

01

## Рентгеновская дифракция в тонком кристалле с неоднородным изгибом отражающих атомных плоскостей

© В.И. Пунегов

Физико-математический институт Федерального исследовательского центра „Коми научный центр УрО РАН“,  
167982 Сыктывкар, Россия  
e-mail: vpunegov@dm.komisc.ru

Поступило в Редакцию 2 апреля 2024 г.

В окончательной редакции 2 апреля 2024 г.

Принято к публикации 2 апреля 2024 г.

Теоретически рассмотрена кинематическая рентгеновская дифракция в тонком изогнутом кристалле с изменяющимся по его глубине радиусом изгиба. Разработан алгоритм расчетов интенсивности рассеяния вблизи узла обратной решетки от такой структуры на основе рекуррентных соотношений. Выполнено численное моделирование рентгеновской дифракции в кристалле кремния в рамках четырех моделей микроструктур. Показано, что карты распределения дифракционной интенсивности в обратном пространстве существенно зависят от закона изменения радиуса изгиба в кристалле.

**Ключевые слова:** кинематическая рентгеновская дифракция, карты распределения дифракционной интенсивности в обратном пространстве, моделирование дифракции в изогнутом кристалле.

DOI: 10.61011/JTF.2024.07.58331.106-24

### Введение

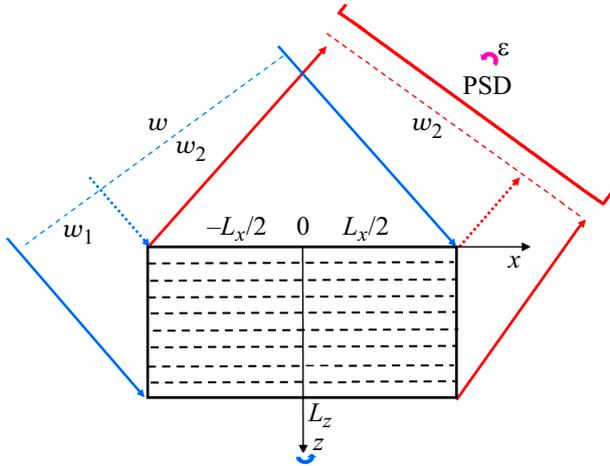
Изогнутые кристаллы используются для рентгеновской фокусировки [1] и спектроскопии [2], для получения спектров гамма-излучения, генерируемых электронами высоких энергий в изогнутых кристаллах [3] и для отклонения заряженных частиц высокой энергии при коллимации пучка на ускорительных установках благодаря явлению каналирования [4]. Кроме того, тонкие полупроводниковые кристаллы с неоднородным изгибом находят применение в микроэлектромеханических системах, например, в аэрокосмической, автомобильной или часовой промышленности [5].

Дифракция рентгеновских лучей является перспективным методом исследования деформированных кристаллов, включая изогнутые периодические структуры [5]. Анализ экспериментальных данных рентгеновского рассеяния в изогнутых кристаллах должен основываться на теоретических разработках. В настоящее время имеется достаточное количество теорий, описывающих дифракцию в изогнутых кристаллах (см., например, [6] и приведенные в этой статье ссылки). Однако, зачастую, численные расчеты на основе этих теорий не согласуются с экспериментальными данными. Более того, нет научных работ, в которых были бы представлены численные расчеты картографирования интенсивности рентгеновского рассеяния в обратном пространстве (reciprocal space mapping) от изогнутых кристаллов. Это связано с тем, что все теории построены с использованием одномерных уравнений дифракции в рамках падающей на кристалл плоской рентгеновской волны. На самом деле, дифракция рентгеновских лучей в изогнутом кристалле должна описываться двумерными уравнениями, поскольку возникающая

деформация кристаллической решетки распределяется как в вертикальном, так и латеральном направлении в периодической структуре. Кроме того, для описания дифракции в изогнутом кристалле необходимо использовать модель пространственно ограниченных рентгеновских пучков [7,8]. Задача усложняется, если изгиб кристалла неоднороден по глубине образца. Такая деформация кристаллической решетки может быть вызвана приклеиванием кристаллического чипа на печатную плату (PCB) [9]. В настоящей работе предложен метод, позволяющий рассчитывать карты рентгеновской когерентной дифракции в обратном пространстве (reciprocal space maps (RSMs)) с изменяющимся по глубине радиусом изгиба отражающих атомных плоскостей.

### 1. Рентгеновская дифракция в тонком кристалле с изменяющимся изгибом отражающих атомных плоскостей

Рассмотрим кинематическую рентгеновскую дифракцию в тонком кристалле. Будем считать, что поперечная ширина падающего рентгеновского пучка больше размера кристалла. Целью данного исследования является разработка алгоритма вычислений картографирования рентгеновского рассеяния в обратном пространстве применительно к методу высокоразрешающей рентгеновской дифракции [10]. В трехосевой дифрактометрии угловое положение образца  $\omega$  и анализатора (позиционно чувствительного детектора) связаны с проекциями отклонения вектора дифракции от узла обратной решетки соотношениями:  $q_x = k \sin \theta_B (2\omega - \varepsilon)$ ,



**Рис. 1.** Схема рентгеновской дифракции в плоскости  $(x, z)$  от совершенного кристалла толщиной  $L_z$ ,  $w$  — ширина падающего на латеральную структуру рентгеновского пучка, нижняя  $w_1$  и верхняя  $w_2$  части пучка засвечивают боковую грань и поверхность кристалла размером  $L_x$ . PSD — позиционно чувствительный детектор,  $\omega$  и  $\varepsilon$  — повороты кристалла и детектора в плоскости  $(x, z)$  соответственно.

$q_z = -k \cos \theta_B \varepsilon$ , где  $\theta_B$  — угол Брэгга,  $k = 2\pi/\lambda$  — волновое число,  $\lambda$  — длина волны рентгеновского излучения в вакууме.

Сначала рассмотрим кинематическую дифракцию в совершенном кристалле толщиной  $L_z$  и шириной  $L_x$  (рис. 1). На кристалл падает рентгеновский пучок размером  $w$ , пространство  $(x, z)$  является плоскостью и  $(L_x \cdot L_z)$  площадью дифракции. По оси  $y$  интенсивность волнового рентгеновского фронта, как правило, интегрируется.

Распределение дифракционной интенсивности вблизи узла обратной решетки совершенного кристалла запишется как

$$I_h(q_x, q_z) = |E_h(q_x, q_z)|^2 = |ia_h L_x L_z \text{sinc}(q_x L_x / 2) \text{sinc}([2a_0 - q_z] L_z / 2)|^2, \quad (1)$$

где  $\text{sinc}(x) = \sin(x)/x$ ,  $E_h(q_x, q_z)$  — амплитуда дифрагированной волны,  $a_0 = \pi \chi_0 / (\lambda \gamma_0)$ ,  $a_h = C \pi \chi_h / (\lambda \gamma_{h,0})$ ,  $\lambda$  — длина волны рентгеновского излучения в вакууме,  $\gamma_{h,0} = \sin \theta_B$ ,  $C$  — поляризационный фактор,  $\chi_{0,h} = -r_0 \lambda^2 F_{0,h} / (\pi V_c)$  — фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости и  $F_{0,h}$  — структурные факторы в направлении падающей и дифракционной волны соответственно,  $V_c$  — объем элементарной ячейки,  $r_0 = e^2 / (mc^2)$  — классический радиус электрона,  $e$ ,  $m$  — заряд и масса электрона.

Для описания динамической дифракции в деформированном кристалле в симметричной геометрии Брэгга

используются уравнения Такаги–Топена [11,12]:

$$\begin{cases} (\cot \theta_B \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z}) E_0(\eta; x, z) = ia_0 E_0(\eta; x, z) \\ \quad + ia_{-h} \phi(x, z) E_h(\eta; x, z), \\ (\cot \theta_B \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial z}) E_h(\eta; x, z) = i(a_0 + \eta) E_h(\eta; x, z) \\ \quad + ia_h \phi^*(x, z) E_0(\eta; x, z), \end{cases} \quad (2)$$

где  $E_{0,h}(\eta; x, z)$  — амплитуды проходящей и дифрагированной волны,  $\eta = 2k \cos(\theta_B) \omega$  — угловой параметр, используемый в двухкристальной дифрактометрии в режиме  $\theta - 2\theta$  сканирования,  $k = 2\pi/\lambda$  — волновое число.

В уравнениях (2) присутствует фазовый фактор  $\phi(x, z) = \exp(ihu_z(x, z))$ , при этом „звездочка“ означает комплексное сопряжение,  $h$  — величина вектора обратной решетки, причем  $h = 2\pi/d_{hkl}$ , где  $d_{hkl}$  — межплоскостное расстояние,  $u_z(x, z)$  — проекция вектора атомных смещений в направлении вектора обратной решетки.

Фазовый фактор  $\phi(x, z)$ , присутствующий в уравнениях (2) для изогнутого кристалла, можно представить в виде произведения  $\phi(x, z) = \phi_x(x) \phi_z(z)$ , где  $\phi_x(x) = \exp(ihu_z(x))$  и  $\phi_z(z) = \exp(ihu_z(z))$ . Уравнения (2) переписутся в виде

$$\begin{cases} (\cot \theta_B \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z}) E_0(\eta; x, z) = ia_0 E_0(\eta; x, z) \\ \quad + ia_{-h} \phi_x(x) \phi_z(z) E_h(\eta; x, z), \\ (\cot \theta_B \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial z}) E_h(\eta; x, z) = i(a_0 + \eta) E_h(\eta; x, z) \\ \quad + ia_h \phi_x^*(x) \phi_z^*(z) E_0(\eta; x, z). \end{cases} \quad (3)$$

Выполним фурье-преобразование для когерентных амплитуд рентгеновских полей в системе уравнений (3):

$$E_{0,h}(\eta; x, z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_x \exp(iq_x x) \hat{E}_{0,h}(q_x, \eta; z), \quad (4)$$

где фурье-образы запишутся как

$$\hat{E}_{0,h}(q, \eta; z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(-iq_x x) E_{0,h}(\eta; x, z). \quad (5)$$

Проведем также фурье-преобразование для фазового множителя  $\phi_x(x)$ :

$$\phi_x(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_x \exp(iq_x x) \phi_x(q_x), \quad (6)$$

где его фурье-образ запишется

$$\phi_x(q_x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(-iq_x x) \phi_x(x). \quad (7)$$

Подставляя (5) и (7) в систему (3), получаем интегро-дифференциальные уравнения в фурье-пространстве

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \hat{E}_0(\kappa, \eta; z)}{\partial z} = i(a_0 - \kappa \cot \theta_B) \hat{E}_0(\kappa, \eta; z) \\ + i a_{\bar{h}} \frac{\phi_z(z) \phi_x(\kappa)}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\kappa' \exp(i\kappa'x) \hat{E}_h(\kappa', \eta; z), \\ - \frac{\partial \hat{E}_h(\kappa, \eta; z)}{\partial z} = i(a_0 + \eta - \kappa \cot \theta_B) \hat{E}_h(\kappa, \eta; z) \\ + i a_{\bar{h}} \frac{\phi_z^*(z) \phi_x^*(\kappa)}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\kappa' \exp(i\kappa'x) \hat{E}_0(\kappa', \eta; z). \end{array} \right. \quad (8)$$

Система уравнений (8) описывает динамическую дифракцию в фурье-пространстве. В случае кинематического приближения, когда  $a_{\bar{h}} = 0$ , эти уравнения примут вид

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \hat{E}_0(q_x, \eta; z)}{\partial z} = i(a_0 - q_x \cot \theta_B) \hat{E}_0(q_x, \eta; z), \\ - \frac{\partial \hat{E}_h(q_x, \eta; z)}{\partial z} = i(a_0 + \eta - q_x \cot \theta_B) \hat{E}_h(q_x, \eta; z) \\ + i a_{\bar{h}} \phi_z^*(z) \phi_x^*(q_x) \int_{-\infty}^{+\infty} dq'_x \exp(iq'_x x) \hat{E}_0(q'_x, \eta; z). \end{array} \right. \quad (9)$$

Заменой амплитуд рентгеновских волн

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{E}_0(q_x, \eta; z) = \tilde{E}_0(q_x, \eta; z) \exp(i(a_0 - q_x \cot \theta_B)z), \\ \hat{E}_h(q_x, \eta; z) = \tilde{E}_h(q_x, \eta; z) \exp(-i(a_0 + \eta - q_x \cot \theta_B)z), \end{array} \right. \quad (10)$$

и используя граничные условия

$$\begin{aligned} \hat{E}_0(\eta; x, 0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\kappa' \exp(i\kappa'x) \tilde{E}_0(\kappa', \eta; 0) \\ &= \begin{cases} 1 & x \in \pm L_x/2 \\ 0 & x \notin \pm L_x/2, \end{cases} \end{aligned}$$

где  $L_x$  — ширина засветки поверхности кристалла, система уравнений (10) запишется как

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \tilde{E}_0(q_x, \eta; z)}{\partial z} = 0, \\ - \frac{\partial \tilde{E}_h(q_x, \eta; z)}{\partial z} = i a_{\bar{h}} \phi_z^*(z) \phi_x^*(q_x) \exp(-i(a_0 + \eta - q_x \cot \theta_B)z). \end{array} \right. \quad (11)$$

Согласно (11), уравнение для амплитуды дифракционной волны примет вид

$$\begin{aligned} \tilde{E}_h(q_x, \eta; z) &= -i a_{\bar{h}} \int_z^0 dz' \phi_z^*(z') \\ &\times \exp(i[a_0 + \eta]z') \phi_x^*(q_x) \exp(-i q_x \cot \theta_B z'). \end{aligned} \quad (12)$$

Выполняя обратное фурье-преобразование (12) и учитывая  $\phi_x^*(q_x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(iq_x x) \phi_x(x)$ , амплитуды дифракци-

онной волны, зависящая от пространственных координат  $(x, z)$ , может быть представлена в виде интеграла

$$\begin{aligned} \tilde{E}_h(q_x, \eta; z) &= i a_{\bar{h}} \int_0^z dz' \phi_z^*(z') \\ &\times \exp(i[a_0 + \eta - q_x \cot \theta_B]z') \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(iq_x x) \phi_x(x). \end{aligned} \quad (13)$$

В случае трехкристалльной дифрактометрии угловая переменная  $\eta$  в уравнениях дифракции запишется как  $\eta = q_x \cot \theta_B - q_z$ , тогда

$$\begin{aligned} \tilde{E}_h(q_x, q_z; z) &= i a_{\bar{h}} \int_0^z dz' \phi_z^*(z') \\ &\times \exp(i[a_0 - q_z]z') \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(iq_x x) \phi_x(x). \end{aligned}$$

Выражение для интенсивности дифракционной волны от кристалла шириной  $L_x$  и толщиной  $L_z$  имеет вид

$$\begin{aligned} I_h(q_x, q_z) &= \left| i a_{\bar{h}} \int_0^{L_z} dz \exp(i[a_0 - q_z]z) \phi_z(z) \right. \\ &\times \left. \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx \phi_x(x) \exp(iq_x x) \right|^2. \end{aligned} \quad (14)$$

Поле атомных смещений изогнутого кристалла запишется как

$$u_z(x, z) = u_z(x) + u_z(z), \quad (15)$$

где

$$u_z(x) = \frac{x^2}{2R}, \quad u_z(z) = \begin{cases} -\frac{\alpha}{2R} \left(z - \frac{L_z}{2}\right)^2, & z \leq -\frac{L_z}{2}, \\ \frac{\alpha}{2R} \left(z - \frac{L_z}{2}\right)^2, & z > \frac{L_z}{2}, \end{cases} [13].$$

Здесь  $R$  — радиус изгиба, постоянный коэффициент  $\alpha$  зависит от модулей упругости и ориентации кристалла. Если радиус изгиба кристалла изменяется по глубине периодической структуры, то кристалл можно представить в виде многослойной структуры из  $N$  слоев. Амплитуды дифрагированной рентгеновской волны  $E_h^N(q_x, q_z)$  от такой системы вычисляются с использованием рекуррентного соотношения

$$E_h^N(q_x, q_z) = E_h^{N-1}(q_x, q_z) + \exp(iq_z L_z^{N-1}) E_h^N(q_x, q_z), \quad (16)$$

где  $E_h^{N-1}(q_x, q_z)$  и  $E_h^N(q_x, q_z) = i a_{\bar{h}} \int_0^{L_z^N} dz \exp[i(a_0 - q_z]z] \phi_z^n(z) \int_{-L_x^n/2}^{L_x^n/2} dx \phi_x^n(x) \exp(iq_x x)$  — амплитуды

отраженных волн от  $N - 1$  верхних слоев и нижнего слоя соответственно,  $L_z^{N-1}$  — толщина верхних  $N - 1$  слоев,  $L_z^n$  — толщина  $n$ -го слоя. Одномерные фазовые функции для  $n$ -го слоя имеют вид

$$\phi_x^n(x) = \exp\left[-ih \frac{x^2}{2R_n}\right]$$

и

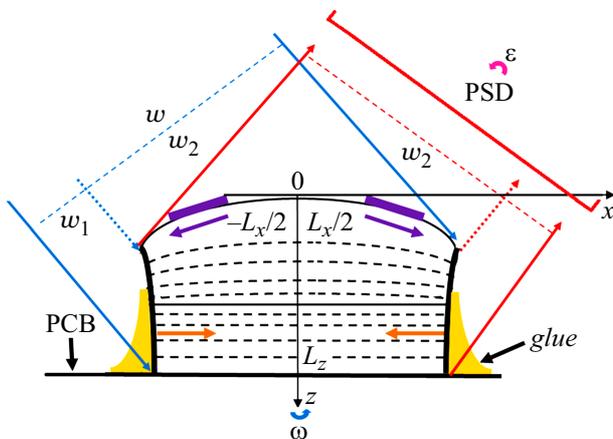
$$\phi_z^n(z) = \exp\left[-ih \begin{cases} -\frac{\alpha}{2R_n} \left(z - \frac{L_z^n}{2}\right)^2 & z \leq -\frac{L_z^n}{2} \\ \frac{\alpha}{2R_n} \left(z - \frac{L_z^n}{2}\right)^2 & z > \frac{L_z^n}{2} \end{cases}\right],$$

где  $R_n$  — радиус изгиба атомных плоскостей этого слоя.

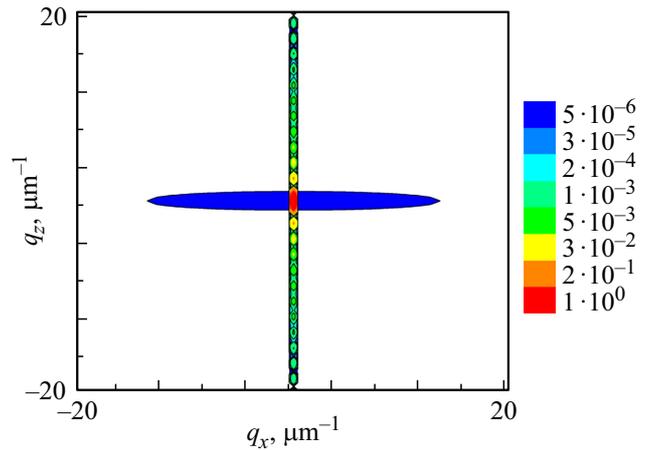
## 2. Численное моделирование картографирования рентгеновской дифракции в кристалле с неоднородным радиусом изгиба

Полученные выше теоретические результаты используем для вычисления карт RSM для четырех моделей кристаллической микроструктуры кремния. Рассмотрены разные варианты распределения изгиба отражающих атомных плоскостей по глубине кристалла толщиной  $L_z = L_{z1} + L_{z2} + L_{z3}$ , где  $L_{z1,2,3}$  — толщины однородно изогнутой верхней, неоднородно изогнутой средней и неизогнутой нижней части чипа (рис. 2). В общем случае нижняя часть микроструктуры может быть совершенным или одномерно деформированным по глубине кристаллом.

Численные расчеты карт RSM выполнены для моделей микроструктур толщиной  $L_z = 4 \mu\text{m}$  в случае симметричного (333) отражения  $\sigma$ -поляризованного рентгеновского  $\text{CuK}\alpha_1$ -излучения. Ширина падающего пучка на латеральный кристалл составляет  $w = 103 \mu\text{m}$ , при этом



**Рис. 2.** Схематическое изображение чипа в плоскости  $(x, z)$  с неоднородным распределением изгиба отражающих атомных плоскостей по глубине кристалла. Здесь  $\omega$  и  $\epsilon$  — повороты кристалла и детектора в плоскости  $(x, z)$  соответственно.



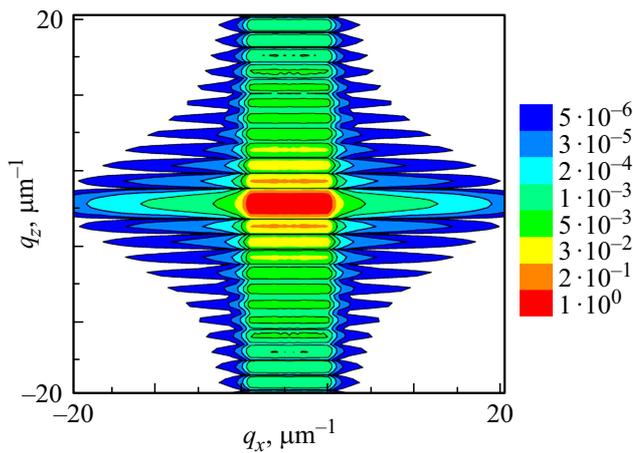
**Рис. 3.** Расчетная карта RSM от планарного совершенного кристалла толщиной  $4 \mu\text{m}$  и шириной поверхности  $L_x = 135 \mu\text{m}$ .

нижняя  $w_1 = 3 \mu\text{m}$  и верхняя  $w_2 = 100 \mu\text{m}$  части пучка засвечивают боковую грань и поверхность кристалла размером  $L_x = 135 \mu\text{m}$  соответственно (рис. 1, 2).

Наиболее простой в рассмотрении является первая модель, которая представляет собой планарный совершенный кристалл с постоянным межплоскостным расстоянием. Карта RSM для этой модели вычисляется на основе решения (1). На рис. 3 показано угловое распределение интенсивности рентгеновского рассеяния вблизи обратной решетки от совершенного латерального кристалла. Вертикальная полоса (стержень) на карте RSM относится к распределению интенсивности главного дифракционного максимума. Ширина этой полосы зависит от латерального размера кристалла: чем уже кристалл, тем шире эта полоса. Периодические максимумы вдоль вертикальной полосы связаны с толщиной кристалла. Латеральная усеченная полоса малой интенсивности, перпендикулярная главному дифракционному стержню, обусловлена „хвостами“ кривой  $q_x$  сечения карты RSM.

Вторая модель относится к однородно изогнутому кристаллу с радиусом изгиба по всей толщине периодической структуры. Угловое распределение интенсивности рентгеновского рассеяния вблизи узла обратной решетки вычисляется с помощью решения (2). Рис. 4 демонстрирует расчетную карту от однородно изогнутого кристалла с радиусом изгиба  $R = 1 \text{ m}$ . В отличие от планарного латерального кристалла, полоса главного дифракционного максимума значительно уширена из-за изгиба отражающих атомных плоскостей. Как и для планарного кристалла, на карте RSM проявляется осцилляционная структура вдоль вертикального направления.

Микроструктуру с неоднородным по глубине изгибом отражающих атомных плоскостей описывает третья модель. Структура чипа имеет следующее строение: верхняя часть толщиной  $2.5 \mu\text{m}$  — изогнутый кристаллический слой с неизменным радиусом изгиба  $R = 1 \text{ m}$ ; нижняя



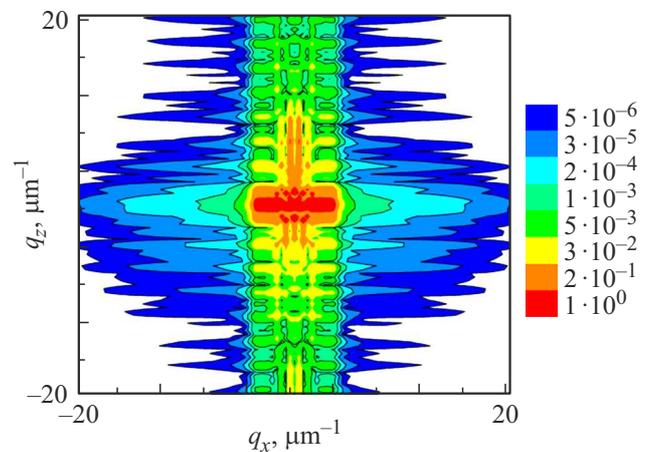
**Рис. 4.** Расчетная карта RSM от однородно изогнутого кристалла толщиной  $4\ \mu\text{m}$  и ширины поверхности  $L_x = 135\ \mu\text{m}$ . Радиус изгиба отражающих атомных плоскостей  $R = 1\ \text{m}$ .

часть представляет собой кристаллическую структуру толщиной  $1.5\ \mu\text{m}$ , при этом радиус изгиба в которой изменяется от 1 до 5 м. Вычисление карты RSM базируется на уравнении (2) для верхней части. Далее этот результат стыкуется с вычислением амплитуды дифрагированной рентгеновской волны от нижней части по рекуррентной формуле (4). На рис. 5 изображена расчетная карта RSM от неоднородно изогнутого кристалла, соответствующая третьей модели. Если для однородно изогнутой структуры карта RSM является симметричной как в вертикальном, так и в латеральном направлении (рис. 4), то в случае неоднородно изогнутого кристалла такая симметрия отсутствует (рис. 5). Расчеты показывают, что распределение интенсивности рентгеновского рассеяния вблизи узла обратной решетки сильно зависит от закона изменения радиуса изгиба отражающих атомных плоскостей. Это демонстрирует расчет рентгеновской дифракции от структуры, соответствующей четвертой модели.

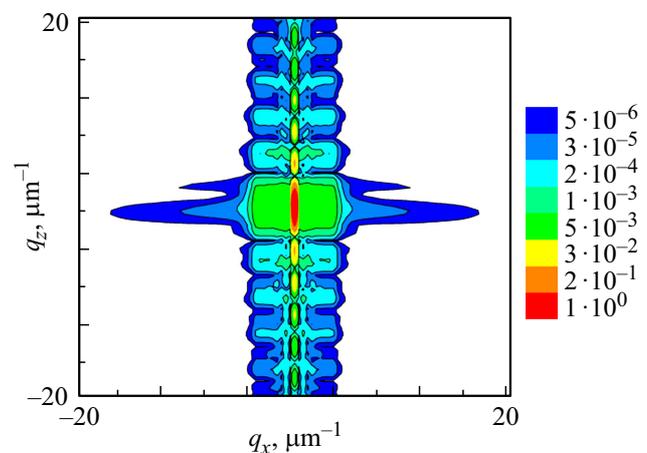
Четвертая модель представляет собой чип с неоднородно изогнутой верхней частью и неизогнутой нижней областью (рис. 6). Структура такого чипа состоит из однородно изогнутого верхнего слоя толщиной  $1.75\ \mu\text{m}$  и радиусом изгиба  $R = 1\ \text{m}$ . Имеется переходный средний слой толщиной  $0.25\ \mu\text{m}$ , в котором радиус изгиба изменяется от 1 до 5 м. Нижней частью чипа является идеальный кристалл толщиной  $2\ \mu\text{m}$ .

Латеральные  $q_x$  сечения карт RSM от вышерассмотренных моделей микроструктур демонстрирует рис. 7. Для совершенного кристалла  $q_x$  сечение имеет профиль обычной кинематической кривой дифракционного отражения (кривая 1). Побочные осцилляции  $q_x$  сечения соответствуют ширине поверхности кристалла, при этом чем больше размер освещенной поверхности, тем меньше период осцилляций. Наличие изгиба отражающих атомных плоскостей заметно уширяет профиль  $q_x$  сечения (рис. 7, кривая 2). Кривая 3 на рис. 7

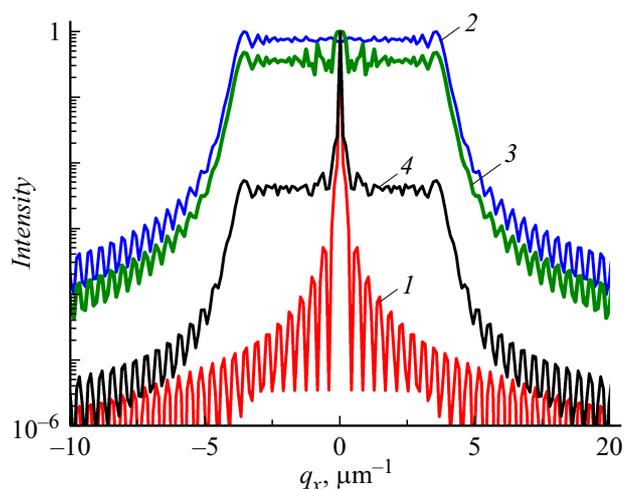
соответствует  $q_x$  сечению расчетной карты RSM от неоднородно изогнутого кристалла, в котором верхняя часть толщиной  $2.5\ \mu\text{m}$  имеет однородный радиус изгиба  $R = 1\ \text{m}$ , в нижней части толщиной  $1.5\ \mu\text{m}$  радиус изменяется от 1 до 5 м. Рентгеновская дифракция на такой структуре, помимо уширенного профиля  $q_x$  сечения, сопровождается появлением узкого пика его в центре. Это связано с наличием слабдеформированной области в кристалле. Расчетное  $q_x$  сечение карты RSM от чипа с однородно изогнутой верхней частью толщиной  $1.75\ \mu\text{m}$  и  $R = 1\ \text{m}$ , средней частью толщиной  $0.25\ \mu\text{m}$  с переменным радиусом изгиба от 1 до 5 м, и неизогнутой нижней частью толщиной  $2\ \mu\text{m}$ , показано на рис. 7 (кривая 4). Наличие в кристалле слоя с постоянным межплоскостным расстоянием является причиной появления узкого



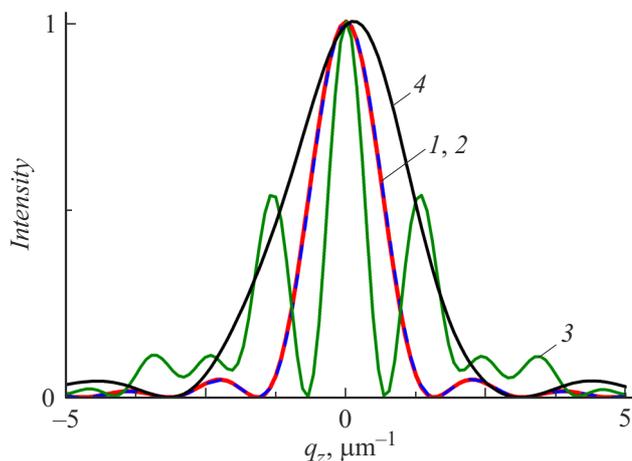
**Рис. 5.** Расчетная карта RSM от неоднородно изогнутого кристалла. Верхняя часть толщиной  $2.5\ \mu\text{m}$  имеет однородный радиус изгиба  $R = 1\ \text{m}$ , в нижней части кристалла толщиной  $1.5\ \mu\text{m}$  радиус изгиба изменяется от 1 до 5 м.



**Рис. 6.** Расчетная карта RSM от кристаллического чипа с однородно изогнутой верхней частью ( $R = 1\ \text{m}$ ) толщиной  $1.75\ \mu\text{m}$ , в средней части кристалла толщиной  $0.25\ \mu\text{m}$  радиус изменяется от 1 до 5 м, нижняя часть чипа толщиной  $2\ \mu\text{m}$  соответствует идеальному кристаллу.



**Рис. 7.** Расчетные  $q_x$ -сечения карт RSM в логарифмическом масштабе. Нумерация кривых соответствует сечениям карт на рис. 3–6 соответственно.



**Рис. 8.** Расчетные  $q_z$ -сечения карт RSM. Нумерация кривых соответствует сечениям карт на рис. 3–6 соответственно.

пика на фоне уширенного плато, возникающего из-за изгиба отражающих атомных плоскостей.

Рис. 8 демонстрирует расчетные  $q_z$ -сечения карт RSM от микрокристаллических систем четырех моделей. Интересно отметить, что профили  $q_z$ -сечений карт RSM совершенного и однородно изогнутого кристалла совпадают (кривые 1 и 2 на рис. 8). Объяснением этому служит тот факт, что кристалл тонкий и однородная деформация изгиба практически не влияет на поле атомных смещений вдоль вертикального направления. Неоднородная локальная деформация изгиба в кристалле приводит к интерференции рентгеновских волн от разных участков периодической структуры, что проявляется в формировании профиля кривой  $q_z$ -сечения (рис. 8, кривая 3). Наличие планарного слоя вдвое меньшей толщины уширяет кривую дифракционного отражения (рис. 8, кривая 4).

## Заключение

В работе на основе кинематического решения выполнено численное моделирование рентгенодифракционного картографирования от кристаллических кремниевых чипов разной конфигурации. Все вычисления выполнены для латерально ограниченных кристаллов, которые „купаются“ в рентгеновском пучке, т.е. засвечивается как боковая грань, так и верхняя поверхность чипа. Поскольку для совершенного кристалла используется аналитическое решение (1), вычисление карты RSM с использованием компьютера с процессором „Intel CORE i7-7740X“ с точки зрения временных затрат занимает порядка 1 с, а вычисления интенсивности рентгеновского рассеяния от изогнутого кристалла в рамках решения (2) требуют от 2 до 5 min. С другой стороны, численные решения с применением узловых сеток [14] на основе уравнений Такаги–Топена или двумерных рекуррентных соотношений такой же точности выполняются в течение 1 h.

## Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

## Финансирование работы

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 23-22-00062), <https://rscf.ru/project/23-22-00062/>.

## Список литературы

- [1] Y.I. Nesterets, S.W. Wilkins. *J. Appl. Cryst.*, **41**, 237 (2008). DOI: 10.1107/S0021889808000617
- [2] D. Zhu, M. Cammarata, J.M. Feldkamp, D.M. Fritz, J.B. Hastings, S. Lee, H.T. Lemke, A. Robert, J.L. Turner, Y. Feng. *Appl. Phys. Lett.*, **101**, 034103 (2012). <http://dx.doi.org/10.1063/1.4736725>
- [3] L. Bandiera, A. Sytov, D. De Salvador, A. Mazzolari, E. Bagli, R. Camattari, S. Carturan, C. Durighello, G. Germogli, V. Guidi, P. Klag, W. Lauth, G. Maggioni, V. Mascagna, M. Prest, M. Romagnoni, M. Soldani, V.V. Tikhomirov, E. Vallazza. *Eur. Phys. J. C*, **81**, 284 (1–9) (2021). DOI: 10.1140/epjc/s10052-021-09071-2
- [4] R. Camattari, M. Romagnoni, L. Bandiera, E. Bagli, A. Mazzolari, A. Sytov, S. Haaga, M. Kabukcuoglu, S. Bode, D. Henschke, A. Danilewsky, T. Baumbach, V. Bellucci, V. Guidia, G. Cavoto. *J. Appl. Crystallogr.*, **53**, 486 (2020). DOI: 10.1107/S1600576720002800
- [5] A. Neels, A. Dommann. *Techn. Proc. NSTI-Nanotech*, **2**, 182 (2010).
- [6] A.-P. Honkanen, C. Ferrero, J.-P. Guigay, V. Mocella, *J. Appl. Cryst.*, **51**, 514 (2018). <https://doi.org/10.1107/S1600576718001930>
- [7] V.I. Punegov, K.M. Pavlov, A.V. Karpov, N.N. Faleev. *J. Appl. Cryst.*, **50**, 1256 (2017). DOI: 10.1107/S1600576717010123
- [8] V.I. Punegov, S.I. Kolosov, K.M. Pavlov. *J. Appl. Cryst.*, **49**, 1190 (2016). DOI: 10.1107/S1600576716008396

- [9] A. Neels, G. Bourban, H. Shea, A. Schifferle, E. Mazza, A. Dommann. *Proced. Chem.*, **1**, 820 (2009).  
DOI: 10.1016/j.proche.2009.07.204
- [10] В.И. Пунегов. *УФН*, **185**, 449 (2015). [V.I. Punegov. *Physics–Uspekhi*, **58**, 419 (2015).  
DOI: 10.3367/UFNr.0185.201505a.0449]
- [11] S. Takagi. *Acta Cryst.*, **15**, 1311 (1962).
- [12] D. Taupin. *Bull. Soc. Fr. Miner. Crist.*, **87**, 469 (1964).
- [13] T. Fukamachi, S. Jongsukswat, D. Ju, R. Negishi, K. Hirano, T. Kawamura. *Acta Cryst. A*, **75**, 842 (2019).  
DOI: 10.1107/S2053273319011859
- [14] V.I. Punegov, S.I. Kolosov. *J. Appl. Cryst.*, **55**, 320 (2022).  
DOI: 10.1107/S1600576722001686