

Х-ПРОМЕНЕВА ТОПОГРАФІЯ ДИСЛОКАЦІЙНИХ ПЕТЕЛЬ У КРИСТАЛАХ КРЕМНІЮ

Проведено чисельне моделювання топографічних X -променевих зображень окремих ковзаючих і призматичних дислокаційних петель у кристалі кремнію в геометрії Лауе. Показано, що для різних кристалографічних і просторових розміщень відбуваються значні трансформації дифракційних зображень дислокаційних петель.

The simulation of topographic images of single gliding and prismatic dislocation loops in the silicon crystal in the Laue geometry is performed. It is shown, that in the case of different crystallographic and space location the significant transformations occur.

Вступ

Сучасні досягнення у технології вирощування високодосконалих монокристалів германію і кремнію дозволяють позбавлятися від об'ємних, плоских і лінійних дефектів. Проте, як свідчать експериментальні дослідження, для бездислокаційних кристалів характерна велика густина мікроефектів. Це пояснюється відсутністю стоків для надлишку точкових дефектів. У дислокаційних кристалах кремнію точкові дефекти концентруються на дислокаціях, а в бездислокаційних утворюють скупчення – кластери, які класифікують за розмірами і за особливостями їх декорації домішками: A -кластери розмірами ~ 50 – 100 мкм, B -кластери ~ 3 – 10 мкм і ще більш мілкі C -кластери – менші за 1 мкм [1-3].

Оскільки мікроефекти мають відносно мале і швидкоспадне поле деформацій, то однокристалні топографічні методи виявляють мікроефекти у товстих кристалах тільки після спеціального декорування домішками.

Також мікроефекти вдається виявити максимально ослабивши динамічну дифракцію у кристалі для того, щоб народжена хвиля проявилася на фоні послабленого правильного відбивання. В праці [4] будується теорія формування зображень мікроефектів. Показано, що при достатньо високій колімації падаючого променя можна не тільки виявити такі дефекти, але й отримати зображення їх пружних полів практично без дифракційного розмиття. Причому включення в ізотропному наближенні описується сферично-симетричним полем зміщень. Автори [5] встановлюють кількісне співвідношення між розмірами кінематичного зображення та розмірами включення. А застосування асиметричних відбивань

при дослідженні мікроефектів у кремнії за допомогою плоскохвильової двокристалної X -променевої топографії збільшує чутливість методу і дозволяє виявити малі за розмірами мікроефекти [6].

Поле зміщень для призматичної дислокаційної петлі у нескінченно малій апроксимації, при якому зображення не зникає навіть при $(\vec{h}\vec{b})=0$, хоча воно і набагато слабше за випадок $(\vec{h}\vec{b})\neq 0$, розглянуто в праці [5].

Природа X -променевого зображення дислокацій у сильнопоглинаючих кристалах вивчалася в [7], де доводиться, що виникаючий у цьому випадку тінювий контраст пов'язаний не з поглинанням блохівських хвиль, а з міжзонним розсіянням, що порушує проходження блохівських хвиль, які слабо поглинаються, поблизу ядра дислокації. Показано, що інтегральна інтенсивність не залежить від умов експерименту і визначається тільки величиною $(\vec{h}\vec{b})$, причому інтегральна яскравість дислокації для $(\vec{h}\vec{b})=1$ на 50% перевищує яскравість зображення для випадку $(\vec{h}\vec{b})=2$. Запропонований метод визначення типу дислокацій по інтегральній яскравості зображення дислокацій, що вимірюється за X -променевими топограмами у випадку дифракції на проходженні.

Взагалі, ростові мікроефекти в кристалах кремнію є концентраторами напруг кристалічної ґратки і за певних умов можуть стати джерелами дислокацій. Іноді ці умови реалізуються при вирощуванні кристалів. Але умови для проявлення дислокаційної активності мікроефектів можуть бути реалізовані при технологічних обробках

кремнію в процесі виготовлення приладів на його основі.

З метою отримання інформації про джерела дислокацій, що знаходяться в об'ємі кристалів, у праці [8] за допомогою методів *X*-променевої топографії вивчалися дислокаційні петлі, генеровані мікродфектами, а також інші характеристики мікродфектів, які важливі для розуміння їх природи, типів, механізмів утворення. В усіх зразках з *A*-, *B*- та *D*-мікродфектами досягнута генерація дислокаційних петель об'ємними джерелами. Петлі утворювали скупчення, але в тих випадках, коли спостерігалися окремі, великі, ні з чим не зв'язані петлі, вони мали переважно гексагональну форму і були ковзаючими з вектором Бюргерса $a/2\langle 110 \rangle$ [8].

На даний час досить широко використовуються методи моделювання дифракційних процесів у реальних кристалах, що містять дефекти кристалічної будови. Кількісні й якісні розподіли деформаційних полів в областях локалізації дефектів на *X*-променевих секційних і проєкційних топограмах визначаються шляхом зіставлення чисельно змодельованих і експериментально отриманих зображень [4,5].

Розрахунок *X*-променевих зображень базуються на основі динамічної теорії розсіяння *X*-променів – системі диференціальних рівнянь в частинних похідних зі змінними коефіцієнтами – рівняннями Такагі [9,10]. Оскільки у більшості випадків ці рівняння не мають аналітичних розв'язків, то моделювання топографічних зображень різного типу дефектів здійснюється за допомогою методів їх чисельного розв'язку [11].

Мета даної роботи – проведення на основі рівнянь Такагі чисельного розрахунку дифракційних зображень дислокаційних петель на секційних топограмах і дослідження впливу їх розмірів та концентрації на відбивну розсіюючу здатність кристала в цілому.

1. Моделі дислокаційних петель

Найпростішу модель дислокаційної петлі (ДП) можна побудувати у вигляді сферично симетричних включень різних розмірів і потужностей [12]. Геометрично таку петлю можна представити у вигляді кола [13]. Водночас, у будь-якому кристалі дислокації і ДП не можуть бути довільно розташовані. Отже, необхідно враховувати особливості кристалічної будови і прив'язувати саму модель до кристалографічної системи координат.

Для кристалів з ґраткою типу алмаза відомо, що найкоротша відстань між двома еквівалентними атомами у напрямку $\langle 110 \rangle$ є половина діагоналі грані куба. Дислокації, для яких вектор

Бюргерса \vec{b} паралельний цьому напрямку, є енергетично найбільш вигідним, а будь-яке переміщення у ґратці алмаза можна розглядати як суму послідовних трансляцій у напрямках $\langle 110 \rangle$ [14]. Для кремнію є типовими найпростіші дислокації, вектор Бюргерса яких дорівнює $\vec{b} = a/2 \langle 110 \rangle$, тобто:

1. гвинтова дислокація;
2. 60-градусна дислокація з вектором Бюргерса, розміщеним під кутом 60° до напрямку вісі дислокації;
3. крайова дислокація, що знаходиться у площині ковзання $\{100\}$.

Отже, представлення ДП у вигляді гексагона на рис. 1а-г, сегменти якого зорієнтовані вздовж напрямків $\langle 110 \rangle$ (60-градусні дислокації), а вектори Бюргерса $\vec{b} = a/2 \langle 110 \rangle$ кожного дислокаційного відрізка лежать у площині петлі, на наш погляд, є найбільш імовірним модельним представленням ковзаючої ДП [15,16]. Позначення b_1^+ , b_1^- , b_2^+ , b_2^- відповідають чотирьом можливим орієнтаціям векторів Бюргерса.

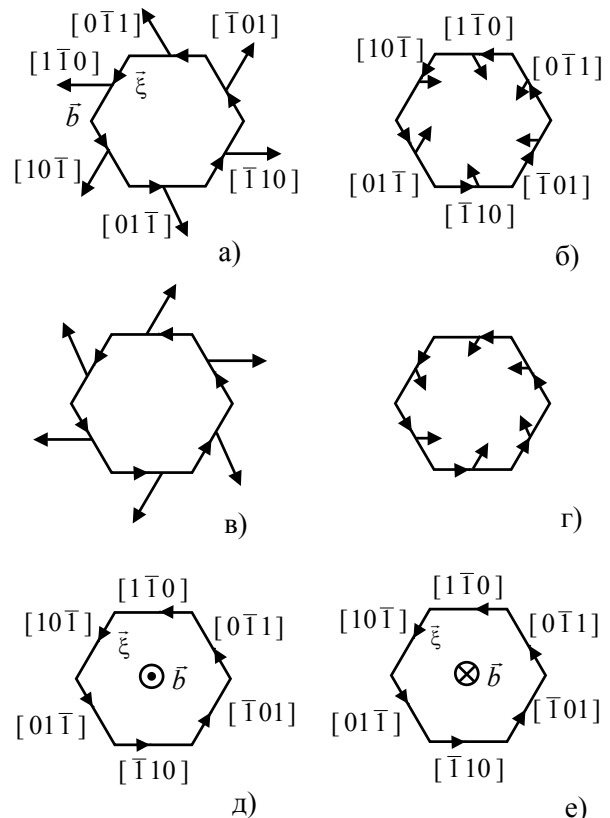


Рис. 1. Моделі дислокаційної петлі у вигляді гексагона з 60-градусних дислокацій: ковзаюча b_1^+ (а), b_1^- (б), b_2^+ (в), b_2^- (г), призматична (д,е). ξ – напрям дислокаційної лінії, \vec{b} – вектор Бюргерса.

Для призматичних дислокаційних петель найбільш імовірними моделями є представлення ДП на рис.1д,е.

Відомо, що функція локальних розорієнтацій $\alpha(\vec{r})$, яка входить у рівняння Такагі, пропорційна похідній за напрямком \vec{s}_h від скалярного добутку вектора дифракції та вектора зміщення $\vec{U}(\vec{r})$ [1]:

$$\alpha(\vec{r}) \sim \frac{\partial(\vec{h}\vec{U})}{\partial\vec{s}_h}. \quad (1)$$

Оскільки похідна за напрямком є величина скалярна і дорівнює проекції градієнта на напрямок, то в різних системах координат її значення є однаковим:

$$\frac{\partial(\vec{h}\vec{U})}{\partial\vec{s}_h} \equiv \frac{\partial(\vec{h}'\vec{U}')}{\partial\vec{s}'_h}. \quad (2)$$

Для ізотропного середовища у випадку розміщення лінії дислокації вздовж вісі Oz вирази для поля зміщень $\vec{U}(\vec{r}) = \vec{U}(U_x, U_y, U_z)$ навколо гвинтової дислокації задаються виразом [15]:

$$U_z(r, \theta) = U_z(x, y) = \frac{b}{2\pi} \operatorname{arctg}\left(\frac{y}{x}\right), \quad (3)$$

а крайової дислокації, відповідно:

$$\begin{aligned} U_x &= U_x(x, y) = \\ &= \frac{b}{2\pi} \left(\operatorname{arctg}\frac{y}{x} + \frac{xy}{2(1-\nu)(x^2 + y^2)} \right), \quad (4) \\ U_y &= U_y(x, y) = -\frac{b}{2\pi} \times \\ &\times \left(\frac{1-2\nu}{4(1-\nu)} \ln(x^2 + y^2) + \frac{x^2 - y^2}{4(1-\nu)(x^2 + y^2)} \right). \quad (5) \end{aligned}$$

Більш загальний вираз для зміщень прямолінійної дислокації дано у [17,18], а саме:

$$\begin{aligned} \vec{s}(\vec{\rho}) &= \frac{1}{4\pi} \left(-\Omega \vec{b}' - \frac{1-2\nu}{1-\nu} [\vec{t}' \times \vec{b}'] \ln \rho + \right. \\ &\left. + \frac{1}{1-\nu} \frac{[\vec{t}' \times \vec{b}'] \cdot \vec{\rho}}{\rho^2} \vec{\rho} \right), \quad (6) \end{aligned}$$

де Ω – тілесний кут, стягнутий у точці поля додатною стороною напівбезмежної площини, границею якої є лінія дислокації.

Для анізотропного середовища у кінцеві вирази (3)-(5) будуть входити компоненти тензора пружних постійних.

Вектор зміщення \vec{U} можна записати так:

$$\vec{U} = U_x \vec{i} + U_y \vec{j} + U_z \vec{k}, \quad (7)$$

де вирази $U_x = U_x(x, y)$, $U_y = U_y(x, y)$, $U_z = U_z(x, y)$ є відомими за умови орієнтації лінії дислокації вздовж вісі Oz [15]. Тоді, розписуючи похідну за напрямком $\vec{s}_{0,h}$, отримуємо таке співвідношення:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\vec{h}\vec{U})}{\partial\vec{s}_h} &= h_x \cdot \left[\cos(\vec{h}, O\vec{x}) \times \right. \\ &\times \left\{ \frac{\partial U_x}{\partial x} \cos(\vec{s}_h, O\vec{x}) + \frac{\partial U_x}{\partial y} \cos(\vec{s}_h, O\vec{y}) \right\} + \\ &\quad \left. + \cos(\vec{h}, O\vec{y}) \times \right. \\ &\times \left\{ \frac{\partial U_y}{\partial x} \cos(\vec{s}_h, O\vec{x}) + \frac{\partial U_y}{\partial y} \cos(\vec{s}_h, O\vec{y}) \right\} + \\ &\quad \left. + \cos(\vec{h}, O\vec{z}) \times \right. \\ &\times \left. \left\{ \frac{\partial U_z}{\partial x} \cos(\vec{s}_h, O\vec{x}) + \frac{\partial U_z}{\partial y} \cos(\vec{s}_h, O\vec{y}) \right\} \right]. \quad (8) \end{aligned}$$

Для розрахунку значень функції $\alpha(\vec{r})$ у загальному випадку нами створено спеціальну програму, що враховує матриці переходу від кристалографічної системи координат до системи координат площини розсіяння, а потім до системи координат дислокації, для якої відомі аналітичні вирази для поля зміщень.

При модельних представленнях ДП необхідно враховувати скінчені розміри дислокаційних сегментів. Тому при розрахунку значень зміщень \vec{U} вводиться коефіцієнт, що враховує віддаленість точки від дислокаційного сегменту. Цей коефіцієнт є безрозмірним, тому зручно представляти його у вигляді тригонометричної функції. Оскільки часткові похідні від зміщень у (8) визначаються наступними виразами:

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_x}{\partial x} &\sim \frac{y}{x^2 + y^2} \cdot F_1 \left(\frac{x^2 - y^2}{x^2 + y^2} \right), \\ \frac{\partial U_x}{\partial y} &\sim \frac{x}{x^2 + y^2} \cdot F_2 \left(\frac{x^2 - y^2}{x^2 + y^2} \right), \\ \frac{\partial U_y}{\partial x} &\sim \frac{x}{x^2 + y^2} \cdot F_3 \left(\frac{y^2}{x^2 + y^2} \right), \\ \frac{\partial U_y}{\partial y} &\sim \frac{y}{x^2 + y^2} \cdot F_4 \left(\frac{x^2}{x^2 + y^2} \right), \\ \frac{\partial U_z}{\partial x} &\sim \frac{x}{x^2 + y^2}, \quad \frac{\partial U_z}{\partial y} \sim \frac{y}{x^2 + y^2}, \end{aligned}$$

де F_1, F_2, F_3, F_4 – безрозмірні множники, що мало впливають на порядок величини похідних,

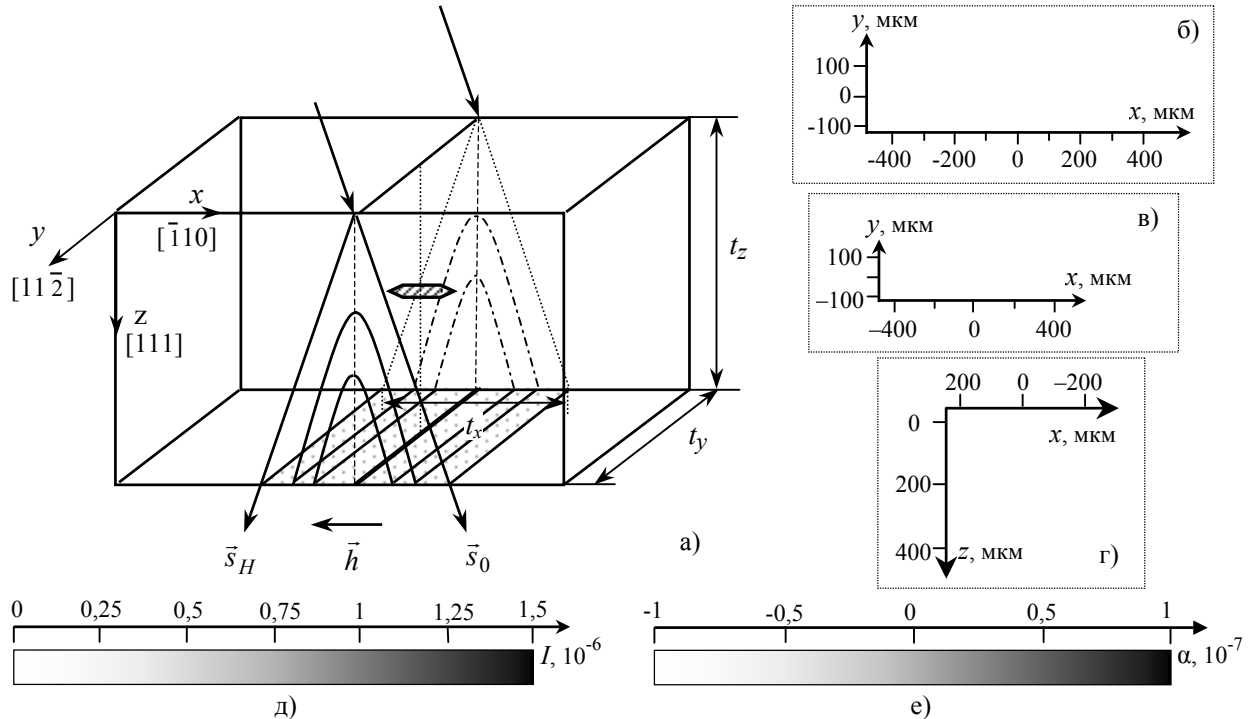


Рис. 2. Система координат чисельного експерименту (а). Масштаб координатних осей до рис.5, 6, 8-10, 13, 14, 19 (б), рис.7, 11, 15, 16, 18 (в), рис.3,12,17 (г). Шкала контрасту топограм на рис.5-11, 13-16, 18, 19 (д), рис. 3, 12, 17 (е).

то вибраний коефіцієнт, який враховує віддаленість точки розрахунку від дислокаційного сегменту

$$\sin^2 \varphi = \frac{x^2 + y^2}{x^2 + y^2 + z^2}, \quad (9)$$

описуватиме спадання функції $\alpha(\vec{r})$ з відстанню.

2. Моделювання дифракційних зображень ДП на секційних топограмах

Моделювання дифракційних X-променевих зображень ДП різних розмірів на секційних топограмах проводилось для кристала з кристалографічною орієнтацією вхідної поверхні (111), товщиною $t=2000$ мкм, з використанням (440) відбивання MoK_{α} -випромінювання у геометрії дифракції за Лауе. За таких умов дифракції $\mu t \approx 3$ (μ – фотоелектричний коефіцієнт поглинання) і реалізується випадок проміжної товщини між "тонким" ($\mu t < 1$) і "товстим" ($\mu t > 10$) кристалами. Цей вибір зумовлений тим, що при $\mu t \approx 3$ ефект аномального проходження ще слабкий і вже майже не впливає на формування дифракційного зображення ДП сильно поглинаюче хвильове поле.

Діаметр дислокаційних петель D змінювався від 1 до 80 мкм. ДП розміщувалися у площинах (111), $(\bar{1}11)$, $(1\bar{1}1)$ та $(11\bar{1})$.

Побудова секційних топограм здійснюється

за допомогою спеціально створеної програми, що перетворює числові значення інтенсивності у двовимірні зображення за допомогою 256-рівневої шкали інтенсивності. Секційні топограми та двовимірні перерізи $\alpha(\vec{r})$ площиною дифракції і площиною, паралельною до вхідної поверхні, (на рис.2 – xOz та xOy , відповідно) для зручного порівняння між собою побудовані з використанням однакових шкал контрасту (рис.2д,е).

Розміри топограм перпендикулярно вектору дифракції $\vec{h}_{440} - t_y=500$ мкм і вздовж нього – $t_x=1598$ мкм (представлені у масштабі рис.2б,в).

2.1. Дифракційні зображення ковзаючих дислокаційних петель

Побудуємо дифракційні зображення ДП, яка задається у вигляді гексагона і складається із відрізків прямолінійних дислокацій, що направлені строго вздовж кристалографічних напрямків типу $\langle 110 \rangle$, а вектори Бюргерса направлені відповідно до моделі на рис. 1а-г.

2.1.1. Площина залягання ДП – (111)

Для зручності аналізу та виявлення особливостей розсіяння X-променів на дислокаційних петлях на секційних топограмах розглядатимемо перерізи функції $\alpha(\vec{r})$ площиною дифракції (рис.3). Оскільки аналітичних виразів для $\alpha(\vec{r})$ у більшості випадків знайти неможливо, то проводилось якісне зіставлення $\alpha(\vec{r})$ для різних за

розмірами ДП. На рис.3 наведено перерізи $\alpha(\vec{r})$ площиною дифракції xOz у центрі палатки Бормана для петель різного діаметру. Для петель, розміри яких варіюються в межах $1\div 40$ мкм, у площині xOz $\alpha(\vec{r})$ є майже однаковою. Якісна відмінність у $\alpha(\vec{r})$ стає помітною між малими і великими ДП при $D=80$ мкм.

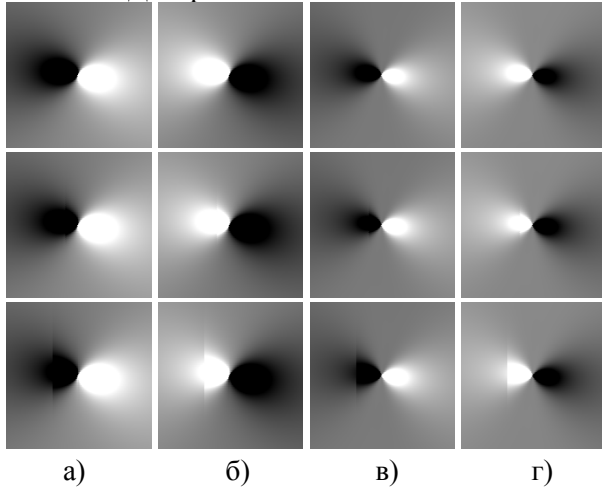


Рис. 3. Переріз функції $\alpha(\vec{r})$ площиною дифракції, що проходить через центр петлі. $D=1$ мкм (верхній ряд), $D=40$ мкм (середній ряд), $D=80$ мкм (нижній ряд). b_1^+ (а), b_1^- (б), b_2^+ (в), b_2^- (г).

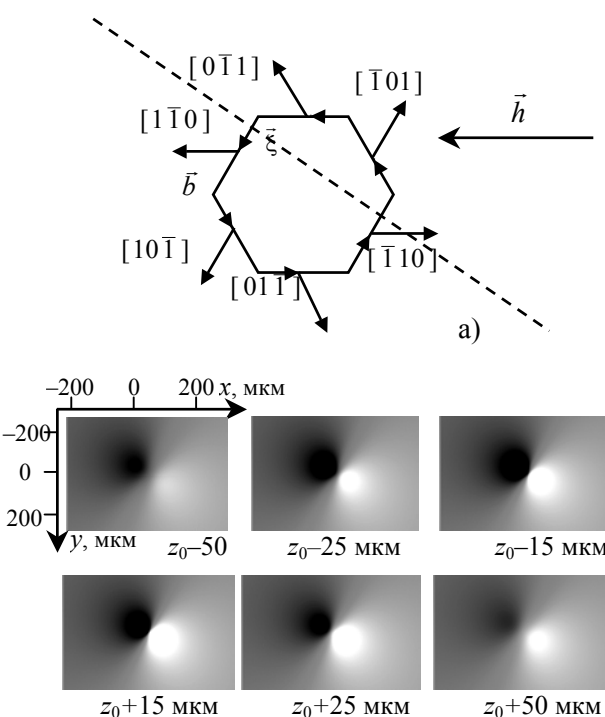


Рис. 4. Послідовні перерізи $\alpha(\vec{r})$ площиною, паралельною до вихідної поверхні кристала. Глибина залягання ДП b_1^+ з $D=10$ мкм – $z_0=1000$ мкм (б). Схема розміщення ДП відносно вектора \vec{h} (а).

Оскільки функція $\alpha(\vec{r})$ залежить від трьох координат, то для виявлення її особливостей необхідно розглядати перерізи $\alpha(\vec{r})$ не тільки у площині дифракції, але й ті що паралельні вихідній поверхні (рис.4).

З аналізу перерізів $\alpha(\vec{r})$ на рис.3 і рис.4 випливає, що для функції $\alpha(\vec{r})$ характерна складна пелюсткова структура. Розміщення пелюсток $\alpha(\vec{r})$ у просторі залежить від положення вектора дифракції \vec{h} по відношенню до векторів Бюргера \vec{b} кожного дислокаційного сегмента (рис.4а). Водночас, пелюстки (максимальні значення $\alpha(\vec{r})$) видовжені вздовж напрямку, виділеного пунктиром на рис.4а, оскільки скалярний добуток $(\vec{h}\vec{b})$ є максимальним за модулем для дислокаційних сегментів $[\bar{1}01]$ та $[10\bar{1}]$. Аналогічну ситуацію будемо спостерігати і для ДП інших розмірів.

Розраховані дифракційні зображення ДП ($D=1$ мкм) наведені на рис.5,6. У центрі топограми крім пелюсткового розподілу інтенсивності вздовж вектора дифракції спостерігається тонка осциляційна структура у розподілі інтенсивності, яка пов'язана, напевне, з інтерференцією поза дефектом тих хвильових полів, що проходять

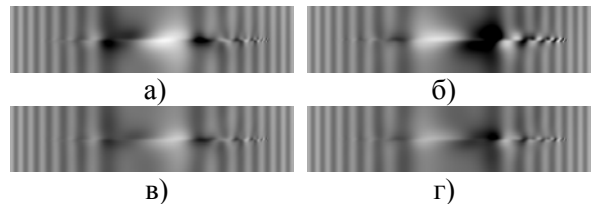


Рис. 5. Дифракційні зображення ДП на секційних топограмах: b_1^+ (а), b_1^- (б), b_2^+ (в), b_2^- (г). $z=1000$ мкм, $D=1$ мкм.

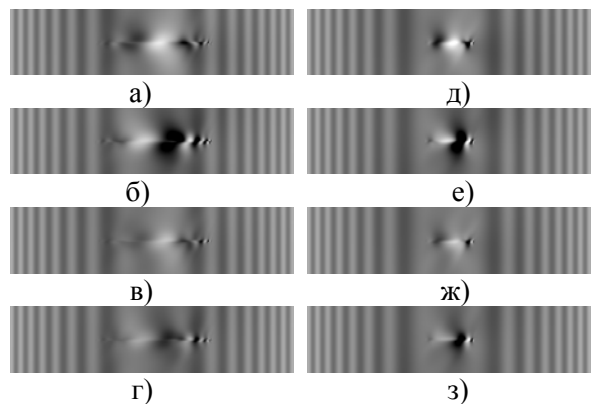


Рис. 6. Дифракційні зображення ДП b_1^+ (а,д), b_1^- (б,е), b_2^+ (в,ж), b_2^- (г,з), $D=1$ мкм, $z=1500$ мкм (а-г), $z=1800$ мкм (д-з).

віддалено від нього і тих, що можуть утворюватися у сильному деформаційному полі, внаслідок, так званого, ефекту міжвіткового розсіяння X -променів [19]. При зміні напрямку вектора \vec{b} на протилежний, в цілому, зображення на рис.6а, рис.6в, рис.6д і рис.6ж змінюється на обернене на відповідних рис.6б, рис.6г, рис.6е, рис.6з. Водночас, окремі деталі зображення поблизу дефекту в області значних $\alpha(\vec{r})$ ($\alpha(\vec{r}) \gg |\chi_h|$, де $|\chi_h|$ – коефіцієнт Фур'є-поляризованості кристалу) не повністю симетричні і різняться за розподілом інтенсивності.

На зображення деформаційного поля петлі також впливає глибина її залягання (рис.7): значно трансформуються її окремі пелюстки (ослаблюються), розміри (ширина) зменшуються, зникає тонка осциляційна структура зображення вздовж вектора дифракції (порівняй топограми на рис.5, рис.6). Причиною таких змін є, напевно, різний вклад ротаційних і дилатаційних складових деформаційних полів від різних сегментів ДП у загальну функцію локальних розорієнтацій (рис.3, рис.4).

На практиці, розміри ДП оцінюються від 1 до 20 мкм, за іншими даними – до 100 мкм [1,2,3]. З метою виявлення особливостей формування пелюсткової структури зображень ДП великих розмірів (більше 10 мкм) на рис.8-11 приведено розраховані набори секційних топограм для ДП, розмірами: 20 мкм, 40 мкм і 80 мкм. Тонка структура у розподілах інтенсивності на зображеннях ДП змінюється – вклад в кожен з частин зображення, що знаходяться по різні боки від перерізу центра петлі площиною дифракції, стає суттєво різний.

На топограмах рис.8-9 спостерігається зменшення кількості осциляцій інтенсивності вздовж вектора дифракції, але разом із тим їх тонка структура є набагато складнішою. Дифракційні зображення начебто складаються із декількох частин зображень малих ДП. Це пов'язано, напевно, із тим, що зі збільшенням розмірів петлі все у більшій мірі проявляються індивідуальні особливості кожного сегмента ДП.

При розташуванні ДП ближче до вихідної поверхні її зображення стає подібним до зображення петель значно менших за розмірами. Водночас порушення у симетрії окремих частин зображення зберігається (рис.10).

При розмірах ДП між 10 мкм та 20 мкм, що співрозмірно з екстинкційною товщиною Λ , їх дифракційні зображення помітно уширюються.

Якщо для петель розміром 20 мкм зображення ще локалізоване у малій області (в напрямку Oy) (рис.8-10), то для 40 мкм починають з'являтися протяжні смуги від країв зображень ДП. Для петель великого розміру ($D=80$ мкм) їх дифракційне зображення уширюється (рис.11) ще більше, а смуги стають більш помітними, зростає їх кількість. Крім того, осциляції інтенсивності від різних частин зображення накладаються, що призводить до утворення складної інтерференційної картини.

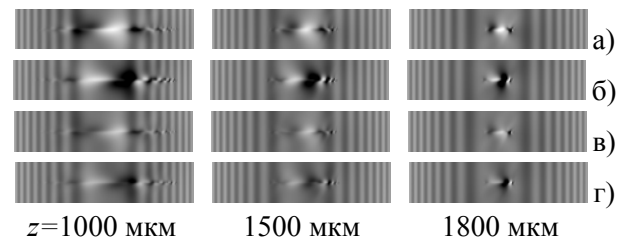


Рис. 7. Дифракційні зображення ДП b_1^+ (а), b_1^- (б), b_2^+ (в), b_2^- (г) на різних глибинах. $D=4$ мкм.

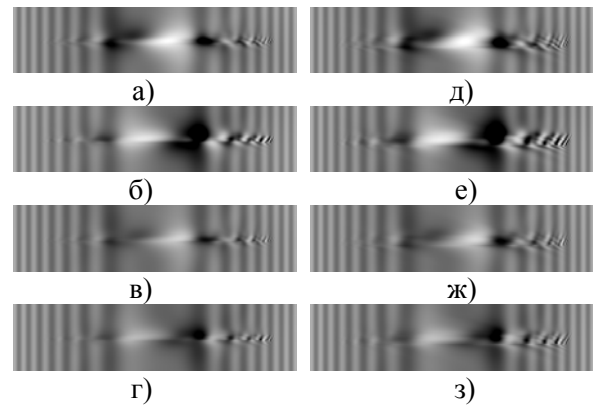


Рис. 8. Дифракційні зображення ДП b_1^+ (а,д), b_1^- (б,е), b_2^+ (в,ж), b_2^- (г,з). $z=1000$ мкм, $D=20$ мкм (а-г) та $D=40$ мкм (д-з).

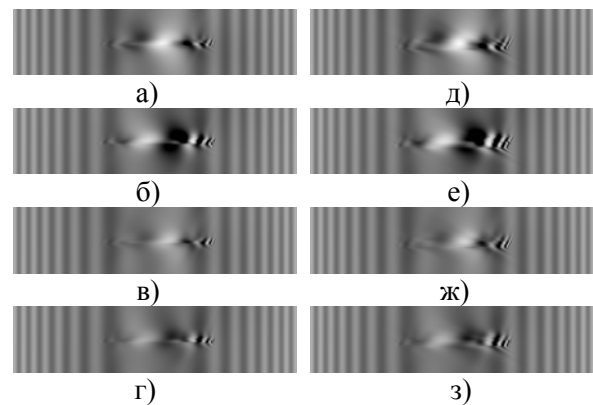


Рис. 9. Дифракційні зображення ДП (аналогічно рис.8), $z=1500$ мкм.

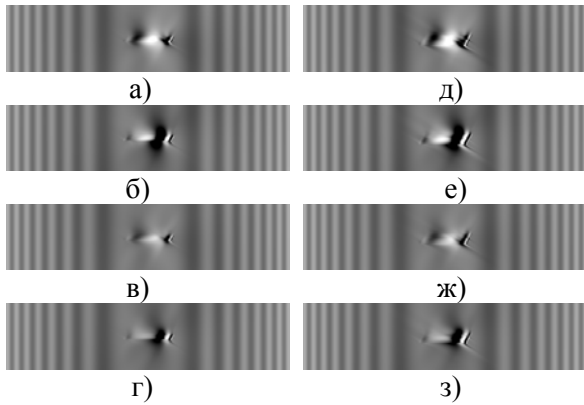


Рис. 10. Дифракційні зображення ДП (аналогічно рис.8), $z=1800\text{мкм}$.

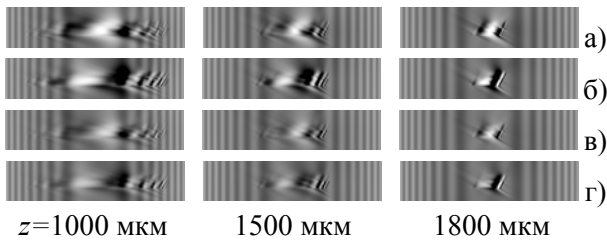


Рис. 11. Дифракційні зображення ДП b_1^+ (а), b_1^- (б),

b_2^+ (в), b_2^- (г). $D=80\text{мкм}$.

2.1.2. ДП в площинах $(\bar{1}11)$, $(1\bar{1}\bar{1})$ і $(11\bar{1})$

Оскільки площини типу $\{111\}$ розміщені під різними кутами до площини дифракції (110) , то функція $\alpha(\vec{r})$ для ДП, розміщеної відповідно в площинах $(\bar{1}11)$, $(1\bar{1}\bar{1})$ і $(11\bar{1})$ є різною за формою, хоча $\alpha(\vec{r})$ має два пелюстки по-різному орієнтованих по відношенню до вектора дифракції. Цим зумовлюється велика різноманітність дифракційних зображень ДП на секційних топограмах (рис.16-19) навіть у межах одного модельного представлення (рис.13, 14).

Порівняємо зображення ДП однієї конфігурації, що знаходяться у різних площинах. Для всіх зображень ДП на рис.13,14 при $t=1000\text{мкм}$ спостерігаються характерні осциляції інтенсивності та взаємозміщення окремих частин зображення. Кожне із зображень виявляє певні закономірності у розподілах інтенсивності, що в повній мірі визначається об'ємним виглядом функції локальних розорієнтацій (рис.12).

В загальному різні геометричні орієнтації однієї й тієї ж ДП, а також розміщення її по відношенню до площини дифракції можуть приводити до значних трансформацій дифракційних зображень:

- а) підсилення або пригнічення однієї з частин зображення;
- б) послаблення усього зображення майже до рівня фону;

- в) зміщення однієї частини зображення відносно іншої.

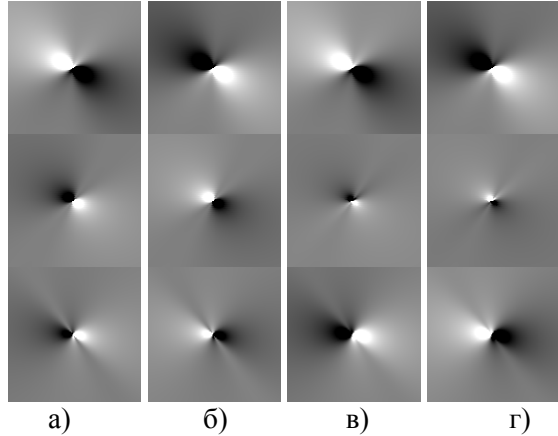


Рис. 12. Переріз функції $\alpha(\vec{r})$ площиною дифракції, що проходить через центр петлі; $D=10\text{мкм}$, $z=1000\text{мкм}$. Площина залягання ДП: $(\bar{1}11)$ (верхній ряд), $(1\bar{1}\bar{1})$ (середній ряд) та $(11\bar{1})$ (нижній ряд). b_1^+ (а), b_1^- (б), b_2^+ (в), b_2^- (г).

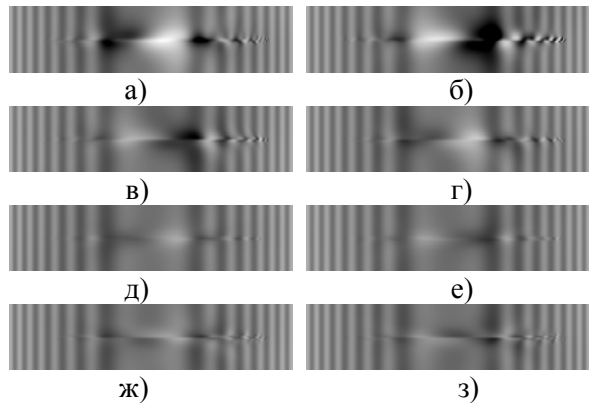


Рис. 13. Дифракційні зображення ДП b_1^+ (а), b_1^- (б), $z=1000\text{мкм}$, $D=10\text{мкм}$, площини залягання: (111) – (а,б), $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ – (в,г), $(1\bar{1}\bar{1})$ – (д,е) та $(11\bar{1})$ – (ж,з).

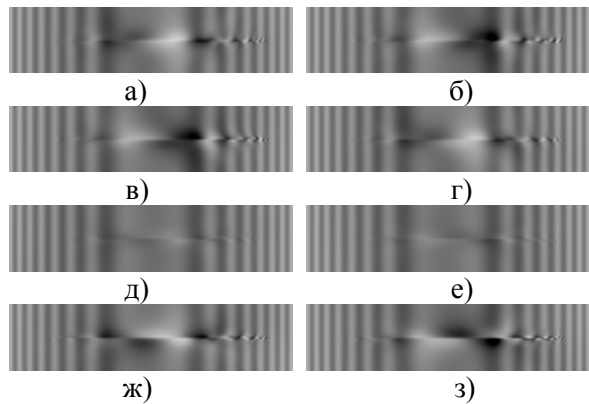


Рис. 14. Дифракційні зображення ДП b_2^+ (а), b_2^- (б), $z=1000\text{мкм}$, $D=10\text{мкм}$. Площини залягання (111) – (а,б), $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ – (в,г), $(1\bar{1}\bar{1})$ – (д,е) та $(11\bar{1})$ – (ж,з).

Співставлення розрахованих секційних топограм із виглядом $\alpha(\vec{r})$ підтверджує те, що зміна знаку $\alpha(\vec{r})$ змінює на протилежний контраст відповідних пелюстків або зміщує зображення у напрямку вектора дифракції.

У залежності від площини залягання ДП та її типу дифракційне зображення може змінюватись не тільки на протилежне відповідно для площин (111) та $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ (рис.15а), але й значно послаблюватись (рис.15б для цих же площин) або підсилюватись (рис.15г для площин $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ та $(11\bar{1})$).

Для ДП, що розташована в площині (111) , максимально контрастне зображення у розподілі інтенсивності на секційних топограмах отримуємо для моделей b_1^+ і b_1^- , для площини $(11\bar{1})$ – максимальна контрастність зображення спостерігається для b_2^+ і b_2^- (рис.15,16).

Водночас у площині $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ для всіх моделей є типовим однакова інтенсивність на виході, на відміну від майже повного пригнічення зображення для площини $(1\bar{1}\bar{1})$ (рис.13д,е, рис.14д,е). Також відбувається зменшення розміру зображення вздовж вектора дифракції із наближенням петлі до вихідної поверхні (рис.16).

Розглянуті вище топографічні зображення ДП для моделей b_1^+ , b_1^- , b_2^+ та b_2^- на різних глибинах залягання та орієнтаціях відносно вихідної поверхні демонструють велику кількість різноманітних варіантів їх дифракційних зображень: підсиленого або послабленого контрасту однієї частини чи усього зображення, зменшення кількості або зникнення осциляцій інтенсивності, зміщення частин зображень одна відносно іншої, зміна контрасту на протилежний тощо.

В цілому, за виключенням окремих деталей, ця різноманітність дифракційних зображень ДП залежить від вкладу скалярних добутоків $(\vec{h}\vec{b})$ окремих сегментів ДП у загальну функцію локальних розорієнтацій [16], адже в цих добутках "захована" орієнтаційна залежність залягання ДП по відношенню до площини дифракції.

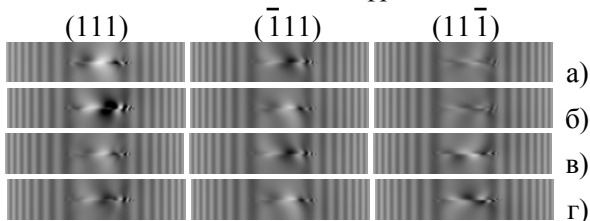


Рис. 15. Дифракційні зображення ДП b_1^+ (а), b_1^- (б), b_2^+ (в) та b_2^- (г). $z=1500$ мкм, $D=10$ мкм.

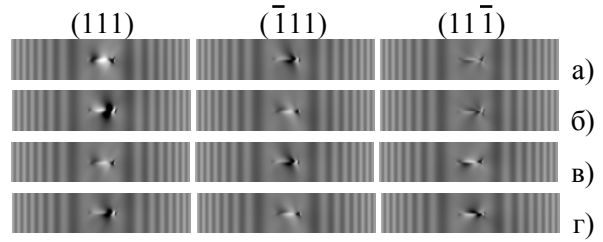


Рис. 16. Дифракційні зображення ДП b_1^+ (а), b_1^- (б), b_2^+ (в) та b_2^- (г). $z=1800$ мкм, $D=10$ мкм.

2.2. Призматичні петлі.

Петля розміщувалась у площині $\{111\}$, а вектор Бюргерса відповідно мав орієнтацію $\vec{b} = a/3\langle 111 \rangle$, що є характерним для дислокаційної петлі Франка [15]. Для призматичної петлі, що паралельна поверхні, у випадку вибраної для моделювання відбиваючої площини $(4\bar{4}0)$ і $\vec{b} = a/3[111]$ або $\vec{b} = a/3[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$, добуток $(\vec{h}\vec{b}) = 0$ для всіх її сегментів. Тому для розрахунку зображення таких призматичних петель було вибрано відбивання (444) , при якому вектор Бюргерса вже не є перпендикулярним до вектора дифракції (рис.18). Для призматичної ДП з векторами $\vec{b} = a/3[1\bar{1}\bar{1}]$, $\vec{b} = a/3[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ використано для моделювання відбивання $(4\bar{4}0)$ (рис.19).

Функцію $\alpha(\vec{r})$ для петель Франка приведено на рис.17. Така петля створює $\alpha(\vec{r})$ з несиметричними "пелюстками", причому темна частина на рис.17 відповідає від'ємним значенням, а світла – додатним значенням $\alpha(\vec{r})$.

Розраховані топограми відповідно до $\alpha(\vec{r})$, наведених на рис.17, представлені на рис.18. Крім зміни контрасту зображення на протилежний при зміні напрямку вектора Бюргерса, спостерігається також симетрія зображення відносно лінії, паралельної вектору дифракції. Це, напевно, пов'язано з тим, що у даному випадку усі сегменти призматичної ДП мають однаково напрямлені вектори Бюргерса.

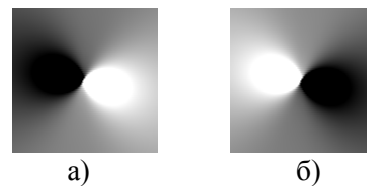


Рис. 17. Переріз $\alpha(\vec{r})$ у площині дифракції. $D=10$ мкм, $z=1000$ мкм, $\vec{b} = a/3[111]$ (а) та $\vec{b} = a/3[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ (б).

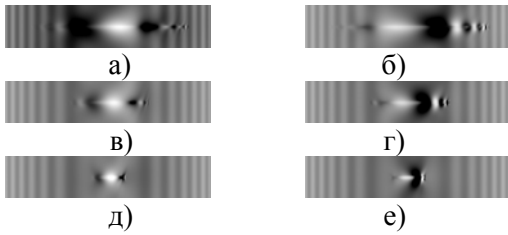


Рис. 18. Дифракційні зображення ДП, $z=1000$ мкм (а,б), $z=1500$ мкм (в,г) та $z=1800$ мкм (д,е), $D=10$ мкм. $\vec{b}=1/3[111]$ (а,в,д) та $\vec{b}=1/3[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ (б,г,е). Відбивання (444). Площина залягання (111).

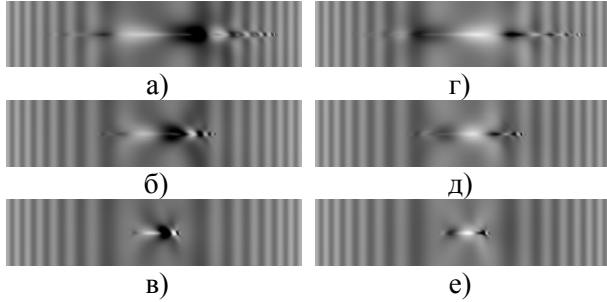


Рис. 19. Дифракційні зображення ДП $z=1000$ мкм (а,г), $z=1500$ мкм (б,д) та $z=1800$ мкм (в,е), $D=10$ мкм. $\vec{b}=1/3[1\bar{1}\bar{1}]$ (а,б,в) та $\vec{b}=1/3[111]$ (г,д,е). Площина залягання ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$).

Розраховані дифракційні зображення призматичної петлі, що лежить у площині ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$) наведені на рис.19. При такому розміщенні ДП вектор Бюргерса може мати два напрямки – $a/3[1\bar{1}\bar{1}]$ та $a/3[111]$. Зображення на рис.19 є подібними до зображень на топограмах рис.18. Крім тонкої осциляційної структури у розподілі інтенсивності вздовж вектора дифракції, під кутом до нього з'являються дві смуги, які перетинаються у центрі зображення. Контраст цих смуг залежить від площини і глибини розміщення ДП, і змінюється на протилежний при зміні знаку вектора \vec{b} .

3. Дифрактометричні дослідження кристалів, що містять дислокаційні петлі

Сучасна діагностика дефектної структури реальних кристалів використовує вимірювання кутових розподілів інтенсивності дифрагованого променя.

Значення інтегральної інтенсивності для ідеального кристалу I_p та кристалу, що містить дефекти I_h , будуть відрізнятися на множник $\exp(-L)$ (статичний фактор Дебая-Валлера):

$$I_h = I_p \exp(-L), \quad (10)$$

Проаналізуємо ступінь чутливості просторового розподілу інтенсивності $I_h(x)$ (інтегрування секційних топограм по вісі Oy) від типу ДП. На рис.20 залежності $I_h(x)$ для різних моделей ДП наразі є найбільш чутливими до зміни знаку век-

тора \vec{b} . Водночас розміщення ДП ближче до вихідної поверхні зменшує значення статичного фактора Дебая-Валлера L (рис.21).

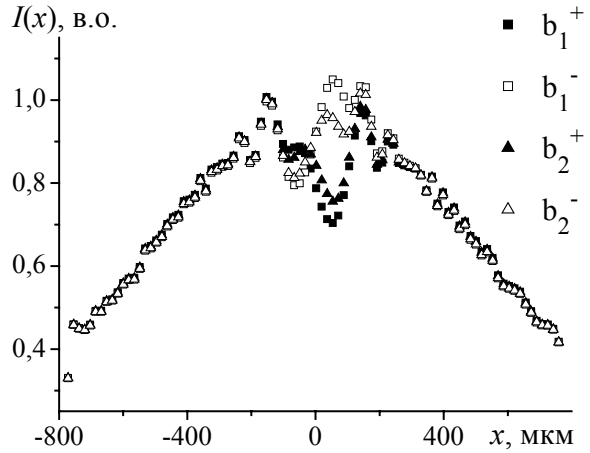


Рис. 20. Розподіли $I_h(x)$ для ДП у площині залягання (111) на глибині $z=1500$ мкм, $D=10$ мкм.

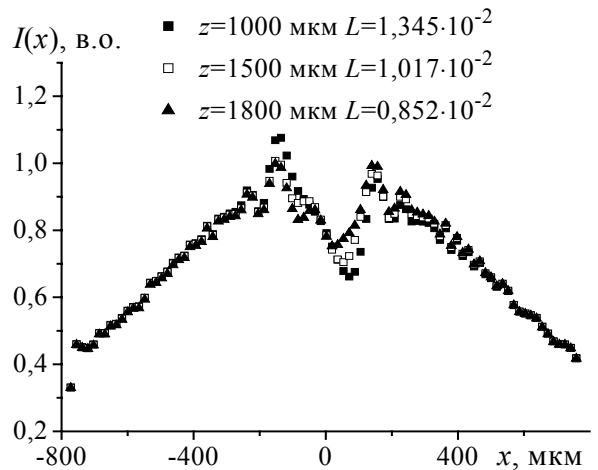


Рис. 21. Розподіли $I_h(x)$ для ДП b_1^+ у площині залягання (111) на різних глибинах. $D=10$ мкм.

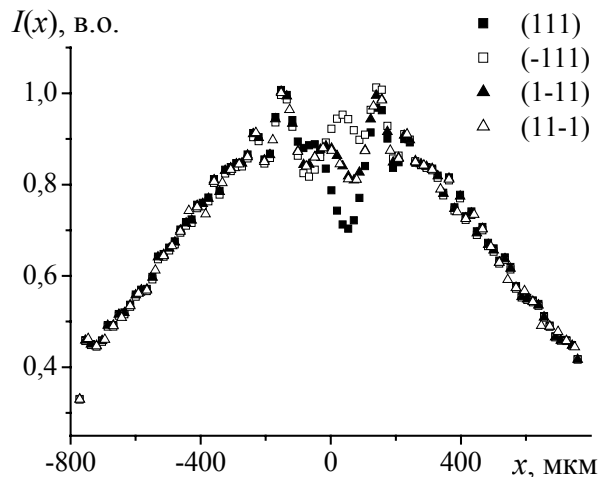


Рис. 22. Розподіли $I_h(x)$ для ДП b_1^+ у різних площинах залягання на глибині $z=1500$ мкм, $D=10$ мкм.

Для розподілів $I_h(x)$ на рис.22 характерно, що навіть у межах одного модельного представлення ДП (наприклад, b_1^+) та для однакової глибини залягання $z=1500$ мкм розміщення ДП у площинах типу $\{111\}$ приводить до суттєвої зміни форми просторового розподілу інтенсивності і різного внеску дифузної складової в інтегральну відбивну здатність кристала.

Визначаючи фактор Дебая-Валлера L в одному модельному представленні окремої ДП, що залягає у різних площинах, отримано значення L , яке змінювалось в широких межах: $0,2 \cdot 10^{-2} \div 1,6 \cdot 10^{-2}$. Очевидно, що при зміні площини залягання ДП, змінюється співвідношення між складовими ($\vec{h}\vec{b}$) для кожного із сегментів петлі. Це викликає відповідну зміну функції $\alpha(\vec{r})$ у площині дифракції.

Експериментальна крива гойдання отримується θ -скануванням зразка при нерухомому детекторі. Для розрахунку кривих гойдання у симетричній схемі дифракції за Лауе враховувалося відхилення кристалу як цілого від кута Брега [9]:

$$\beta_h = \Delta\theta \cdot \sin 2\theta, \quad (11)$$

де $\Delta\theta$ – кутове відхилення зразка від точного положення відбивання. Аналізуючи серію кривих гойдання для кристала, що містить одиничні ДП, виявлено, що вплив петель різних моделей і розмірів виражається у зміні асиметрії кривої та у зменшенні висоти максимуму. Це відбувається, напевно, за рахунок перерозподілу інтенсивності між когерентною і некогерентною складовими розсіяння.

Висновки

1. За допомогою чисельного розв'язку рівнянь Такагі побудовано топографічні зображення ДП у залежності від їх кристалографічного і просторового розміщення, проаналізовано вплив їх деформаційних полів на просторові розподіли інтенсивності $I_h(x)$, а також криві гойдання.

2. Модельні представлення ДП у вигляді гексагона з окремих дислокаційних сегментів дозволяють відтворювати зображення ковзаючих і призматичних ДП.

3. Характер розсіяння X-променів на деформаційних полях, які створюються різними за розмірами, кристалографічним і просторовим розташуванням ДП, є складний і різноманітний. В залежності від їх кристалографічного і просторового розташування відбуваються значні транс-

формації дифракційних зображень: підсилення або пригнічення однієї з частин зображення, послаблення всього зображення майже до рівня фону, зміщення однієї частини зображення відносно іншої. Все це пояснюється сумарним впливом добутоків ($\vec{h}\vec{b}$) для кожної частини петлі на загальну функцію $\alpha(\vec{r})$, яку для ДП аналітично виразити неможливо.

4. Результати досліджень свідчать, що дислокаційні петлі володіють далекодіючим полем деформацій, а розподіли інтенсивності $I_h(x)$ є чутливими до типу, орієнтації та розміщення ДП.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Данильчук Л.Н., Окунев А.О. Классификация микродефектов в монокристаллах кремния, выращенных методом Чохральского // Тез. докл. международного научного семинара "Современные методы анализа дифракционных данных". – Великий Новгород, Россия, 2004. – С.57-62.
2. Таланин И.Е., Таланин В.И. Физическая классификация ростовых микродефектов в бездислокационных монокристаллах // Металлофизика и новейшие технологии. – 2004. – 26, №3 – С.310-314.
3. Гусева Н.Б., Крылова Н.О., Шульпина И.Л. Рентгенотопографическое исследование бездислокационного высокоомного кремния // Высокочистые вещества. – 1988. – №6. – С.212-216.
4. Инденбом В.Л., Коганер В.М. Рентгенотопографические изображения микродефектов при дифракции по Брэггу // Кристаллография. – 1987. – 32, вып. 2. – С.297-303.
5. Indenbom V.L., Kaganer V.M. The formation of plane-wave X-ray images of microdefects // Phys. Stat. Sol. (a). – 1985. – 87. – P.253.
6. Voloshin A.E., Smolskii I.L., Kaganer V.M., Indenbom V.L., Rozhanskii V.N. Imaging of microdefects in Silicon single crystals by plane wave X-ray topography at asymmetric diffraction // Phys. Stat. Sol. (a). – 1992. – 130. – P.61.
7. Suvorov E.V., Indenbom V.L., Gorelik O.S., Rusakova I.A., Chamrov V.A. Dislocation contrast in the case of anomalous X-ray transmission // Phys. Stat. Sol. (a). – 1980. – 60. – P.27.
8. Гусева Н.Б., Шейхет Э.Г., Шнейзман В.В., Шульпина И.Л. Дислокационная активность микродефектов в монокристаллах кремния // ФТТ. – 1986. – 28, вып.10. – С.3192-3194.
9. Authier A. Dynamical theory of X-ray diffraction. – New-York: Oxford University Press, 2001.
10. Härtwig J. Hierarchy of dynamical theories of X-ray diffraction for deformed and perfect crystals // Appl. Phys. – 2001. – 34. – P.A70.

11. *Epelboin Y.* Simulation of X-ray topographs // *Material Science and Engineering*. – 1985. – **73**. – P.1-43.
12. *Novikov S., Fedortsov D., Fodchuk I.* X-Ray images of dislocation loops in acoustically excited Silicon crystals // 7th Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging, Congress Center Pruhonice near Prague, Czech Republic, 2004. –P.61.
13. *Теодосіу К.* Упругие модели дефектов в кристаллах. – М.: Мир.1985.
14. *Родес Р.Г.* Несовершенства и активные центры в полупроводниках. – М.: Металлургия, 1968.
15. *Хирт Дж., Лоте И.* Теория дислокаций. – М.: Атомиздат, 1972..
16. *Федорцов Д.Г., Новиков С.Н., Фодчук И.М.* Рентгеновские топографические изображения дислокационных петель в кремнии // II Українська конференція з фізики напівпровідників УНКФН-2. – Чернівці, 2004. – С.418.
17. *De Wit R.* Some relations for straight dislocations // *Phys. Stat. Sol.* – 1967. – **20**. – P.567.
18. *De Wit R.* The self-energy of dislocation configurations made up of straight segments // *Phys. Stat. Sol.* – 1967. – **20**. – P.575.
19. *Authier A., Balibar E., Epelboin Y.* Theoretical and experimental study of interbranch scattering observed near a dislocation line in X-ray topography // *Phys.Stat.Sol.* – 1970. – **41**, No.1. – P.225-238.