

УДК 548.732

## ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ НА УГЛОВОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ В КРИСТАЛЛАХ С НАРУШЕННЫМ ПОВЕРХНОСТНЫМ СЛОЕМ

В. А. Бушуге

В рамках статистической динамической теории дифракции рассмотрено влияние дефектов структуры в нарушенном поверхностном слое совершенных полупроводниковых кристаллов на угловую зависимость когерентного и некогерентного (диффузного) рассеяния рентгеновских лучей. На примере эпитаксиальной пленки с дефектами кластерного типа показано, что диффузная компонента рассеяния существенным образом изменяет интенсивность и профиль кривой дифракционного отражения. Исследована зависимость углового распределения дифракции от размера и концентрации дефектов в поверхностном слое, от его толщины и величины деформации.

Известно, что в процессе изготовления полупроводниковых приборов в результате различного рода воздействий (механическая обработка, ионная имплантация, диффузия примесей, эпитаксиальное наращивание) вблизи поверхности совершенных монокристаллов образуется нарушенный слой, структура которого отличается от подложки. Одним из наиболее перспективных методов неразрушающего контроля деформации кристаллической решетки, возникающей при обработке и введении примесей, является метод рентгеновской дифракции. Дефекты и примеси приводят к частичной аморфизации и к изменению межплоскостных расстояний, что проявляется в формировании дополнительной структуры на кривой дифракционного отражения (КДО) рентгеновских лучей. Расчет КДО проводится на основе динамической теории дифракции в искаженных кристаллах [1-5]. Развитые в [6-15] методы анализа КДО позволяют определять эффективную толщину и среднюю деформацию слоя, а в ряде случаев восстановить и профиль деформации.

Анализ КДО проводится обычно в предположении о полностью когерентном рассеянии. Вместе с тем хорошо известно, что дефекты структуры приводят к появлению некогерентной (диффузной) составляющей интенсивности рассеяния. В случае двухкристалльной регистрации КДО представляет собой сумму когерентной и некогерентной компонент, разделить которые можно только с помощью трехкристалльной методики [16]. Совершенно очевидно, что попытки восстановления профиля деформации по двухкристалльным КДО, которые осуществляются на основе уравнений Такаги или Топена лишь для когерентных полей, строго говоря, не вполне корректны, поскольку диффузное рассеяние (ДР) привносит дополнительные искажения в КДО. Так, в работе [17] показано, что вклад ДР на хвостах КДО от кристалла кремния, имплантированного ионами бора, может на 1—3 порядка превышать интенсивность когерентной составляющей.

Динамическая теория дифракции с учетом ДР рассматривалась ранее лишь для кристаллов с однородным по объему распределением дефектов [18-24]. В работах [25, 26] впервые построены основы динамической

теории дифракции в случае неравномерного распределения дефектов по глубине кристалла и получены общие соотношения для интенсивностей рассеяния.

В настоящей работе исследовано влияние ДР на угловое распределение КДО от кристалла с нарушенным поверхностным слоем в геометриях Брэгга и Лауэ. Рассмотрен наиболее простой для анализа случай, когда нарушенный слой представляет собой однородную эпитаксиальную пленку произвольной толщины  $l$  с межплоскостными расстояниями  $\bar{d}=d+\Delta d$  ( $\bar{d}$  — межплоскостные расстояния в совершенной подложке), в которой имеются хаотически распределенные микродефекты с размерами  $r_d < l$ .

## 1. Коэффициенты когерентного дифракционного отражения и прохождения

В отличие от статистической динамической теории Като [18], основанной на волновых уравнениях в реальном пространстве [5], исходными в нашей работе являются уравнения Такаги [1], записанные для Фурье-компонент полей и, следовательно, учитывающие отстройку по углу падения плоской волны на кристалл и по углу выхода для плосковолновых гармоник расходящегося диффузно рассеянного излучения

$$\begin{aligned} dE_0/dz &= ia_{00}E_0 + ia_{0h}\Phi E_h, \\ dE_h/dz &= i(a_{hh} + \eta)E_h + ia_{h0}\Phi^*E_0, \\ \eta &= \kappa(\Delta\vartheta - \Delta\vartheta_0)\sin 2\vartheta_B/\gamma_h, \quad \Delta\vartheta_0 = -(\Delta d/d)\operatorname{tg} \vartheta_B, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $a_{gg'} = \kappa C \chi_{g-g'}/2\gamma_g$  ( $g, g' = 0, h$ );  $\kappa = 2\pi/\lambda$ ;  $\chi_g$  — Фурье-компоненты поляризуемости;  $\gamma_0, \gamma_h$  — направляющие косинусы;  $\Phi = \exp(i\mathbf{h}\mathbf{u})$  — фазовый фактор решетки;  $\mathbf{h}$  — вектор дифракции;  $\mathbf{u}$  — поле смещений. Величина  $\eta$  характеризует отстройку  $\Delta\vartheta = \vartheta - \vartheta_B$  от угла Брэгга  $\vartheta_B$  для подложки. Фактор поляризации  $C$  (1 или  $\cos 2\vartheta_B$ ) входит в  $a_{gg'}$  лишь при  $g \neq g'$ .

Следуя [18], подставим в правые части (1) формальные решения для  $E_{h,0}$  в интегральной форме и проведем статистическое усреднение, пренебрегая корреляцией между короткопериодными флуктуациями фазового фактора  $\delta\Phi = \Phi - E$  и медленно меняющимися амплитудами полей ( $E = \langle \Phi \rangle$  — статический фактор Дебая—Валлера, учитывающий хаотические смещения атомов из идеальных положений  $\langle \mathbf{u} \rangle = 0$ ). В итоге для амплитуд когерентных полей  $E_g^c = \langle E_g \rangle$  получим [23, 24]

$$\begin{aligned} dE_0^c/dz &= i(a_{00} + isp\bar{\tau})E_0^c + ia_{0h}EE_h^c, \\ dE_h^c/dz &= i(a_{hh} + \eta + ip\tau)E_h^c + ia_{h0}EE_0^c, \end{aligned} \quad (2)$$

где

$$\tau(\psi) = \int_0^\infty g(\xi) e^{-i\psi\xi} d\xi, \quad \psi = a_{hh} - a_{00} + \eta. \quad (3)$$

Здесь  $p = a_{0h}a_{h0}(1 - E^2)$ ;  $s = 1$  в случае Лауэ ( $\gamma_h > 0$ ),  $s = -1$  в случае Брэгга ( $\gamma_h < 0$ );  $\bar{\tau} = \tau(-s\psi)$ ;  $\tau(\psi)$  — комплексная длина корреляции, представляющая собой Фурье-трансформанту собственной корреляционной функции  $g(\xi)$  флуктуаций  $\delta\Phi$ , где [18]

$$g(z - z') = \langle \delta\Phi(z) \delta\Phi^*(z') \rangle / (1 - E^2).$$

Уравнения (2) получены в приближении  $\tau_0 \ll \Lambda$ , где корреляционная длина Като  $\tau_0 = \tau(0)$ ,  $\Lambda = \lambda \sqrt{\gamma_0 |\gamma_h|} / \pi C |\chi_{hr}|$  — глубина экстинкции. В дальнейшем будем пренебрегать в (3) поглощением на длине порядка  $\tau_0$ , т. е. считать в (3)  $\chi_{0i} = 0$ . При этом  $\tau(-\psi) = \tau^*(\psi)$ .

Дефекты структуры приводят к ослаблению в  $E^{-1}$  раз динамического взаимодействия между когерентными полями, а также к появлению добавочных членов в первых слагаемых в (2), описывающих главным образом дополнительное к фотоэлектрическому поглощению  $\mu = \kappa\chi_{0i}$  затухание когерентных полей из-за диффузного рассеяния. Соответствующий

коэффициент затухания  $\mu_d \approx 2\tau_r (1-E^2)\Lambda^{-2}$  может быть сравним с  $\mu$  даже для сравнительно совершенных кристаллов с  $E \approx 1$  и  $\tau_r \ll \Lambda$ .

Решение системы (2) имеет вид

$$E_g^c(z) = A_g^{(1)} e^{i\varepsilon_0 z} + A_g^{(2)} e^{i\varepsilon_2 z}, \quad (4)$$

где

$$A_h^{(\nu)} = \sqrt{|b|} R_\nu A_0^{(\nu)}, \quad b = \gamma_0 / \gamma_h, \\ \varepsilon_\nu = 1/2 [2a_{00} + \psi + i p (\tau + s\bar{\tau}) \pm \beta], \quad R_\nu = (\psi_e \pm \beta) / 2a_{0h} E \sqrt{|b|}, \\ \beta = (\psi_e^2 + 4a_{0h} a_{h0} E^2)^{1/2}, \quad \psi_e = \psi + i p (\tau - s\bar{\tau}), \quad (5)$$

а амплитуды  $A_0^{(\nu)}$  находятся из граничных условий на поверхности кристалла и на границе пленка—подложка. Здесь и далее верхний и нижний знаки относятся к корням с  $\nu=1$  и  $\nu=2$  соответственно. Если дефекты отсутствуют, то статфактор  $E=1$ ,  $\Delta d=0$  и соотношения (4), (5) описывают дифракцию в идеальной подложке.

Рассмотрим вначале дифракцию в геометрии Брэгга. В случае толстой подложки с  $\mu \bar{t} \gg 1$ , где  $\bar{t} = (L-l)/\gamma_0$ ,  $L$  — толщина кристалла, амплитуды когерентных полей в подложке ( $l \leq z \leq L$ ) имеют вид  $\tilde{E}_g^c = B_g \exp(i\varepsilon_0 z)$ . Здесь  $B_h = \sqrt{|b|} R_0 B_0$ , а  $\varepsilon_0 = \varepsilon$ , и  $R_0 = R$ , задаются соотношениями (5) с  $E=1$ ,  $\Delta d=0$ , причем знак перед  $\beta$  определяется таким образом, чтобы  $\text{Im} \varepsilon_0 > 0$ . Из граничных условий  $E_0^c(0)=1$  и  $E_g^c(l) = \tilde{E}_g^c(l)$  следует, что

$$A_0^{(1)} = 1/(1-Q), \quad A_0^{(2)} = -Q/(1-Q), \quad (6)$$

где

$$Q = \frac{R_1 - R_0}{R_2 - R_0} e^{i\beta l}.$$

Амплитудный коэффициент когерентного брэгговского отражения от кристалла с дефектной эпитаксиальной пленкой равен

$$R^c(\Delta\delta) = |b|^{-1/2} E_h^c(0) = (R_1 - R_2 Q)/(1-Q). \quad (7)$$

Если пренебречь поглощением, связанным с ДР, т. е. считать в (5)  $\tau = \bar{\tau} = 0$ , то, как и в [27], коэффициент отражения (7) с точностью до обозначений совпадает с полученным другим методом соответствующим результатом работы [15] и легко может быть сведен к рекуррентной формуле в [12].

Получим теперь выражения для амплитудных коэффициентов когерентного отражения и прохождения в геометрии Лауэ. В этом случае поля в совершенной части кристалла имеют вид

$$\tilde{E}_g^c(z) = B_g^{(1)} e^{i\varepsilon_{10} z} + B_g^{(2)} e^{i\varepsilon_{20} z}, \quad (8)$$

где  $B_h^{(\nu)} = \sqrt{|b|} R_{\nu 0} B_0^{(\nu)}$ , а выражения для  $\varepsilon_{\nu 0}$  и  $R_{\nu 0}$  совпадают с  $\varepsilon$ , и  $R$ , в (5), в которых следует положить  $E=1$  и  $\Delta d=0$ .

Если нарушенный слой находится на входной поверхности кристалла, то в (8)  $l \leq z \leq L$  и из граничных условий  $E_0^c(0)=1$ ,  $E_h^c(0)=0$  и  $E_g^c(l) = \tilde{E}_g^c(l)$  следует, что

$$A_0^{(1)} = 1/(1-q), \quad A_0^{(2)} = -q/(1-q), \quad A_h^{(\nu)} = \pm R_1 \sqrt{|b|}/(1-q), \quad (9)$$

$$B_0^{(\nu)} = \pm \frac{r - R_{\nu 0} t}{R_{10} - R_{20}} e^{-i\varepsilon_{\nu 0} l}, \quad (10)$$

где  $q = R_1/R_2$ ;  $\nu \neq \nu' = 1, 2$ ;  $r$  и  $t$  — амплитудные коэффициенты отражения и прохождения эпитаксиальной пленки

$$r = \frac{R_1}{1-q} (e^{i\varepsilon_1 l} - e^{i\varepsilon_2 l}), \quad t = \frac{1}{1-q} (e^{i\varepsilon_1 l} - q e^{i\varepsilon_2 l}). \quad (11)$$

Амплитудные коэффициенты когерентного лауэвского отражения  $R^c$  и прохождения  $T^c$  бикристалла с нарушенным верхним слоем имеют, согласно (8), следующий вид:

$$R^c(\Delta g) = \sum_y R_{y0} B_0^{(y)} e^{i\epsilon_{y0}L}, \quad T^c(\Delta g) = \sum_y B_0^{(y)} e^{i\epsilon_{y0}L}, \quad (12)$$

где величины  $B_0^{(y)}$  определяются соотношениями (10).

Из (9)–(12) следует, что при  $l=L$  коэффициенты  $R^c=r$ ,  $T^c=t$ . Легко также убедиться, что для полностью совершенного кристалла, когда в (9) и (11)  $R_y=R_{y0}$  и  $\epsilon_y=\epsilon_{y0}$ , выражения для амплитуд  $B_g^{(y)}$  (10) совпадают с  $A_g^{(y)}$  (9). То же самое получается и в случае  $l=0$ , когда  $r=0$  и  $t=1$ .

Если нарушенный слой находится на выходной поверхности кристалла, то амплитуды полей определяются соотношениями (8) в интервале  $0 \leq z \leq L-l$  и (4) в интервале  $L-l \leq z \leq L$ . С учетом граничных условий  $\tilde{E}_0^c=1$ ,  $\tilde{E}_L^c=0$  на входной поверхности  $z=0$  и  $\tilde{E}_g^c=E_g^c$  при  $z=L-l$  легко показать, что амплитуды когерентных полей в совершенной части кристалла  $B_g^{(y)}$  в (8) равны  $A_g^{(y)}$  (9) с заменой в (9)  $R_y$  на  $R_{y0}$ , а амплитуды  $A_g^{(y)}$  в (4) имеют вид, аналогичный  $B_g^{(y)}$  (10), т. е.

$$A_0^{(y)} = \pm \frac{r_0 - R_y t_0}{R_1 - R_2} e^{-i\epsilon_y(L-l)}, \quad A_h^{(y)} = \sqrt{b} R_y A_0^{(y)}, \quad (13)$$

где  $r_0$ ,  $t_0$  — амплитудные коэффициенты отражения и прохождения совершенной части кристалла, явный вид которых совпадает с  $r$  и  $t$  (11), но с заменой в (11)  $R_y$  и  $\epsilon_y l$  на  $R_{y0}$  и  $\epsilon_{y0}(L-l)$  соответственно. Коэффициенты когерентного отражения и прохождения бикристалла с нарушенным нижним слоем имеют вид

$$R^c = \sum_y R_y A_0^{(y)} e^{i\epsilon_y L}, \quad T^c = \sum_y A_0^{(y)} e^{i\epsilon_y L}, \quad (14)$$

где амплитуды  $A_0^{(y)}$  определены выражениями (13).

## 2. Интенсивности диффузного рассеяния и двухкристальные кривые рентгеновской дифракции

В схеме двухкристальной регистрации с широкой апертурой детектора, когда измеряется суммарная интенсивность когерентного и некогерентного рассеяния, проинтегрированная по всем углам выхода, можно пренебречь дифракцией в нарушенном слое самого диффузно рассеянного излучения. Это оправдано в случае тонких слоев с  $l \sim \Lambda$  и достаточно малых дефектов с  $r_d \ll \Lambda$  в силу того, что угловое распределение выходящего из кристалла диффузного излучения  $\Delta \vartheta_d \sim \lambda/r_d$  много шире области когерентного динамического рассеяния  $\Delta \vartheta_c \sim \lambda E/\Lambda$ . Иными словами, ДР можно рассматривать в кинематическом приближении. В то же время интенсивности когерентных полей  $I_g^c = |E_g^c(z)|^2$  в нарушенном слое описываются точными формулами (4) статистической динамической теории. С учетом сказанного выше интенсивности ДР в нарушенном слое  $I_g^i = \langle E_g E_g^* \rangle - I_g^c$  удовлетворяют следующим уравнениям переноса [23, 24]:

$$\frac{dI_g^i}{dz} = -\mu_g I_g^i + s \sigma_{gg'} I_{g'}^c, \quad g \neq g' = 0, h, \quad (15)$$

где  $\mu_g = \mu/\gamma_g$ . Вторые слагаемые в (15), пропорциональные когерентным интенсивностям  $I_{h,0}^c$ , играют роль распределенных по объему слоя источников ДР;  $\sigma_{gg'} = 2 |a_{gg'}|^2 (1 - E^2) \tau_r$  — сечения ДР на единицу длины. Уравнения (15) решаются с граничными условиями  $I_0^i(0) = I_h^i(l) = 0$  в случае Брэгга и  $I_g^i(z_1) = 0$  в случае Лауэ ( $z_1=0$  или  $z_1=L-l$ , если нарушенный слой находится на входной или выходной поверхностях кристалла соответственно). В совершенной части кристалла ДР отсутствует.

Рассмотрим вначале случай Брэгга. Из уравнения (15) с учетом (4) и (5) для интенсивности ДР вблизи отраженного пучка получим

$$I_h^i(0) = \sigma_{h0} [ |A_0^{(1)}|^2 I_{11}^{(h)} + |A_0^{(2)}|^2 I_{22}^{(h)} + 2 \operatorname{Re} (A_0^{(1)} A_0^{(2)*} I_{12}^{(h)}) ], \quad (16)$$

$$I_{yy}^{(g)} = (1 - \exp[-s(\mu_g - \mu_{yy'})l]) / s(\mu_g - \mu_{yy'}), \quad (17)$$

где  $I_{yy}^{(g)}$  — эффективные толщины формирования ДР в направлении  $g$ -го.

пучка;  $\mu_{\nu\nu'} = -i(\epsilon_{\nu} - \epsilon_{\nu'}^*)$  — интерференционные коэффициенты поглощения;  $s = -1$ ;  $A_{\nu}^{(s)}$  определены в (6). Если слой достаточно тонкий ( $l \ll \Lambda$ ), то  $l_{\nu\nu'}^{(s)} \approx l$ .

Кривая брэгговского отражения от кристалла с нарушенным поверхностным слоем с учетом (7) и (16) определяется суммой когерентной и диффузной составляющих

$$R(\Delta\vartheta) = I_h^c + I_h^i, \quad (18)$$

где  $I_h^c = |R^c|^2$ . Поскольку проходящая когерентная интенсивность  $I_0^c$  осциллирует с изменением  $\Delta\vartheta$ , то, согласно (16), интенсивность ДР также может в общем случае иметь угловую зависимость типа сплаженных осцилляций (при  $l > \Lambda$ ), накладывающихся на плавный кинематический фон ДР  $I_h^i = \sigma_{h0} l_h$ , где  $l_h = l_{\nu\nu}$  при  $|\psi_e| \gg 2|a_{0h}|E$ .

Рассмотрим нарушенный слой с дефектами в виде хаотически распределенных аморфных сферических кластеров радиусом  $r_d$  с отсутствием поля упругих деформаций вне кластера, т. е.  $\langle \exp(i\mathbf{h}\mathbf{u}) \rangle = 0$  при  $|\mathbf{r}| \leq r_d$  и  $\exp(i\mathbf{h}\mathbf{u}) = 1$  при  $|\mathbf{r}| > r_d$  (см. [21, 22]). Такие дефекты характерны, например, для легированного кислородом кристалла кремния после его отжига. Для действительной и мнимой частей длины корреляции  $\tau(\psi)$  (3) получим [23]

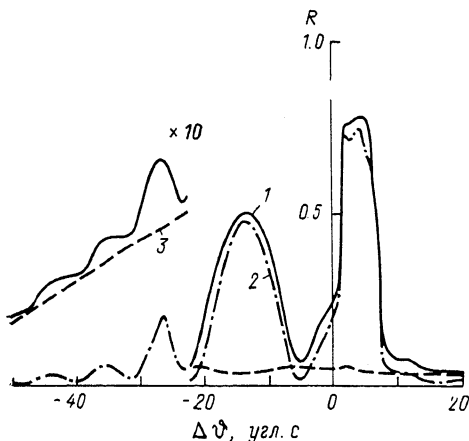


Рис. 1. Кривые отражения от кристалла с нарушенным поверхностным слоем при  $l = \Lambda$ ,  $E = 0.9$ ,  $r_d = 0.4$  мкм,  $\Delta d/d = 2 \times 10^{-4}$ .

1 —  $R$ , 2 —  $I_h^c$ , 3 —  $I_h^i$ .

$$\tau_r(\psi) = (6r_d/x^4) [1/2 x^2 + 1 - \cos x - x \sin x], \quad (19a)$$

$$\tau_i(\psi) = (-r_d/x^4) [x^3 (1 + \cos x) + 6(x \cos x - \sin x)], \quad (19b)$$

где  $x = 2\psi r_d \gamma_0$ ,  $\tau_r(0) = 3r_d/4$ ,  $\tau_i(0) = 0$ . Ширина функции  $\tau_r$  на половине высоты  $x_{1/2} = 6.954$ . Статфактор  $E = \exp(-cV_d)$ , где  $c$  и  $V_d = 4\pi r_d^3/3$  — концентрация и объем кластеров.

На рис. 1—3 приведены расчетные кривые полных  $R$ , когерентных  $I_h^c$  и некогерентных  $I_h^i$  интенсивностей симметричного брэгговского отражения (220)  $\sigma$ -поляризованного  $\text{CuK}_\alpha$ -излучения от автоэпитаксиальной структуры кремния ( $\Lambda = 2$  мкм). Широкий пик слева на рис. 1 связан с отражением от слоя. Из рис. 1 видно, что диффузное рассеяние приводит к значительному повышению интенсивности на хвостах КДО по сравнению с интенсивностью когерентной составляющей, а также к уменьшению контрастности осцилляций. Слабый провал в ДР под пиком отражения слоем связан с экстинкцией в нем падающего пучка. Период осцилляций  $\Delta\vartheta_{\text{осц}} = \lambda/2l \cos \vartheta_B$  позволяет определить толщину слоя, а сдвиг  $\Delta\vartheta_0$  — рассогласование  $\Delta d/d$ , однако наличие достаточно интенсивного ДР может затруднить прецизионное измерение величины  $\Delta\vartheta_{\text{осц}}$ . Если легирующие примеси такие, что  $\Delta d/d = 0$  (см. [15]), то пики отражения от слоя и подложки совпадают. При этом ширина кривой отражения практически не отличается от ширины КДО от совершенного кристалла, однако ДР приводит к появлению широких хвостов с обеих сторон от области полного отражения (рис. 2). Отметим, что это может (без учета ДР) ошибочно трактоваться как наличие в нарушенном слое областей с положительной и отрицательной деформациями  $\Delta d(z)/d$ .

С увеличением дефектности в слое интенсивность ДР при  $E < 1$  резко возрастает и КДО может кардинальным образом отличаться от кривой чисто когерентного отражения (рис. 3). Интегральная интенсивность

отражения  $\rho$  может в несколько раз превышать  $\rho^c$ , которая следует из расчетов в приближении когерентного рассеяния.

В случае Лауэ решение уравнений (15) для интенсивности ДР на нижней поверхности нарушенного слоя имеет вид

$$I_g^i(z_1+l) = \sigma_{gg'} e^{-\mu_g(z_1+l)} \int_{z_1}^{z_1+l} I_g^0 e^{\mu_g z} dz. \quad (20)$$

Подставляя сюда (4) с  $A_g^{(v)}$  (9) в случае  $z_1=0$  и  $A_g^{(v)}$  (13) в случае  $z_1=L-l$ , для интенсивностей ДР в направлениях падающего ( $g=0$ ) и отраженного ( $g=h$ ) пучков получим

$$I_g^i(z_1+l) = \sigma_{gg'} \sum_{v'v''} A_g^{(v)} A_{g'}^{(v')} L_{v'v''}^*(g) e^{-\mu_{v'v''}(z_1+l)}, \quad (21)$$

где  $L_{v'v''}^{(g)}$  определены в (17) с  $s=1$ .

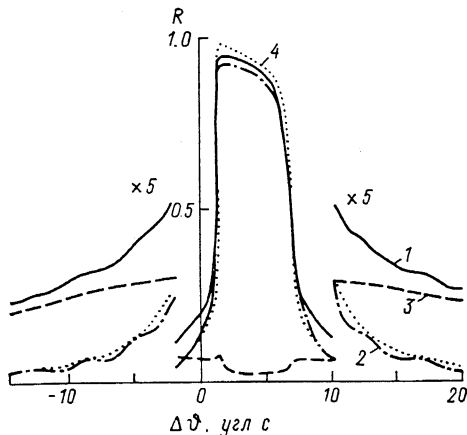


Рис. 2. Влияние ДР на угловое распределение КДО от кристалла с эпитаксиальной пленкой при  $l=2 \Delta$ ,  $E=0.95$ ,  $r_d=0.5$  мкм,  $\Delta d/d=0$ .

1 —  $R$ , 2 —  $I_h^0$ , 3 —  $I_h^i$ , 4 — КДО от совершенного кристалла  $|R_0|^2$ .

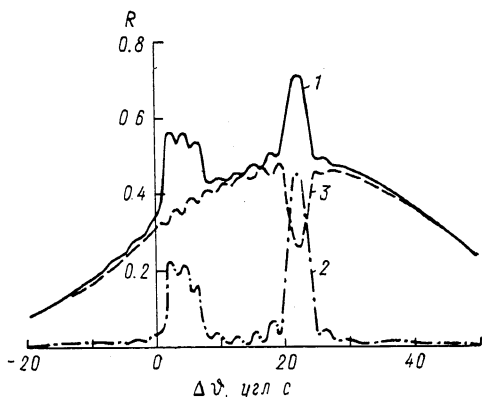


Рис. 3. КДО от эпитаксиальной структуры с параметрами слоя:  $l=3 \Delta$ ,  $E=0.5$ ,  $r_d=0.5$  мкм,  $\Delta d/d=-2 \cdot 10^{-4}$ .

1 —  $R$ , 2 —  $I_h^0$ , 3 —  $I_h^i$ .

Если  $z_1=L-l$  (слой на выходной поверхности), то  $I_g^i(L)$  (20) и будет окончательным решением задачи. При этом двухкристалльные коэффициенты отражения и прохождения определяются выражениями

$$R = I_h^c + I_h^i, \quad T = I_g^c + I_g^i, \quad (22)$$

где  $I_h^c = |R^c|^2$ ,  $I_0^c = |T^c|^2$  ( $R^c$  и  $T^c$  см. в (14)).

Если же нарушенный слой находится на входной поверхности  $z_1=0$ , то следует учесть динамическое (с учетом аномального прохождения) распространение в лежащей ниже совершенной подложке расходящегося диффузного излучения, которое образовалось в нарушенном слое и имеет интегральную по углам выхода интенсивность  $I_g^i(l)$  (21). Для этого сечения ДР  $\sigma_{0h}(\Delta\vartheta)$  в  $I_g^i(l)$  (21) необходимо заменить на зависящее от угла падения  $\Delta\vartheta$  и угла выхода диффузного излучения  $\Delta\vartheta'$  дифференциальное сечение  $\sigma_d$ , где

$$\sigma_d(\Delta\vartheta, \Delta\vartheta') = 2 |a_{0h}|^2 (1 - E^2) \tau_r G(\Delta\vartheta'), \quad (23)$$

$G(\Delta\vartheta')$  — нормированная на единицу функция, описывающая угловое по  $\Delta\vartheta'$  распределение ДР при фиксированном положении кристалла  $\Delta\vartheta$ . Затем необходимо учесть дифракцию расходящегося диффузного излучения в совершенной части кристалла и провести интегрирование интенсивности ДР по  $\Delta\vartheta'$ , т. е.

$$I_g^{\pm}(L) = \int_{-\infty}^{\infty} [I_g^{\pm}(l) T' + I_{g'}^{\pm}(l) R'] d\Delta\vartheta' \quad (g \neq g'). \quad (24)$$

Здесь  $R'$ ,  $T'$  — коэффициенты отражения и прохождения интенсивности диффузного излучения в совершенной подложке, которые с учетом (8), (9) и (5) имеют вид

$$R'(\Delta\vartheta') = \left| \frac{a_{h0}}{\beta'} \right|^2 [e^{-\mu'_1(L-l)} + e^{-\mu'_2(L-l)}],$$

$$T'(\Delta\vartheta') = \left| \frac{\beta' + \eta'}{2\beta'} \right|^2 e^{-\mu'_1(L-l)} + \left| \frac{\beta' - \eta'}{2\beta'} \right|^2 e^{-\mu'_2(L-l)}, \quad (25)$$

где

$$\eta' = 2\kappa\Delta\vartheta' \sin \vartheta_B, \quad \beta' = (\eta'^2 + 4a_{0h}a_{h0})^{1/2}, \quad \mu'_i = \text{Im}(2a_{00} + \eta' \pm \beta').$$

Двухкристальные коэффициенты отражения  $R$  и прохождения  $T$  кристалла с нарушенным верхним слоем имеют вид (22), где  $R^c$  и  $T^c$  определяются выражениями (12).

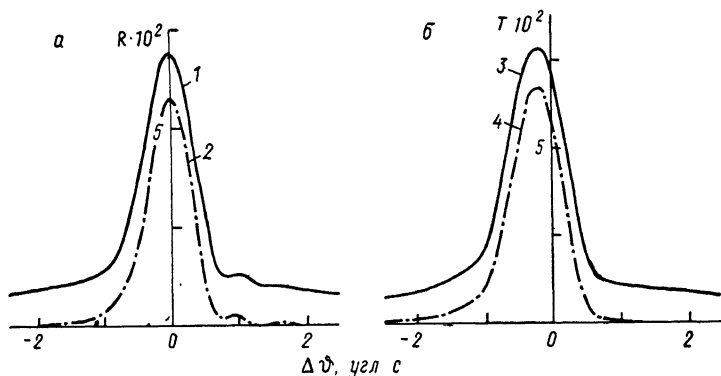


Рис. 4. Влияние аномального прохождения диффузно рассеянного излучения на кривые отражения (а) и прохождения (б).

Параметры нарушенного слоя:  $E = 0.5$ ,  $r_d = 1.5$  мкм,  $\Delta d/d = 0$ . 1 —  $R$ , 2 —  $I_h^c$ , 3 —  $T$ , 4 —  $I_g^c$ .

Используя результаты работы [23], функцию  $G$  в (23) в симметричном случае Лауэ можно аппроксимировать следующим образом:

$$G(\Delta\vartheta') = \frac{1}{\pi} \frac{2\kappa\eta_0 \sin \vartheta_B}{(\eta' + \eta \cos 2\vartheta_B)^2 + \eta_0^2}, \quad (26)$$

$$\eta_0 = 0.766 [(\eta \sin 2\vartheta_B)^2 + (5.62r_d^{-1} \sin \vartheta_B)^2]^{1/2},$$

где  $\eta_0$  — полуширина углового распределения ДР при фиксированном отклонении  $\Delta\vartheta$ .

Если условия дифракции для квантов ДР не выполняются, т. е.  $|\eta'| \gg \gg 2|a_{0h}|$ , то в (24)  $R' \approx 0$ ,  $T' \approx \exp(-\mu\bar{l})$ . При этом интенсивность ДР экспоненциально затухает с коэффициентом нормального фотопоглощения и в случае толстого кристалла с  $\mu\bar{l} \gg 1$  практически не дает вклада в  $R$  и  $T$ . Если же  $|\eta'| \leq 2|a_{0h}|$ , то для части диффузной компоненты реализуется явление аномального прохождения (эффект Бормана). Таким образом, наличие нарушенного слоя с  $E < 1$ , созданного, например, путем грубой шлифовки входной поверхности толстого кристалла, приводит к увеличению интенсивностей прошедшего и отраженного пучков по сравнению со случаем, когда нарушенный слой отсутствует. Экспериментально усиление эффекта Бормана было обнаружено при измерении двухкристальных [28, 29] и трехкристальных [30] КДО от кристаллов с нарушенной поверхностью, а также при анализе интегральных интенсивностей лауэ-отражений в кристаллах с объемными дефектами [31].

На рис. 4 изображены расчетные кривые отражения и прохождения в случае симметричной лауэ-дифракции (220)  $\text{MoK}_\alpha$ -излучения в кристалле кремния ( $\Delta = 10.9$  мкм) с нарушенным слоем на входной поверхности. Для определенности, как и в эксперименте [28], толщина кристалла  $\mu L/\gamma_0 = 11.8$ , толщина нарушенного слоя  $l = 6\Delta$ . Превышение кривых  $R$  и  $T$  по сравнению с когерентными составляющими  $I_h^c$  и  $I_0^c$  увеличивается с ростом толщин кристалла и слоя, а также с увеличением концентрации и размера дефектов. Из-за широких хвостов, вызванных аномально прошедшим диффузным излучением, интегральные интенсивности увеличиваются в большей степени, чем значения  $R$  и  $T$  в максимуме. Слабый дополнительный пик в коэффициенте отражения связан с отличием периода маятниковых биений в слое и в подложке. С улучшением совершенства слоя, т. е. с увеличением статфактора  $E$ , он приближается к основному пику, а его амплитуда уменьшается. В случае нарушенного слоя на выходной поверхности кристалла интенсивность дифрагированных пучков возрастает в основном (при прочих равных условиях) лишь в центральной части кривых. При этом кривая отражения становится несимметричной и ее максимум смещается в область отрицательных углов  $\Delta\theta$ .

Таким образом, в настоящей работе показано, что диффузное рассеяние в нарушенном поверхностном слое может приводить к значительному отклонению угловых зависимостей отражения и прохождения от кривых, рассчитанных при учете одного лишь когерентного рассеяния. В случае достаточно сильных нарушений это обстоятельство существенно осложняет задачу однозначного восстановления профиля деформации по данным двухкристалльных дифрактометрических экспериментов. Вклад ДР можно варьировать путем изменения параметра  $\tau/\Delta$  при использовании различных длин волн и порядков отражения.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Takagi S. // J. Phys. Soc. Jap. 1969. V. 26. N 5. P. 1239—1259.
- [2] Taupin D. // Bull. Soc. Franc. Miner. Cryst. 1964. V. 87. N 3. P. 469—511.
- [3] Burgeat J., Taupin D. // Acta Cryst. 1968. V. A24. N 1. P. 99—103.
- [4] Afanas'ev A. M., Kohn V. G. // Acta Cryst. 1971. V. A27. N 5. P. 421—430.
- [5] Kato N. // Z. Naturforsch. 1973. V. 28a. N 5. P. 604—609.
- [6] Burgeat J., Colella R. // J. Appl. Phys. 1969. V. 40. N 9. P. 3505—3509.
- [7] Петрашень П. В. // ФТТ. 1974. Т. 16. № 8. С. 2168—2175.
- [8] Fukahara A., Takano Y. // Acta Cryst. 1977. V. A33. N 1. P. 137—142.
- [9] Afanasev A. M., Kovalchuk M. V., Kovev E. K., Kohn V. G. // Phys. St. Sol. (a). 1977. V. 42. N 1. P. 415—422.
- [10] Kyutt R. N., Petrashen P. V., Sorokin L. M. // Phys. St. Sol. (a). 1980. V. 60. N 2. P. 381—389.
- [11] Kohn V. G., Kovalchuk M. V., Imamov R. M., Lobanovich E. F. // Phys. St. Sol. (a). 1981. V. 64. N 2. P. 435—442.
- [12] Беляев Ю. Н., Колпаков А. В., Кузьмин Р. Н. // ЖТФ. 1983. Т. 53. № 4. С. 759—761.
- [13] Колпаков А. В., Пунегов В. И. // Вестн. Моск. ун-та, физ., астрон. 1984. Т. 25. № 6. С. 64—67.
- [14] Кон В. Г., Прилепский М. В., Суходрева И. М. // Поверхность. 1984. № 11. С. 122—128.
- [15] Ковальчук М. В., Кон В. Г., Лобанович Э. Ф. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 11. С. 3379—3387.
- [16] Iida A., Kohra K. // Phys. St. Sol. (a). 1979. V. 51. N 2. P. 533—542.
- [17] Казимиров А. Ю., Ковальчук М. В., Кон В. Г. // Металлофизика. 1987. Т. 9. № 4. С. 54—58.
- [18] Kato N. // Acta Cryst. 1980. V. A36. N 5. P. 763—769.
- [19] Молодкин В. Б. // Металлофизика. 1981. Т. 3. № 4. С. 27—38.
- [20] Молодкин В. Б., Олиховский С. И., Осинковский М. Е. // Металлофизика. 1983. Т. 5. № 1. С. 3—15; № 5. С. 3—11.
- [21] Holy V., Gabrielyan K. T. // Phys. St. Sol. (b). 1987. V. 140. N 1. P. 39—50.
- [22] Holy V., Kubena J. // Phys. St. Sol. (b). 1987. V. 141. N 1. P. 35—45.
- [23] Бушуев В. А. // Деп. в ВИНТИ. М., 1988. № 486-B88.
- [24] Бушуев В. А. // Кристаллография. 1989. Т. 34. № 2. С. 279—287.
- [25] Петрашень П. В. // Металлофизика. 1986. Т. 8. № 1. С. 35—43.
- [26] Петрашень П. В., Чуховский Ф. Н. // Металлофизика. 1986. Т. 8. № 3. С. 45—51.
- [27] Бушуев В. А., Чен Т. // Вестн. Моск. ун-та, физ., астрон. 1988. Т. 29. № 6. С. 58—63.



- [28] Даценко Л. И., Хрупа В. И., Крыштаб Т. Г., Кисловский Е. Н. // УФЖ. 1985. Т. 30. № 8. С. 1182—1185.
- [29] Даценко Л. И., Крыштаб Т. Г., Кисловский Е. Н., Хрупа В. И. // УФЖ. 1988. Т. 33. № 5. С. 767—772.
- [30] Кютт Р. Н., Ратников В. В. // Металлофизика. 1985. Т. 7. № 1. С. 36—41.
- [31] Олехнович Н. М., Карпей А. Л., Олехнович А. И. // Металлофизика. 1984. Т. 6. № 5. С. 46—50.

Московский государственный  
университет им. М. В. Ломоносова  
Москва

Поступило в Редакцию  
10 мая 1989 г.

---