз останніх досліджень. Досить вигідна для трактування експериментальних результатів теорія дифракції рентгенівських променів в геометрії Брега на кристалі з однорідно розподіленими мікродефектами, представлена авторами в [13,14]. В [15,16] розглядається дифрактометричний підхід до діагностики структурної досконалості монокристалів із статистично однорідно розподіленими мікродефектами, який базується на аналізі дифрагованого випромінювання, розсіяного за межами головного брегівського максимуму, де додаткова складова інтенсивності, що реєструвалася вздовж поверхні кристалу лічильником гоніометра, мала зв'язок з некогерентним або дифузним розсіюванням рентгенівських променів на дефектах кристалічної решітки. Тут було

© В.М.Мельник, В.І.Богачевський

продемонстровано, що для отримання інформації про дефектну структуру по об'єму кристалу необхідне виконання умови:

$$\Lambda \ll L_{\text{abs}} \cong \frac{1}{\mu} \quad (1)$$

де L_{abs} - довжина абсорбції; μ - фотоелектричний коефіцієнт поглинання. Необхідно також щоб розбіжність падаючого променя α в експерименті не перевищувала ширину дифракційного максимуму ω .

Однак в кристалах існують не тільки точкові дефекти, але і двовимірні (планарні) дефекти структури, такі як дефекти упаковки, захоронені шари точкових дефектів структури, які виникають на кінці траєкторії гальмуючих в кристалі високоенергетичних іонів. Так на прикладі [17] такого роду спотворення структури на прикладі дефектів упаковки досліджувались в наближенні плоскої падаючої хвилі в геометрії на проходження (Лауе). В [18-20] в цій же геометрії також розглядалися різноманітні дифракційні ефекти на дефектах упаковки, що паралельні відбиваючим площинам. Така структурна недосконалість в даних умовах відіграла роль своєрідного хвилевода для рентгенівських блохівських хвиль при умові, якщо він розміщений поблизу центра дельти Бормана. По мірі віддалення дефектів упаковки від центра помітним стає ефект дзеркального відображення блохівських хвиль від площини дефекта упаковки. Тут слід відмітити аналогію між впливом границь дефекту упаковки, який розміщений паралельно площині відбивання і границі кристал-вакуум на характер розподілу блохівських хвиль в геометрії Лауе.

Основним методом досліджень дифракційних явищ в кристалах з планарними дефектами являється чисельне розв'язання рівнянь Такагі-Топена [21,22] у вигляді:

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_0(r)}{\partial S_0} &= -i\pi k C \chi_H D_H \\ \frac{\partial D_H(r)}{\partial S_H} &= -i\pi k C \chi_H D_0(r) + i\pi k \beta_H D_H(r), \end{aligned} \quad (2)$$

де D_0 і D_H – компоненти блохівського хвильового поля; χ_H , C , k – відповідно коефіцієнт Фур'є поляризованості кристалу, фактор поляризації ($C = 1$ для σ -поляризації) і хвильовий вектор рентгенівських променів для заданої довжини хвилі ($k = \lambda^{-1}$). Параметр β_H характеризує відхилення кристалічних площин від точного брегівського положення під впливом поля деформацій $U(r)$ і рівний

$$\beta_H = \frac{\partial(H(U(r)))}{\partial S_H}. \quad (3)$$

де H – вектор оберненої ґратки діючого відбиття. Координати S_0 і S_H – вимірюються вздовж напрямків падаючого і відбитого променів відповідно. Рівняння Такагі-Топена розв'язувались шляхом побудови сітки інтегрування із застосуванням алгоритму [22]. Використовувалось наближення досить вузької (~ 1 мкм) сферичної падаючої хвилі рентгенівських променів.

Об'єктом дослідження був вибраний монокристалічний кремній. Для моделювання використовувалось також симетричне відбиття 400, $\text{AgK}\alpha_1$ – випромінювання, що забезпечувало виконання дифракційної умови, поданої в (1). В якості модельного виду планарних дефектів структури був вибраний гіпотетичний тонкий захоронений шар, який складався з точкових дефектів і був локалізований на визначеній глибині паралельно до поверхні кристалу і відбиваючих площин. В рамках алгоритму [22] враховувались не поля деформацій від індивідуальних точкових дефектів, що склали захоронений шар, а в зв'язку з усередненням останніх, розраховувалось поле деформацій від захороненого шару в цілому. Тобто в цілому подавалась наступна спрощена модель поля спотворень захороненого шару:

$$U(r) \sim \frac{A}{r^{3/2}}, \quad (4)$$

спадаючого більш плавно порівняно з полем окремих кулонівських дефектів. Константа A визначала потужність захороненого шару, а r – нормальну відстань до поверхні від точки в об'ємі кристалу до границі захороненого шару. Градієнт деформацій у випадку рівномірного розподілу точкових дефектів всередині захороненого шару, в першому наближенні приймався рівним нулю.

Розглядався плоский тонкий дефект з однорідним розподілом точкових дефектів (з «гладкими» границями) товщиною $L_1 = 1$ мкм, який знаходився на глибині 20 мкм. Відмітимо, що така товщина гіпотетичного шару набагато менша екстинкційної довжини, яка для наших дифракційних умов складала $\Lambda_0 \approx 55,4$ мкм.

Розрахунок градієнта деформацій для рівнянь Такагі-Топена здійснювався на основі закону розподілу полів спотворень за законом, поданим в формулі (3).

Досліджувався розподіл інтенсивності дифрагованого випромінювання як по поверхні кристалу, так і в дельті Бормана.

Постановка задачі. Усі змодельовані криві інтенсивності дифракції рентгенівських променів пройшли комп'ютерну обробку. Для цього були задіяні програмні забезпечення Mathcad і Microcal Origin, де введені дані з розв'язку рівнянь Такагі-Топена служили базою їх побудови. Було також змодельовано поведінку інтенсивності в дельті Бормана та оптичні ефекти взаємодії рентгенівських променів на межі поділу планарного дефекту з гладкою границею та кристалічною матрицею за допомогою попередньої підготовки даних в програмі Mathcad і побудови топографічної картини в програмі Corel Draw.

Таким чином, основною метою даної роботи стояло вивчення методом чисельного розв'язку рівнянь Такагі-Топена рентгенооптичних ефектів у випадку дифракції на відбиття в монокристалах, що містять тонкий плоский планарний дефект з «гладкою» границею розділу.

Основна частина. Результати досліджень по впливу тонкого захороненого шару з гладкими границями на маятникові коливання інтенсивності приведені на рис.1 і рис.2. На рис.1 (топограма) представлено розподіл дифрагованої інтенсивності $|D_H|^2$ рентгенівського випромінювання в трикутнику Бормана. Деякі рентгенооптичні ефекти, які проявляються на прикладі даної моделі, представлені на додатку цього рисунку. На топограмі досить добре видно слід AA', який зображає захоронений тонкий шар. При цьому досить контрастно виражена область пересікання падаючого пучка рентгенівських променів з планарним дефектом. В топографії такий вид зображення дефекту носить назву прямого або кінематичного зображення. Здвоєні світлі полоси, що позначені на рисунку S₁ і S₂, відповідають відбитим від верхньої і нижньої границь захороненого шару рентгенівським променям.

В цілому, взаємодія рентгенівських променів з гладким захороненим шаром носить когерентний характер. При цьому, на границях планарного дефекту, де градієнт поля деформацій особливо високий, реалізується комплекс рентгенооптичних ефектів, які також характерні для випадку, коли границею розділення є кристал-вакуум чи кристал-дефект упаковки. Раніше ці ефекти спостерігалися в випадку Лауе-дифракції при умові, коли планарний дефект, який знаходиться в кристалі, паралельний сімейству дифрагуючих площин [18,19]. Так на границях розділу захороненого шару від матриці спостерігається дзеркальне відбиття блохівських хвиль, що проявляється в симетрії картини хвильових биттів інтенсивності відносно умовного сліду AA'. При цьому добре спостерігається ефект багаторазового дзеркального відбиття від границь розділу, що показано на вставці до рисунку. Ефекти підсилення інтенсивності дифрагованих променів візуально проявляються в світлих тонах областей над слідом захороненого шару. Це досягається за рахунок реалізації хвильового механізму для рентгенівських блохівських хвиль, які поширюються вздовж границі планарного дефекту [18-20].

На рис. 2. (дифрактограма) представлено розподіл інтенсивності дифрагованого випромінювання вздовж вихідної поверхні кристалу, в якому присутній захоронений шар. Форма і положення першого (D₁) і другого (D₂) динамічного максимумів інтенсивності, представлені в даному графіку, повністю співпадають з висновками динамічної теорії дифракції рентгенівських променів в геометрії Брега для досконалого кристалу [3]. Додаткові максимуми S₁ і S₂, які сформовані в точках виходу на поверхню сильних хвиль, зародились в області перетину границь захороненого шару з первинним проникаючим пучком рентгенівських променів (пряме кінематичне зображення). Координата максимуму першого піку $x=0,019$ см відповідає слідуєчій геометричній умові:

$$x = \frac{2Y_L}{\text{tg}\theta_B} \quad (5)$$

де Y_L – глибина залягання границі захороненого шару, θ_B – кут Брега. Отже за положенням додаткових максимумів при аналізі дифрагованих рентгенівських променів від координати на поверхні кристалу можна привести оцінку глибини залягання планарного дефекту. При цьому, важливою дифракційною умовою являється і можливість геометричного розподілу головного і додаткового динамічних піків:

$$Y_L \geq \frac{\Lambda_0}{2} \operatorname{tg} \theta_B. \quad (6)$$

В наведеній моделі величина Y_L складає приблизно 5 мкм.

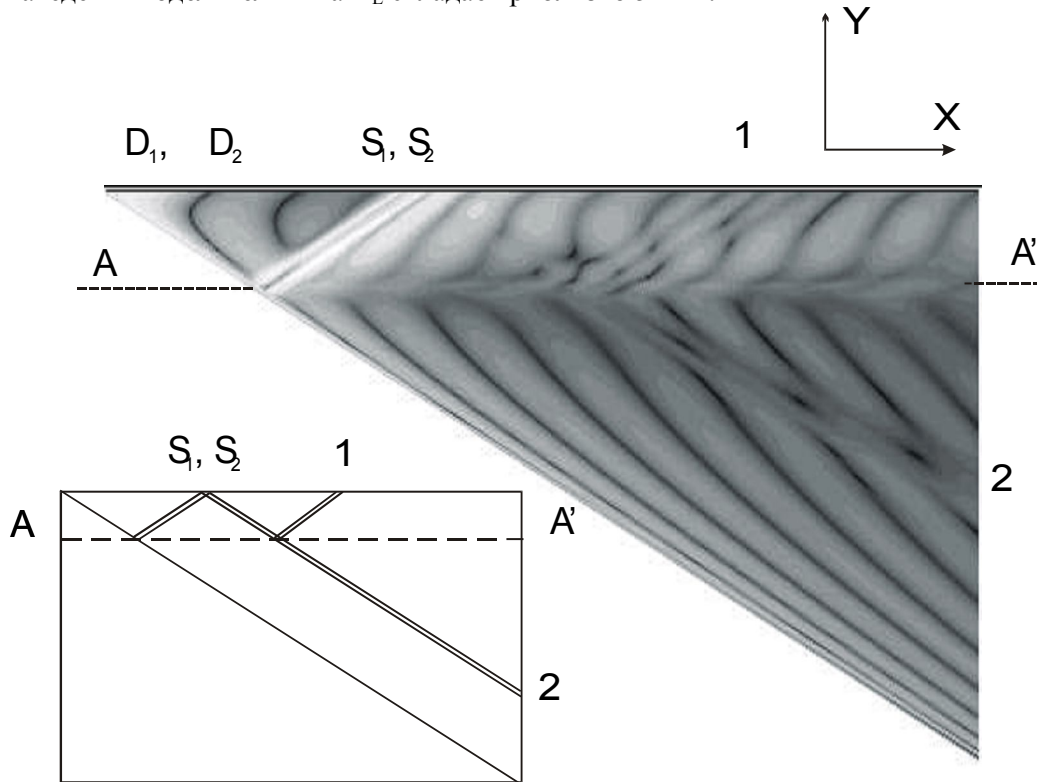


Рис. 1. Топографічний розподіл інтенсивності $|D_H|^2$ дифрагованого випромінювання в трикутнику Бормана для тонкого захороненого шару з гладкими границями в кристалі Si, локалізованого на глибині 20 мкм, при використанні Ag $K_{\alpha 1}$ - випромінювання, 400-симетричне відбиття. На вставці представлені траєкторії сильних хвиль, які зазнали багатократного дзеркального відбиття.

Результати розрахунку розподілу інтенсивності дифрагованого випромінювання вздовж вихідної поверхні кристалу для захороненого шару, який знаходиться на вказаній критичній глибині $Y_L=5$ мкм, представлені на рис.3. Цей випадок представляє значний практичний інтерес, оскільки реальні кристали, в яких знаходяться захоронені шари, обумовлені імплантацією іонами середніх енергій 100-500 кеВ приблизно поводять себе таким же чином. Глибини залягання захоронених шарів в кристалах, які опромінювались іонами з указаною енергією, складають від одиниць до десятків мкм.

З наведеної дифрактограми на рисунку видно, що стрибки інтенсивності S_1 і S_2 від такого шару локалізуються на місцях, де розміщений динамічний максимум D_1 Урагамі.

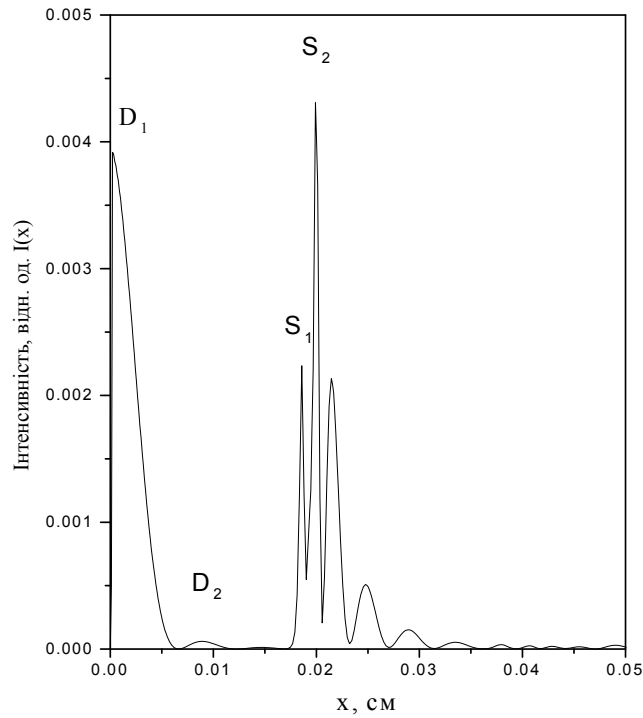


Рис.2. Розподіл інтенсивності дифрагованого випромінювання вздовж вихідної поверхні кристалу в випадку тонкого захороненого шару з гладкими границями. D_1 і D_2 - динамічні максимуми Урагами, S_1 і S_2 - "пряме зображення" границь захороненого шару.

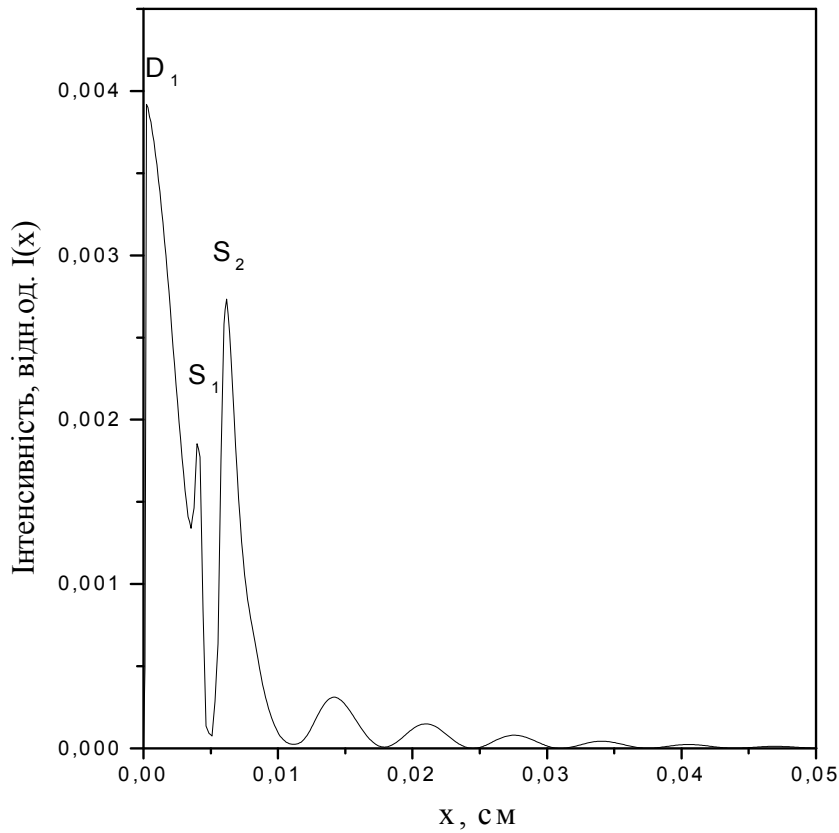


Рис.3. Розподіл інтенсивності дифрагованого випромінювання вздовж вихідної грані кристалу в випадку тонкого захороненого шару, локалізованого на глибині 5 мкм, з гладкими границями.

Висновки і перспективи. Підводячи підсумки слід відмітити з нашої точки зору найбільш важливі закономірності топології маятникових коливань інтенсивності рентгенівських променів у випадку брегівської геометрії дифракції в кристалі кремнію, який містить гладкограничні плоскопаралельні планарні спотворення кристалічної решітки у вигляді імплантованого шару, виявлені при моделюванні дифракційного експерименту методом чисельного розв'язання рівнянь Такагі-Топена. Для однорідного поля деформацій вздовж границь планарного дефекту (гладкі границі розділу) виявлені такі особливості дифракції рентгенівських променів:

- взаємодія рентгенівського хвильового поля з планарним дефектом носить когерентний характер (відбиті хвилі зберігають перевагу первинних коливань, а також їх періодичність);

- кожна границя захороненого шару взаємодіє з нульовим (падаючим) пучком рентгенівських променів незалежно, формуючи власне пряме дифракційне зображення на вихідній поверхні кристалу;

- встановлено багаторазове дзеркальне відображення блохівських хвиль від границь планарного дефекту, а також явище переносу енергії нульового пучка рентгенівських променів вздовж його границь.

- сукупність отриманих результатів дозволяє зробити висновок про подібність механізмів розсіяння рентгенівських променів на планарних дефектах з гладкими границями з дифракційними механізмами, що проявляються на границях розділу середовищ кристал-вакуум і границях дефектів упаковки.

1. Batterman B.W., Cole H. Dynamical diffraction of X-ray by perfect crystals. // Rev. Mod. Phys.-1964.-v.36, №3.-P.681-717.
2. Urugami T.S. Pendellosung fringes of X-rays in Bragg case // J. Phys. Soc. Jap.-1969.-v.27, №1.-P.147-154.
3. Пинскер З.Г. Рентгеновская кристаллооптика.-М.: Наука,1982.-392с.
4. Holy V. Dynamical X-ray diffraction from crystals with precipitates. 1. Theory of the Bragg case. // Acta Crystallogr. A.-1984.-v.40, №6.-P.675-679.
5. Кютт Р.Н. Брэгговская дифракция рентгеновских лучей в кристаллах с дислокациями. // Кристаллография.-1988.-т33,в.4.-С.827-830.
6. Shull C.G. Perfect crystals and imperfect neutrons. // Acta Cryst.-1973.-v.6, №4.-P.257-266.
7. Каганер В.М., Иденбом В.Л. Рентгено топографические изображения микродефектов при дифракции по Бреггу. // Кристаллография.-1987.-т32,в.2.-С.297-304.
8. I.L.Shul'pina // Conf. High Resolution X-Ray Diffraction and Topography: Abstracts (9-11 Sept. 1998).- University of Durham, UK, 1998.
9. Zaumzeil P. Investigations of crystal defect with reflection-section topography. // Krist. und Techn.-1978.-v.13, №8.-S.983-989.
10. Zielinska-Rohosinska E. X-ray section topography in the Bragg case. // Phys. Stat. Sol.-1980.-A.59, №1.-P.317-322.
11. Петрашень П.В., Чуховский Ф.Н., Шульпина И.Л., Кютт Р.Н. Новый тип интерференционных полос на брегговских секционных топограммах. // ФТТ.-1987.-т.29, №5.-С.1608-1613.
12. Lang A.R. and Mai Zhen-Hong P. Pendellosung interference in the Bragg reflexion of X-rays from a crystals surface. // Proc. R. Soc., London.-1979.-A368.-P.313-329.
13. Барьяхтар В.Г., Гаврилова Е.Н., Молодкин В.Б. и др. Брэгг-дифракция в реальных поглощающих монокристаллах конечной толщины. // Металлофизика.-1992.-т.14, №11.-С.68-79.
14. Барьяхтар В.Г., Немошкаленко В.В., Молодкин В.Б. и др. Брэгг-дифракция в реальных поглощающих монокристаллах конечной толщины. III. Полная интегральная отражающая способность. // Металлофизика.-1993.-т.15, №12.-С.18-26.
15. Entin I., Khrupa V. Spatial intensity profile of X-ray beam reflected from nearly perfect silicon and diffuse scattering measurement. // J. Appl. Crust.-1991.-v.24.-P.403-404.
16. Мачулин В.Ф., Хрупа В.И. Рентгеновская диагностика структурного совершенства слабо искаженных кристаллов.-К.: Наукова думка,1995.-192с.
17. Sauvage M., Malgrange C. X-ray diffraction investigations of structure of silicon single crystals after irradiation by heavy ions. // Phys. Stat. Sol.-1970.-v.37.-P.759-771.

- 18.Иденбом В.Л., Чуховский Ф.Н. Рентгеновское изображение дефекта упаковки, перпендикулярного поверхности кристалла. I. // Кристаллография.-1974.-т.19,в.1.-С.35-41.
- 19.Иденбом В.Л., Слободецкий И.Ш. Рентгеновское изображение дефекта упаковки, перпендикулярного поверхности кристалла. II. // Кристаллография.-1974.-т.19,в.1.-С.42-53.
- 20.Э.В.Суворов, К.Ю.Мухин // Матер. VI совещ. по динамическим эффектам рассеяния рентгеновских лучей и электронов.-Ленинград, 1997.-с.42.
- 21.Uragami T.S. Pendellung fringes in a finite crystal. // J. Phys. Soc. Jap.-1971.-v.31, №4.-P.1141-1161.
- 22.Epelboin Y., Riglet P. Boundary conditions in the numerical integration of Takagi-Taupin equations. Application to the Laue and Bragg case. // Phys. Stat. Sol. (a).-1979.-v.54, №2.-P.547-552.