

ДИФРАКЦИЯ И РАССЕЯНИЕ
ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

УДК 548.732

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ ДИФРАКЦИОННОГО КОНТРАСТА
ПЛОСКОВОЛНОВЫХ РЕНТГЕНОВСКИХ ТОПОГРАММ
СЛАБОДЕФОРМИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛОВ В ГЕОМЕТРИИ БРЭГГА

© 2011 г. А. Э. Волошин

Институт кристаллографии РАН, Москва

E-mail: voloshin@ns.crys.ras.ru

Поступила в редакцию 28.03.2011 г.

Методом функций Римана исследованы закономерности формирования топографического контраста в слабодеформированных непоглощающих кристаллах в геометрии Брэгга при дифракции плоской рентгеновской волны. Показано, что в этом случае экстинкционный контраст носит интерференционный характер, является знакопеременным и пропорционален величине градиента деформации, а не ее квадрату, как это имеет место в случае сильных искажений решетки. Данные анализа сопоставляются с результатами модельного численного эксперимента. Показана возможность реализации рентгеноакустического резонанса в геометрии Брэгга.

ВВЕДЕНИЕ

Как было показано в [1–12], плосковолновые рентгеновские топограммы могут быть использованы для количественного анализа слабых деформаций в кристаллах. В частности, при использовании решения обратной одномерной задачи теории упругости [13–21] возможен анализ вариаций параметра решетки, обусловленных неоднородным распределением примесей в кристалле. Принципиальным обстоятельством при постановке дифракционного эксперимента в этом случае является выбор условий, при которых имеет место существенное преобладание ориентационного контраста над экстинкционным, поскольку во всех процитированных выше работах анализ зависимости рентгеновского топографического контраста от величины эффективной разориентации решетки α_g строится на использовании приближения Бонзе [22], справедливого именно для ориентационного контраста:

$$\Delta I/I = k \alpha_g. \quad (1)$$

Здесь $k = (\Delta I/I)/\Delta\theta$ – коэффициент пропорциональности, определяющий крутизну склона кривой отражения, $\Delta\theta$ – угловое смещение рабочей точки по кривой отражения. Эффективная разориентация решетки α_g может быть записана в

виде свертки компонент $w_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ тензора дис-

торсии \mathbf{W} как

$$\alpha_g = \frac{\lambda}{\sin 2\theta} \frac{\partial(\mathbf{g} \cdot \mathbf{u})}{\partial s_1} = \frac{\lambda}{\sin 2\theta} s_i w_{ij} g_j, \quad (i, j = 1, 2, 3). \quad (2)$$

Здесь \mathbf{g} – вектор дифракции, \mathbf{s}_1 – единичный вектор в направлении падающей волны, s_i и g_j – ком-

поненты векторов \mathbf{s}_1 и \mathbf{g} . Выполнение (1) приводит к соотношению

$$\Delta\theta = \alpha_g. \quad (3)$$

С учетом того факта, что решение обратной задачи дифракции до настоящего времени отсутствует, предлагаемый подход позволяет сравнительно легко и достаточно точно количественно анализировать *слабые* деформации в кристаллах.

Таким образом, для корректности последующих расчетов условия съемки должны обеспечивать преобладание ориентационного контраста над экстинкционным. В [20] был проведен численный модельный эксперимент по обратному восстановлению профиля полосчатого распределения примеси в кристалле Si на основе обработки трех серий топограмм при динамических отклонениях образца от точного брэгговского положения, равных $\eta = +0.8$, $+1.0$ и $+1.1$ (каждая серия была рассчитана для четырех отражений типа {135} в геометрии Брэгга). В результате было показано, что наиболее точное решение получается при $\eta = +1.0$, наихудшее совпадение исходного и рассчитанного профилей имело место при $\eta = +0.8$. Можно предположить, что серьезные (особенно при $\eta = +0.8$) искажения расчетного распределения примеси в сравнении с исходным связаны именно с формированием экстинкционного контраста, не учитываемого в дальнейших расчетах.

Общим условием возникновения экстинкционного контраста является наличие градиента деформации, который очевидным образом имеет место в случае неоднородного распределения примеси. Однако закономерности формирования экстинкционного контраста в геометрии Брэгга

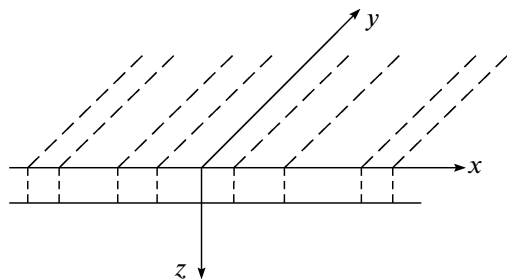


Рис. 1. Система координат в кристаллической пластине с одномерным распределением точечных дефектов вдоль оси x .

недостаточно изучены. В связи с этим не представляется возможным априори указать наилучшие условия съемки для минимизации его влияния на результаты расчета при количественном анализе плосковолновых топограмм, либо наоборот — для его усиления с целью улучшения выявления дефектов.

Целью данного исследования являлся анализ интенсивности дифрагированной плоской волны в геометрии Брэгга в зависимости от величины градиента деформации и положения рабочей точки на кривой дифракционного отражения для случая слабых деформаций.

МОДЕЛЬНЫЙ РАСЧЕТНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

В дополнение к упоминавшимся выше данным [20] был проведен аналогичный расчет на меньшем угле наклона кривой отражения. Условия модельного эксперимента и способ восстановления профиля распределения примеси (вариаций параметра решетки) полностью совпадали с использованными в [20].

А именно: в качестве модельного объекта рассматривалась пластина кремния толщиной 300 мкм с поверхностью, параллельной плоскостям (112). Направление оси y совпадало с направлением внутренней нормали к поверхности, а ось x , перпендикулярная слоям с постоянной концентрацией примеси, совпадала с направлением $[\bar{1}\bar{1}1]$ (рис. 1).

Квазипластическая (или собственная) деформация ε_{xx}^0 , пропорциональная концентрации примеси (или собственных точечных дефектов), задавалась пилообразной функцией распределения с периодом $\lambda_c = 150$ мкм (рис. 2). Компоненты тензора полной дилатации w_{ij}^T в образце вычислялись с использованием передаточных функций H_{ij} , полученных в [15]. Рассчитанное таким образом поле полной дилатации в кристалле использовалось при моделировании рентгеновских топограмм.

Плоскотоволновые рентгенотопографические изображения моделировались путем численного решения уравнений Такаги для кососимметрич-

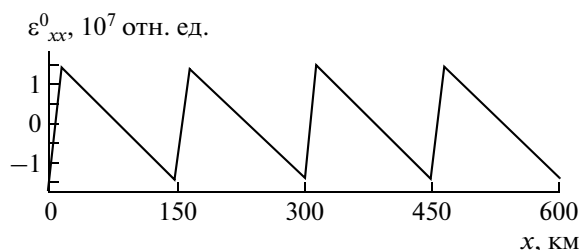


Рис. 2. Задаваемое распределение квазипластической деформации ε_{xx}^0 в пластине Si при $\lambda = 150$ мкм.

ной съемки в геометрии Брэгга в отражениях $(1\bar{3}\bar{5})$, $(\bar{1}5\bar{3})$, $(\bar{3}1\bar{5})$, $(\bar{5}\bar{1}\bar{3})$ с поворотом на угол 15° вокруг вектора дифракции при динамических отклонениях образца от точного брэгговского положения $\eta = -0.8, -1.0$ и -1.1 от точного угла Брэгга. В качестве рабочего было принято характеристическое излучение $\text{CuK}\alpha_1$. При описанных условиях глубина экстинкции составила $\Lambda = 21.1$ мкм. Расчетные изображения топограмм в отражении $(1\bar{3}\bar{5})$ представлены на рис. 3. Расчеты проводились с использованием программы, составленной В.М. Каганером и доработанной автором статьи для моделирования топограмм кристаллов с неоднородным распределением точечных дефектов.

При обратном восстановлении w_{ij}^T профиля ε_{xx}^0 из расчетных топограмм эффективная разориентация α_g определялась с помощью кривой отражения идеального кристалла. Набор из четырех α_g , измеренных при различных векторах дифракции \mathbf{g} , позволяет получить систему четырех линейных уравнений (2) относительно неизвестных с матрицей $\mathbf{D} = (d_{ij}) = s\mathbf{g}_j$. Решение этой системы для каждой точки поверхности кристалла дает распределение искомым четырех компонент дилатации w_{ij}^T , две из которых — w_{11}^T и w_{22}^T — используются для восстановления исходной функции ε_{xx}^0 по формуле

$$\varepsilon_{xx}^0(x) \approx \frac{\nu}{1+\nu} w_{11}^T(x) + \frac{1-\nu}{1+\nu} w_{22}^T(x), \quad (4)$$

где ν — коэффициент Пуассона.

Исходные и восстановленные распределения ε_{xx}^0 представлены на рис. 4а. На рис. 4б представлены полученные ранее в [20] результаты для большего угла наклона кривой отражения. Можно видеть, что в обоих случаях наилучшее совпадение исходного и восстановленного профилей ε_{xx}^0 имеет место при $\eta = \pm 1.0$, а наихудшее — при $\eta = \pm 0.8$.

Как указывалось выше, это может быть связано с различным вкладом экстинкционного контраста в результирующее изображение полос при

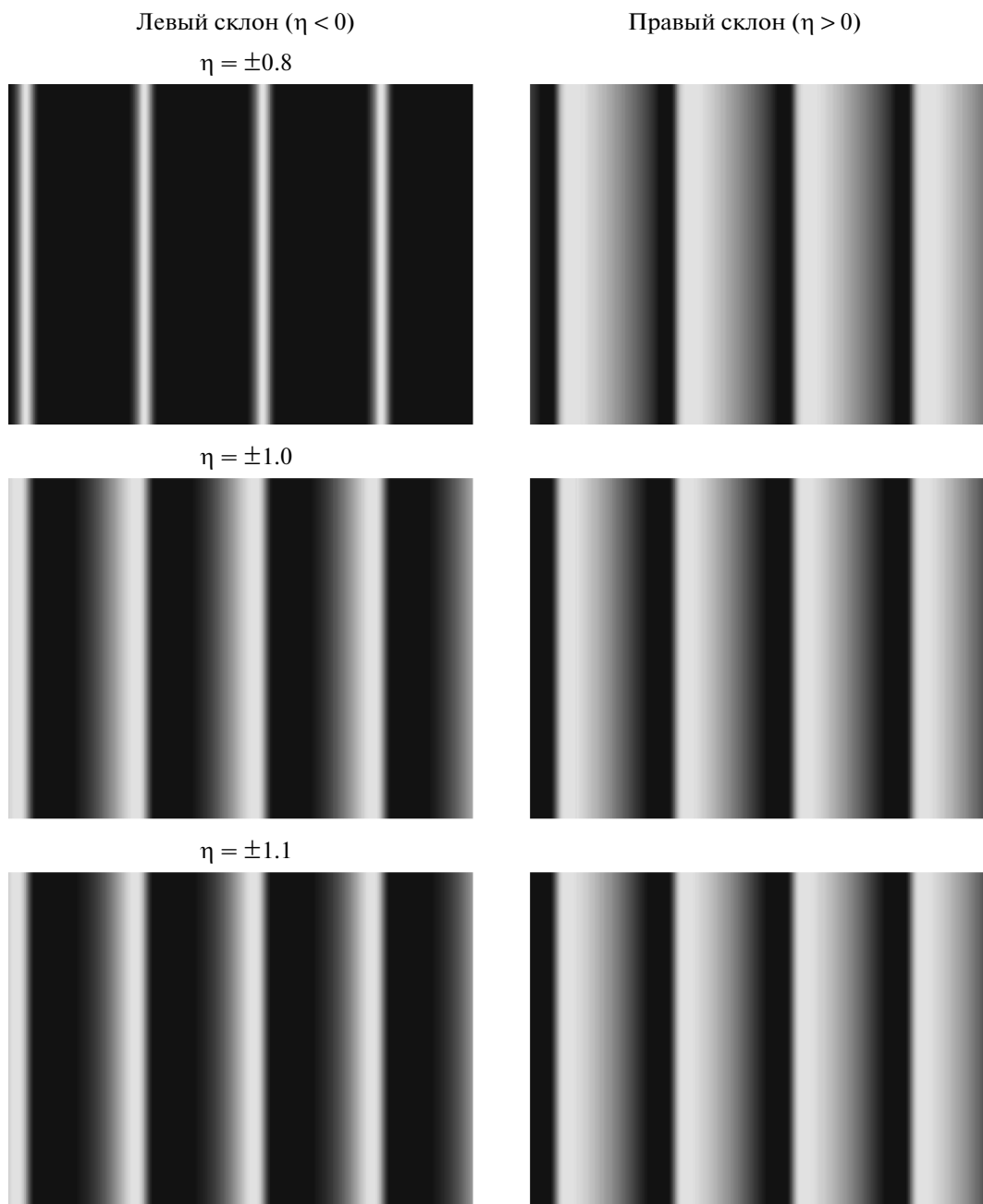


Рис. 3. Расчетные изображения топограмм кристалла Si с периодическим распределением примеси (период распределения $\lambda_c = 150$ мкм, $\text{Cu } K_{\alpha_1}$, отражение $(1\bar{3}\bar{5})$).

различных значениях η . Именно формирование экстинкционного контраста нарушает одно из основных условий использованной методики расчетов – приближения Бонзе (1). Напротив, если соотношение (1) выполняется достаточно точно, то распределение интенсивности на топограмме должно приблизительно соответствовать распределению эффективной разориентации α_g .

На рис. 5 приведены профили интенсивности на топограммах, рассчитанных в интервале $\eta = 0 \dots -1.0$ с шагом $\Delta\eta = 0.1$. Видно, что только при $\eta = -1.0$ профиль интенсивности хорошо со-

ответствует исходной пилообразной форме ε_{xx}^0 . При $0 \geq \eta \geq -0.8$ обращает на себя внимание дополнительный максимум “a”, который отчетливо проявляется вблизи области образца с максимальным градиентом деформации. Таким образом, можно полагать, что действительно в интервале $\eta = 0 \dots -1.0$ формируется достаточно интенсивное экстинкционное изображение полос неоднородности, причем его интенсивность зависит от η и это является причиной погрешности при восстановлении функции $s(x)$. Для оценки этого влияния рассмотрим особенности фор-

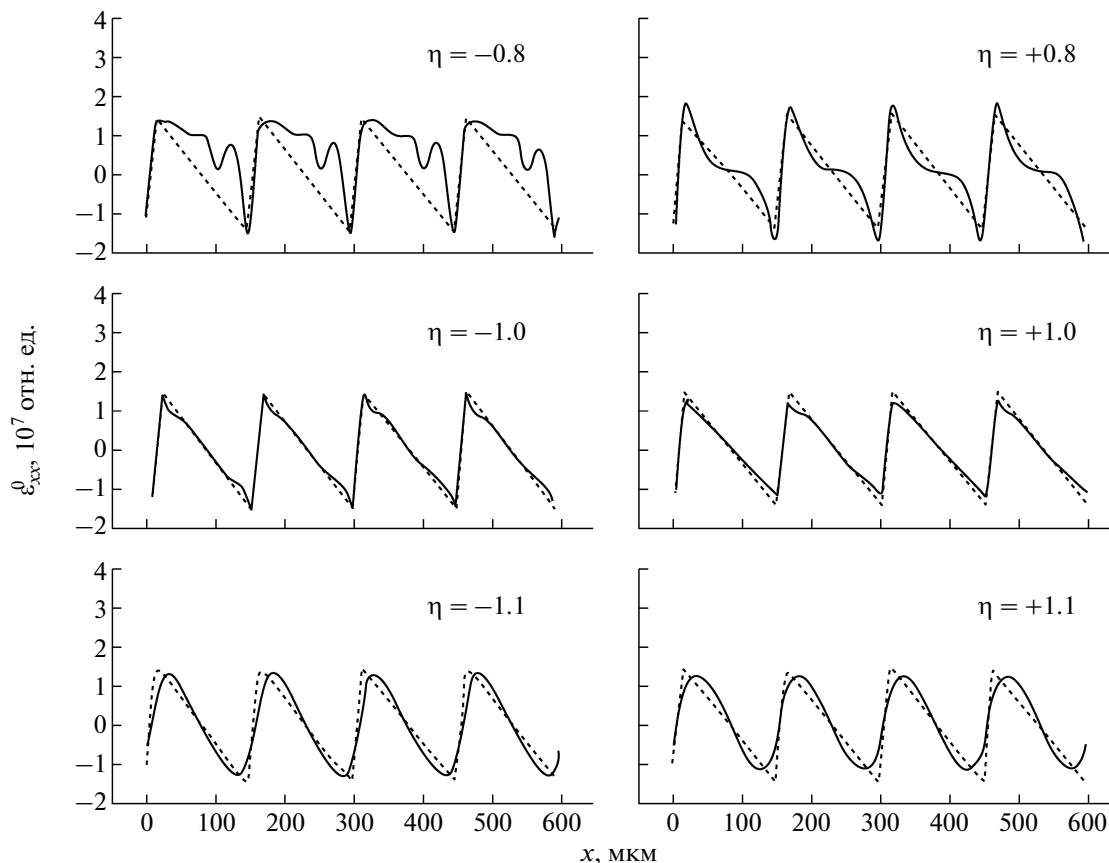


Рис. 4. Исходное и восстановленные (по модельным рентгенотопографическим изображениям) распределения ϵ_{xx}^0 при различных значениях параметра η — исходное распределение; — — восстановленное распределение.

мирования экстинкционного контраста при дифракции в геометрии Брэгга.

АНАЛИЗ УСЛОВИЙ ФОРМИРОВАНИЯ ЭКСТИНКЦИОННОГО КОНТРАСТА В ГЕОМЕТРИИ БРЭГГА

Условием формирования экстинкционного контраста является наличие градиента деформации в кристалле. В общем случае анализ сложен и возможен лишь на основе численного решения уравнений Такаги. Однако для качественного понимания ситуации можно воспользоваться аналитическим решением задачи для случая постоянного градиента деформации, полученным в [23]. Также для постоянного градиента деформации в случае слабых деформаций в [24] было получено решение на основе теории эйконала.

Аналитическое решение уравнений Такаги для случая постоянного градиента деформации получено в [23] на основе функций Вебера. Из-за малой изученности данного класса функций решение [23] очень сложно для применений, в том числе для качественного анализа. Однако для

случая $\beta_{zz} = \frac{\Lambda}{\cos^2 \theta} \frac{\partial^2 \mathbf{gu}}{\partial z^2} = \text{const} \ll \frac{1}{\Lambda}$ (здесь β_{zz} — эффективный градиент деформации, Λ — экстинкционная длина) на основе асимптотики

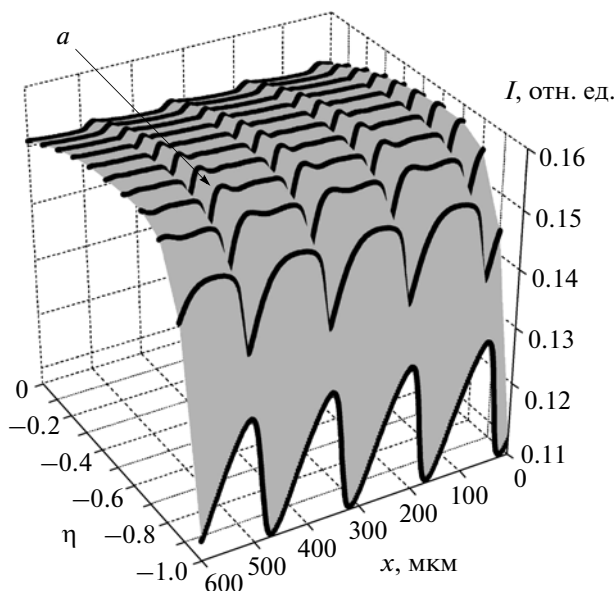


Рис. 5. Распределение интенсивности на расчетных топограммах для неоднородности с периодом 150 мкм при $\eta = 0 \dots -1.0$.

функций Вебера при $|\eta| \geq 1$ в [23] получено выражение, которое в принятых нами обозначениях может быть записано в виде:

$$I_1 = \left| -\frac{1}{\eta \mp \sqrt{\eta^2 - 1}} \times \left[1 - 2i\sqrt{\eta^2 - 1} \times \exp\left(-i\frac{\pi^2}{\Lambda \cos^2 \theta \beta_{zz}} \frac{1}{\eta \sqrt{\eta^2 - 1}}\right) \right] \right|^2 \quad (5)$$

Для непоглощающего полубесконечного кристалла выражение (5) приобретает вид

$$I_1 = (\eta \pm \sqrt{\eta^2 - 1})^2 \times \left[4\eta^2 - 3 - 4\sqrt{\eta^2 - 1} \times \sin\left(\frac{\pi^2}{\Lambda \cos^2 \theta \beta_{zz}} \frac{1}{\eta \sqrt{\eta^2 - 1}}\right) \right] \quad (6)$$

Выражения (5), (6) справедливы при $\eta\beta_{zz} < 0$ – в противном случае, как известно, вектор Пойнтинга всегда направлен в глубь кристалла и профиль кривой дифракционного отражения (КДО) описывается выражением для идеального кристалла [25]. В случае $\eta\beta_{zz} < 0$ при $|\eta| \geq 1$ имеет место рост интенсивности на одном из склонов КДО так, что $I_g \rightarrow 1$ при $|\eta| \rightarrow \infty$. Таким образом, КДО приобретает резко асимметричный вид за пределами области полного отражения (рис. 6). При этом выражения (5), (6) предсказывают возникновение осцилляций (экспоненциальный член в скобках), период которых сильно зависит от величины β_{yy} – чем меньше β_{yy} , тем меньше период. Заметим, что при усреднении осцилляций выражение (6) оказывается полностью эквивалентным решению [24], полученному на основе теории эйконала (рис. 6) несмотря на то, что в [24] рассматривалась другая компонента градиента деформации, отличная от β_{yy} , а именно: $\beta_{01} =$

$= \frac{\Lambda}{\cos^2 \theta} \frac{\partial^2 \mathbf{gu}}{\partial s_0 \partial s_1} = \text{const}$ ($\mathbf{s}_0, \mathbf{s}_1$ – единичные векторы в направлениях падающей и отраженной волн соответственно). Как и в рассмотренном выше случае, решение [24] справедливо лишь за пределами области полного отражения, поскольку теория эйконала неприменима к волновым полям, амплитуда которых имеет мнимую часть.

Таким образом, за рамками выполненных ранее исследований осталась область углов при $|\eta| \leq 1$. Анализ ситуации для этого случая возможен с использованием функций Римана. Такой подход впервые был развит Афанасьевым и Коном в [26] и впоследствии использован Каганером и Инденбомом при исследовании контраста микродефектов в серии работ [27–31].

Для слабых деформаций в первом порядке теории возмущений можно использовать функцию Римана идеального кристалла, тогда, согласно [28, 30], амплитуда в точке наблюдения D с ко-

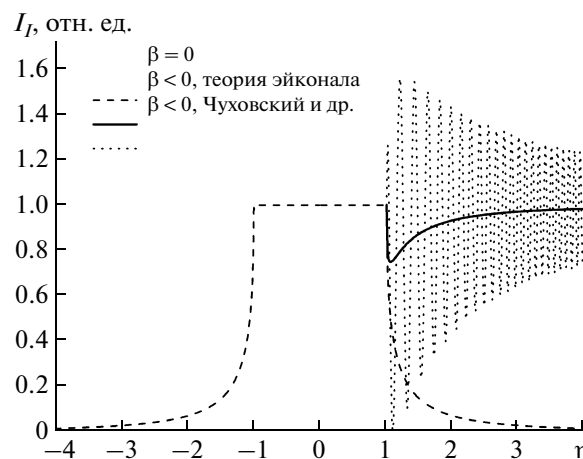


Рис. 6. Кривые дифракционного отражения идеального непоглощающего кристалла и кристалла с малым градиентом деформации.

ординатами (s_{0D}, s_{1D}) может быть описана интегральным выражением

$$E_1(D) = i \frac{2\pi \cos \theta}{\Lambda} \times \left[-\frac{1}{2} \int_{AD} RE_0^{in} ds_1 + \int_{BD} \alpha_g^* E_1 ds_1 - \iint_{ABD} \alpha_g^* E_1 \frac{\partial R}{\partial s_0} ds_0 ds_1 \right] \quad (7)$$

Здесь $R = R(s_{0D} - s_0, s_{1D} - s_1)$ – функция Римана идеального кристалла, которая для симметричного случая Брэгга имеет вид

$$R(s_0, s_1) = J_0\left(\frac{2\pi \cos \theta}{\Lambda} \sqrt{s_0 s_1}\right) + \frac{s_0}{s_1} J_2\left(\frac{2\pi \cos \theta}{\Lambda} \sqrt{s_0 s_1}\right), \quad (8a)$$

$$\text{а также } \frac{\partial R(s_0, s_1)}{\partial s_0} = \frac{\pi \cos \theta}{\Lambda} \frac{J_1\left(\frac{2\pi \cos \theta}{\Lambda} \sqrt{s_0 s_1}\right)}{\sqrt{s_0 s_1}}, \quad (8б)$$

где J_0, J_1, J_2 – функции Бесселя, E_0^{in} – амплитуда падающей волны, $\alpha_g^* = \frac{\Lambda}{\cos \theta} \frac{\partial \mathbf{gu}}{\partial s_1}$. Интегрирование проводится по треугольнику ABD (рис. 7).

В выражении (7) первый член в скобках описывает волновое поле идеального кристалла, которое для случая $|\eta| \leq 1$ имеет вид

$$E_0^{id} = \exp\left(-i\frac{\pi \cos \theta}{\Lambda} \left[(\eta - i\sqrt{1 - \eta^2})s_0 + (\eta + i\sqrt{1 - \eta^2})s_1 \right]\right), \quad (9)$$

$$E_1^{id} = -(\eta - i\sqrt{1 - \eta^2}) E_0^{id}.$$

Второе слагаемое в (7) было названо в [28] “кинематическим” – оно описывает волну, родившуюся в деформированной области и распространяющуюся в направлении дифрагированного луча без

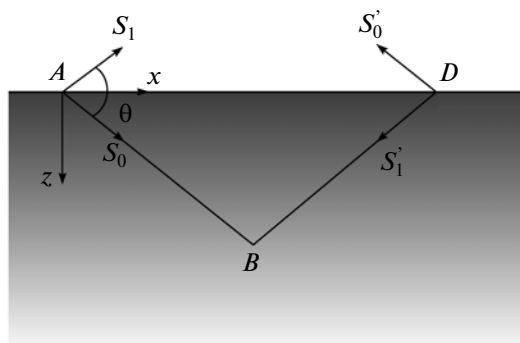


Рис. 7. Схема, поясняющая расположение координатных осей и область интегрирования.

дифракционного размытия. Прямое изображение дефекта (деформированной области) формируется в результате интерференции волн, описываемых этими двумя членами.

Третье слагаемое описывает волну, заполняющую весь треугольник ABD — такая волна названа в [28] “динамической”.

Введем ортогональную систему координат $x = (s_0 + s_1) \cos \theta$, $z = (s_0 - s_1) \sin \theta$. Рассмотрим кристалл с постоянным градиентом деформации таким, что $\mathbf{gu} = \beta_z z^2$, полагая при этом $\beta_z \ll \frac{1}{\Lambda^2}$. Принимая на поверхности кристалла $\alpha_g^*(x, 0) = 0$, имеем

$$\alpha_g^*(x, z) = -2\Lambda\beta_z z \operatorname{tg} \theta. \quad (10)$$

В первом порядке теории возмущений в подинтегральных выражениях (7) вместо E_1 будем использовать волновое поле идеального кристалла E_1^{id} . Также для удобства введем систему координат $s'_0 = s_{0D} - s_0$, $s'_1 = s_{1D} - s_1$. Положим расстояние BD достаточно большим ($|BD| \gg \Lambda$, так что $E_1(B) \approx 0$) — это позволит перейти к бесконечным пределам интегрирования в (7).

Тогда кинематический интеграл (с учетом (9), (10)) равен

$$\begin{aligned} E_{kin} &= i \frac{2\pi \cos \theta}{\Lambda} \int_0^\infty \alpha_g^* E_1^{id} ds'_1 = \\ &= -i\beta_z \frac{4\Lambda^2}{\pi} \operatorname{tg}(\theta) (\eta - i\sqrt{1-\eta^2})^3. \end{aligned} \quad (11)$$

Для динамического интеграла, проводя интегрирование с учетом (8)–(10), получаем

$$\begin{aligned} E_{dyn} &= -i \frac{2\pi \cos \theta}{\Lambda} \int_0^\infty \int_{s'_0}^\infty \alpha_g^* E_1^{id} \frac{\partial R}{\partial s'_0} ds'_1 ds'_0 = \\ &= i\beta_z \frac{4\Lambda^2}{\pi} \operatorname{tg}(\theta) (\eta - i\sqrt{1-\eta^2}) \times \\ &\times \left[(\eta - i\sqrt{1-\eta^2})^2 + \frac{1}{4(1-\eta^2)} \right]. \end{aligned} \quad (12)$$

Поскольку на поверхности кристалла $E_1^{id} = -(\eta - i\sqrt{1-\eta^2})$, то интегралы (11) и (12) можно представить в виде:

$$\begin{aligned} E_{kin} &= E_1^{id} q_{kin} B, \\ q_{kin} &= i (\eta - i\sqrt{1-\eta^2})^2 = 2\eta\sqrt{1-\eta^2} + i(2\eta^2 - 1) \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} E_{dyn} &= E_1^{id} q_{dyn} B, \\ q_{dyn} &= -i \left[(\eta - i\sqrt{1-\eta^2})^2 + \frac{1}{4(1-\eta^2)} \right] = \\ &= -2\eta\sqrt{1-\eta^2} - i \left(2\eta^2 - 1 + \frac{1}{4(1-\eta^2)} \right), \end{aligned} \quad (14)$$

$$B = \frac{4\Lambda^2}{\pi} \operatorname{tg}(\theta) \beta_z.$$

Оба интеграла (11) и (12) расходятся при $\eta = \pm 1$, однако при этом $E_{kin} \rightarrow \pm i$, а $E_{dyn} \rightarrow -i\infty$. Такое поведение E_{dyn} является следствием использованных приближений. Из-за зависимости α_g^* от z динамическое отклонение также меняется по глубине кристалла: $\eta(z) = \eta_0 + \alpha_g^*(z)$ (η_0 — динамическое отклонение на поверхности кристалла). Поскольку при определенном z значение $|\eta(z)|$ достигает единицы, а с приближением к краям области полного отражения глубина проникновения лучей в кристалл растет, как $\sim \frac{\Lambda}{\sqrt{1-\eta_0^2}}$, то бли-

зи $|\eta_0| = 1$ в значение E_{dyn} существенный вклад вносят более глубокие области кристалла, где уже $|\eta| > 1$, что в рамках рассматриваемой модели некорректно. Поэтому следует ограничить рассмотрение некоторым интервалом η_0 таким, что $z_1 \gg \frac{\Lambda}{\sqrt{1-\eta_0^2}}$, где z_1 находится из условия $1 = \eta(z_1) = |\eta_0| + |\alpha_g^*(z_1)| = |\eta_0| + 2\Lambda|\beta_z|z_1 \operatorname{tg} \theta$. Отсюда можно получить: $|\eta_0| \ll 1 - \sqrt[3]{2\Lambda^4 \beta_z^2 \operatorname{tg}^2 \theta}$. Данное соотношение также накладывает ограничения и на β : например, чтобы в рамках используемого приближения работать внутри интервала $|\eta_0| < 0.9$, $|\beta|$ не должно превышать $\frac{0.022}{\Lambda^2 \operatorname{tg} \theta}$.

Окончательно с учетом (13), (14) и в виду малости B интенсивность в точке D может быть выражена следующим образом:

$$\begin{aligned} I_1(D) &= |E_1(D)|^2 = |E_1^{id}|^2 |1 + (q_{kin} + q_{dyn})B|^2 = \\ &= 1 + 2[\operatorname{Re}(q_{kin} + q_{dyn})]B + \\ &+ [(\operatorname{Re}(q_{kin} + q_{dyn}))^2 + (\operatorname{Im}(q_{kin} + q_{dyn}))^2]B^2 \approx \\ &\approx 1 + 2[\operatorname{Re}(q_{kin} + q_{dyn})]B. \end{aligned} \quad (15)$$

В случае постоянного градиента деформации, как можно видеть из (13), (14), $\text{Re}(q_{kin}) = -\text{Re}(q_{dyn})$ и суммарная интенсивность равна интенсивности идеального кристалла. Однако при других условиях это равенство может нарушаться. Действительно, положим

$$\alpha_g^*(x, z) = -2\Lambda \text{tg} \theta \omega z \cos(\omega x) e^{-\omega z}, \quad \omega = \frac{2\pi}{\lambda_c}. \quad (16)$$

Такое поле деформаций характерно для кристалла с неоднородным распределением точечных дефектов с периодом λ_c [13]. Тогда, как показывает расчет (численное интегрирование выражений (11), (12) с полем деформаций (16)), наблюдается сильное изменение соотношения между $\text{Re}(q_{kin})$ и $\text{Re}(q_{dyn})$ (рис. 8).

Можно видеть, что $k > 0$ практически на всем интервале, за исключением узкой области вблизи $\lambda_c = 2\Lambda$; при этом $\text{Re}(q_{kin}) + \text{Re}(q_{dyn}) = k \text{Re}(q_{kin})$. Учитывая, что общий характер найденных зависимостей $\text{Re}(q_{kin})$ и $\text{Re}(q_{dyn})$ от η должен сохраняться при $\lambda_c \gg \Lambda$, (15) принимает вид

$$I_1(D) \approx 1 + 2k [\text{Re}(q_{kin})] B = 1 - 4k B \eta \sqrt{1 - \eta^2}. \quad (17)$$

В этом случае контраст изображения (т.е. превышение интенсивности изображения деформированной области над интенсивностью изображения идеального кристалла) будет равен

$$T_1(D) \approx -16k \beta_z \frac{\Lambda^2}{\pi} \text{tg}^2 \theta \eta \sqrt{1 - \eta^2}. \quad (18)$$

Отсюда видно, что при $|\eta| < 1$ экстинкционный контраст $T_1(D)$ имеет точки экстремума вблизи краев области полного отражения (при $\eta = \pm \sqrt{\frac{1}{2}} \approx \pm 0.7$) и носит знакопеременный характер, который определяется знаками k, β_z, η . Также из (18) (и (6)) следует, что при $|\eta| \rightarrow 1$ экстинкционный контраст $T_1(D) \rightarrow 0$, что и объясняет наилучшие результаты при восстановлении профиля распределения примеси по набору рентгеновских топограмм при $|\eta| = 1$.

Следует отметить, что в случае слабых деформаций вообще экстинкционный контраст носит интерференционный характер, т.е. определяется амплитудами прямой и динамической волн, а не их интенсивностями. Действительно, в общем случае контраст изображения в точке D можно записать как

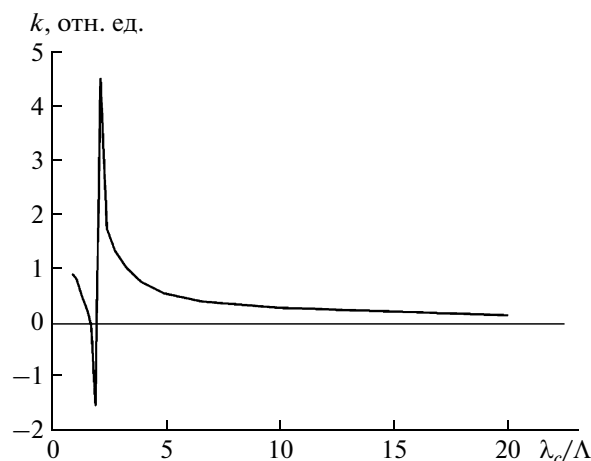


Рис. 8. Зависимость отношения $k = \frac{\text{Re}(q_{kin} + q_{dyn})}{\text{Re}(q_{kin})}$ от периода неоднородности по результатам численного интегрирования (11), (12) с полем деформаций (16) при $\eta = -0.5$.

$$\begin{aligned} T_1(D) &= I_1(D) - |E_1^{id}|^2 = |E_1^{id} + E_{kin} + E_{dyn}|^2 - \\ &- |E_1^{id}|^2 = |E_1^{id}|^2 |1 + Q_{kin} + Q_{dyn}|^2 - |E_1^{id}|^2 = \\ &= |E_1^{id}|^2 \{2[\text{Re}(Q_{kin} + Q_{dyn})] + |Q_{kin}|^2 + |Q_{dyn}|^2 + \\ &+ 2[\text{Re}(Q_{kin}) \text{Re}(Q_{dyn}) + \text{Im}(Q_{kin}) \text{Im}(Q_{dyn})]\}, \end{aligned} \quad (19)$$

$$Q_{kin} = \frac{E_{kin}}{E_1^{id}}, \quad Q_{dyn} = \frac{E_{dyn}}{E_1^{id}}. \quad (20)$$

В случае сильных деформаций, когда $|\text{Re}(Q_{kin})| \gg 1$, контраст прямого изображения определяется величиной $|E_1^{id}|^2 |Q_{kin}|^2 \gg |\text{Re}(Q_{kin})|$, т.е. будет всегда положительным независимо от знаков градиента деформации и η_0 . При этом динамическое изображение всегда будет ослаблено по отношению к изображению идеального кристалла. Также значительной величины, сравнимой с интенсивностями динамического изображения и изображения идеального кристалла, будет достигать член, стоящий во вторых квадратных скобках выражения (19). Это слагаемое описывает интерференцию прямого и динамического изображений, т.е. интенсивность промежуточного изображения.

Напротив, в случае слабых деформаций, когда $|\text{Re}(Q_{kin})| \ll 1$ и $|\text{Re}(Q_{dyn})| \ll 1$, все квадратичные члены становятся пренебрежимо малыми, и имеем

$$T_1(D) \approx 2|E_1^{id}|^2 \text{Re}(Q_{kin}) + 2|E_1^{id}|^2 \text{Re}(Q_{dyn}). \quad (21)$$

В этом случае дифракционный контраст является результатом интерференции прямой и динамической волн с волновым полем идеального кристалла. Важно отметить, что в данном случае и прямое, и динамическое изображения могут иметь

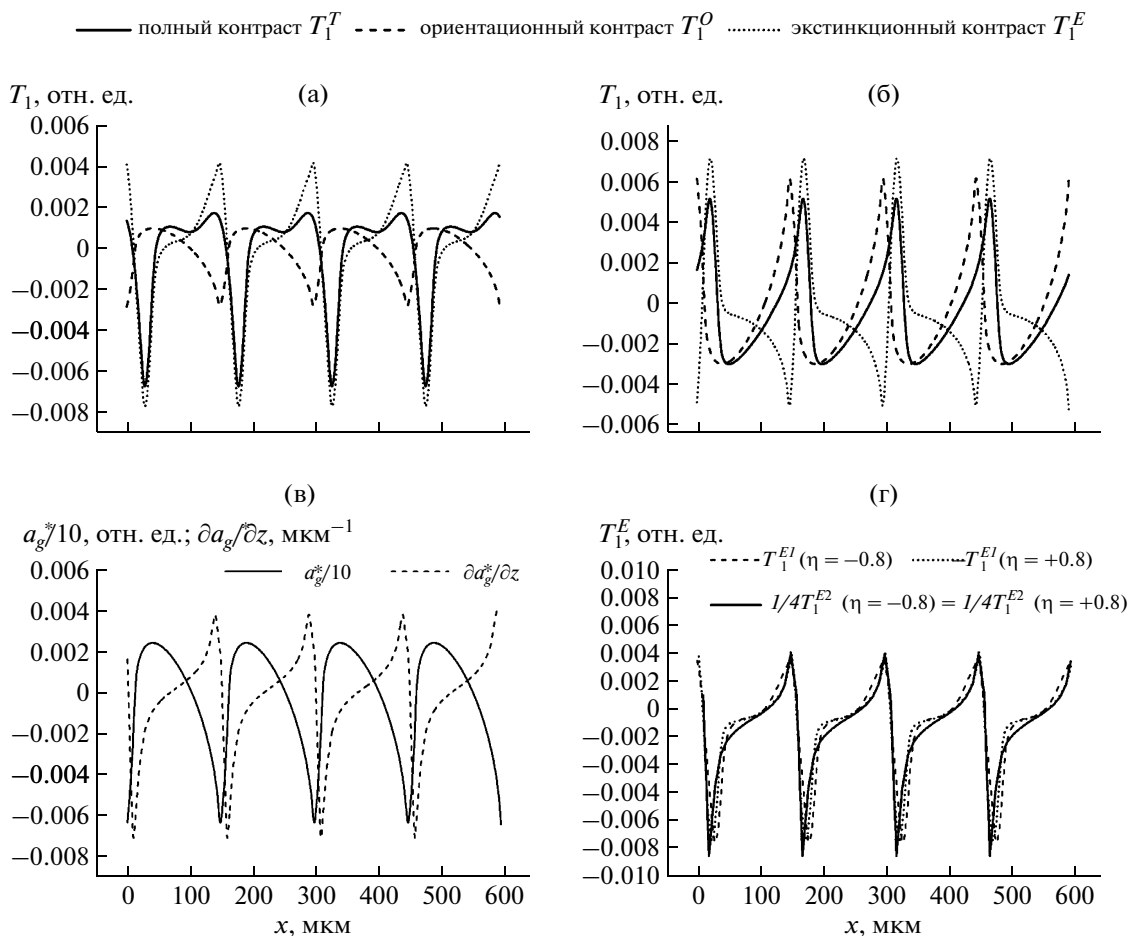


Рис. 9. Соотношение полного, ориентационного и экстинкционного контраста для кристалла Si с пилообразным распределением примеси (рис. 2) в отражении $(1\bar{3}\bar{5})$: а – при $\eta_0 = -0.8$; б – при $\eta_0 = +0.8$; в – эффективная разориентация и градиент деформации; г – экстинкционный контраст, найденный из расчетных топограмм (T_1^{E1}) и по формуле (18) (T_1^{E2}).

контраст обоих знаков, что определяется знаками $\text{Re}(Q_{kin})$ и $\text{Re}(Q_{dyn})$ соответственно.

Для локализованных дефектов, размер которых много меньше Λ , динамическое изображение сильно ослаблено (как было показано в [30]), и знак контраста определяется знаком $\text{Re}(Q_{kin})$. Для протяженных дефектов, размер которых много больше Λ , как было показано выше, будет также иметь значение и соотношение между величинами $\text{Re}(Q_{kin})$ и $\text{Re}(Q_{dyn})$. При этом, поскольку априори это соотношение, как правило, неизвестно, нельзя заранее предсказать и знак наблюдаемого контраста, т.е. качественный анализ типа деформации по характеру наблюдаемого контраста в области полного отражения невозможен. В этом состоит главное отличие области полного отражения от области $|\eta| > 1$, где, как было показано выше, всегда $T_1 \geq 0$.

На рис. 9а, 9б представлены результаты анализа контраста топограмм, рассчитанных в модельном эксперименте в отражении $(1\bar{3}\bar{5})$ при $\eta_0 =$

± 0.8 . Ориентационный контраст T_1^O рассчитывался по формуле:

$$T_1^O = \alpha_g^* \frac{dI_1}{d\eta}(\eta_0), \quad (22)$$

где α_g^* – эффективная разориентация бралась на поверхности кристалла, а производная $\frac{dI_1}{d\eta}$ в точке η_0 рассчитывалась по кривой отражения, идеального кристалла [20]. Экстинкционный контраст T_1^{E1} определялся как разность полного контраста T_1^T , полученного непосредственно в результате расчета топограмм, и ориентационного контраста T_1^O . Можно видеть, что как полный контраст, так и его составляющие меняют знак при переходе на противоположный склон кривой отражения.

На рис. 9 в представлены эффективная разориентация и градиент деформации по нормали к поверхности кристалла, вычисленные для поля упругих дисторсий, использованного при моделировании топограмм. Далее по формуле (18)

рассчитывался экстинкционный контраст T_1^{E2} . Из рис. 9г можно видеть, что результаты всех расчетов хорошо согласуются между собой: совпадают и знаки, и характер всех кривых. При этом T_1^{E2} примерно в 4 раза больше T_1^{E1} , однако это связано с частичной компенсацией прямого изображения динамическим, а также с учетом поглощения при выводе формул (11), (12), (18).

Также данное сравнение подтверждает, что в рассмотренном случае экстинкционный контраст является знакопеременным и пропорционален величине β_z , а не ее квадрату, т.е. действительно является интерференционным.

В заключение отметим, что кривая на рис. 8 имеет ярко выраженный резонансный характер. Это указывает на возможность реализации ренгеноакустического резонанса в геометрии Брэгга. Ранее ренгеноакустический резонанс наблюдался в условиях эффекта Бормана [32, 33]. Несмотря на определенное различие в полях деформаций, создаваемых в кристалле синусоидальным распределением примеси и акустической волной, данное обстоятельство представляет интерес для дальнейших исследований.

ВЫВОДЫ

Теоретически исследованы закономерности формирования дифракционного контраста в пределах области полного отражения в геометрии Брэгга для случая слабых деформаций в непоглощающем кристалле. Показано, что в этом случае экстинкционный контраст имеет интерференционный характер, его интенсивность пропорциональна величине градиента деформации, а знак определяется знаками динамического отклонения от угла Брэгга и соотношением амплитуд прямой (рожденной на дефекте) и динамической волн. Максимальной величины экстинкционный контраст достигает при $\eta = \pm \sqrt{\frac{1}{2}} \approx \pm 0.7$ и стремится к нулю при $|\eta| \rightarrow 1$. Таким образом, рабочие точки $\eta \approx \pm 0.7$ предпочтительнее использовать для выявления слабых дефектов (микродефектов, слабых неоднородностей), а точки $\eta = \pm 1.0$ — для количественного анализа деформаций на основе ориентационного контраста.

Полученная зависимость интенсивности дифрагированной волны от периода синусоидально-неоднородного распределения примеси в кристалле указывает на возможность реализации ренгеноакустического резонанса в геометрии Брэгга.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kikuta S., Kohra K., Sugita Y. // Jpn. J. Appl. Phys. 1966. V. 5. № 11. P. 1047.
2. Ishida H., Ninomia N., Kohra K. // J. Appl. Cryst. 1976. V. 9. № 3. P. 240.
3. Nittono O., Shimizu S. // J. Cryst. Growth. 1978. V. 45. P. 476.
4. Imai M., Noda H., Shibata M., Yatsurugi Y. // Appl. Phys. Lett. 1978. V. 50. № 7. P. 395.
5. Buschert R.C., Pace S., Inzaghi D., Merlini A.E. // J. Appl. Cryst. 1979. V. 12. № 1. P. 207.
6. Kawado S., Kojima S., Maekawa I., Ishikawa T. // Solid State Phenomena. 1991. V. 19-20. P. 429.
7. Wierzchowski W., Moore M., Makepeace A.P.W., Yacoot A. // J. Cryst. Growth. 1991. V. 114. № 1-2. P. 209.
8. Kubena J., Holy V. // Czech. J. Phys. B. 1983. V. 33. № 12. P. 1315.
9. Kubena J., Holy V. // Czech. J. Phys. B. 1984. V. 34. № 9. P. 950.
10. Alter U., Hartwig J., Kubena J. // Czech. J. Phys. B. 1985. V. 35. № 2. P. 158.
11. Jenichen B., Kohler R. // Phys. Status. Solidi. A. 1981. V. 65. № 2. P. 245.
12. Jenichen B., Kohler R. // Phys. Status. Solidi. A. 1981. V. 65. № 3. P. 535.
13. Indenbom V.L., Kroupa F. // Czech. J. Phys. B. 1979. V. 29. № 4. P. 338.
14. Волошин А.Э., Смольский И.Л. // Кристаллография. 1993. Т. 38. № 4. С. 12.
15. Hartwig J. // Cryst. Res. Tech. 1981. V. 16. № 12. P. 1297.
16. Hartwig J., Lerche V. // Phys. Status. Solidi. A. 1988. V. 109. № 1. P. 79.
17. Lerche V., Dornfelder P., Hartwig J. // Phys. Status. Solidi. A. 1991. V. 128. № 2. P. 269.
18. Bernhardt H., Hartwig J., Lerche V. // Progress in Crystal Growth and Characterization. 1992. V. 24. № 1. P. 1.
19. Волошин А.Э., Смольский И.Л. // Кристаллография. 1994. Т. 39. № 5. С. 781.
20. Voloshin A.E., Smolsky I.L. // Phys. Status. Solidi. B. 1996. V. 192. № 2. P. 320.
21. Волошин А.Э., Смольский И.Л. // Структурные исследования кристаллов. Сб. статей. М.: Наука. Физматлит, 1996. С. 184.
22. Bonse U. // Direct Observation of Imperfections in Crystals. New York: Wiley, 1962. P. 431.
23. Chukhovskii F.N., Gabrielyan K.T., Petrashen P.V. // Acta Cryst. A. 1978. V. 34. № 4. P. 610.
24. Gronkowski J., Malgrange C. // Acta. Cryst. A. 1984. V. 40. № 3. P. 507.
25. Penning P., Polder D. // Phillips Res. Repts. 1961. V. 16. P. 419.
26. Afanas'ev A.M., Kohn V.G. // Acta Cryst. A. 1971. V. 27. № 3. P. 421.
27. Indenbom V.L., Kaganer V.M. // Phys. Status. Solidi. A. 1985. V. 87. № 2. P. 253.
28. Инденбом В.Л., Каганер В.М. // Докл. АН СССР. 1985. Т. 282. № 3. С. 608.
29. Каганер В.М., Инденбом В.Л. // Кристаллография. 1986. Т. 31. № 1. С. 29.
30. Каганер В.М., Инденбом В.Л. // Кристаллография. 1987. Т. 32. № 2. С. 297.
31. Каганер В.М., Крылова Н.Ю., Инденбом В.Л., Шульпина И.Л. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 8. С. 2343.
32. Энтин И.Р. // Письма в ЖЭТФ. 1977. Т. 26. № 5. С. 392.
33. Энтин И.Р., Суворов Э.В., Кобелев Н.П., Сойфер Я.М. // ФТТ. 1978. Т. 20. № 5. С. 1311.