

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Дифракционное изображение дефектов в рентгеновской топографии (рентгеновской микроскопии)

Э.В. Суворов, И.А. Смирнова

Рассмотрены вопросы образования и структуры рентгеновского дифракционного изображения дефектов кристаллической решётки в методах рентгеновской топографии. Проанализированы подходы описания (лучевая и волновая оптика) и области применения геометрической и дифракционной оптики реального кристалла. На примерах конкретных экспериментальных изображений дислокаций и других дефектов продемонстрирована роль различных дифракционных эффектов (отражение волн от искажений кристаллической решётки, дифракционная фокусировка, каналирование), влияющих на характер формируемого изображения. Обсуждаются возможности получения количественной информации о параметрах дефектов.

Ключевые слова: дефекты кристаллической структуры, физика дифракции рентгеновских лучей, рентгеновская топография, рентгеновская оптика, дифракционный контраст дефектов, дифракционное изображение, секционные топограммы, блоховские волны, траектории лучей, упругое поле дислокаций, уравнения Такаги – Топена, численное моделирование дифракционного изображения

PACS numbers: 61.05.C-, 61.72.Dd, 61.72.Ff

DOI: 10.3367/UFNr.0185.201509a.0897

Содержание

1. Введение (897).
 2. Основные понятия рентгеновской геометрической оптики кристаллов с дефектами (899).
 3. Волновое поле в идеальном кристалле. Секционные топограммы (901).
 4. Некоторые аспекты численного моделирования дифракционного изображения (902).
 5. Формирование рентгеновского дифракционного изображения дефектов в кристаллах (904).
 - 5.1. Линия дислокации, перпендикулярная плоскости рассеяния.
 - 5.2. Линия дислокации, расположенная в плоскости рассеяния параллельно вектору отражения.
 - 5.3. Линия дислокации, расположенная в плоскости рассеяния перпендикулярно вектору отражения.
 6. Заключение (913).
- Список литературы (914).

1. Введение

Современное физическое материаловедение неразрывно связано со структурными исследованиями материалов (кристаллов, твёрдых растворов — сплавов, аморфных систем, наноструктур и пр.), так как именно их структур-

ное состояние, часто на атомном уровне, определяет практически все важнейшие физические и эксплуатационные свойства. Пластичность и твёрдость, прочность, тепловые, электрические и магнитные параметры, оптические характеристики и пр., как правило, связаны с дефектами структуры кристаллов. Поэтому проблема создания материалов с наперёд заданными свойствами теснейшим образом связана с совершенствованием уже известных и созданием новых современных методов исследования реальной структуры материалов. Особое место среди широкого спектра современных методов исследования реальной структуры кристаллов занимают рентгеноструктурные методы, так как, во-первых, они позволяют увидеть внутреннее строение вещества без его разрушения и, во-вторых, являясь, как правило, количественными методами, дают возможность получать численные значения параметров структуры вещества. Ниже мы остановимся на методах рентгеновской дифракционной микроскопии (рентгеновской топографии).

Впервые идея получения микрорентгенограмм (топограмм) была высказана В. Бергом [1] в 1931 г. Эта идея получила развитие в многочисленных последующих работах В. Берга, С. Барретта, Т. Фудзивары, Дж. Ньюкирка, Л. Шульца, К. Кора, У. Бонзе, Дж. Бормана, А. Ланга и многих других [2–10]. Долгое время главной проблемой рентгеновской топографии был её качественный, описательный характер — получаемые изображения дефектов кристаллической структуры не позволяли восстанавливать какие-либо количественные характеристики дефектов. Отсутствовали количественные методы анализа дифракционного изображения.

Э.В. Суворов, И.А. Смирнова. Институт физики твёрдого тела РАН, ул. Академика Осипяна 2, 142432 Черноголовка, Московская обл., Российская Федерация
E-mail: suvorov@issp.ac.ru, irina@issp.ac.ru

Статья поступила 5 мая 2015 г.

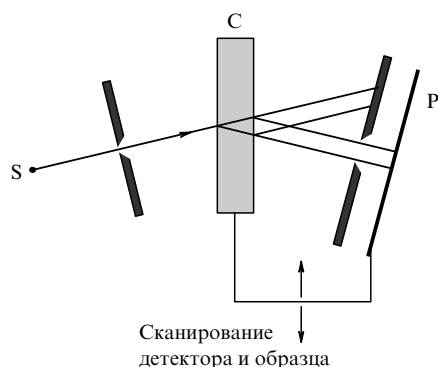


Рис. 1. Рентгеновская схема метода Ланга. S — точечный источник рентгеновского излучения, C — исследуемый монокристаллический образец, P — детектор (фотопластинка), регистрирующий топограмму. Одновременное перемещение (сканирование) образца и детектора позволяет регистрировать большие площади исследуемого кристалла.

В 1959 г. А. Ланг предложил [11] принципиально новую схему получения рентгеновских топограмм (топограммы со сканированием, ограниченные и секционные топограммы). Именно эти схемы положили начало исследованиям механизмов образования дифракционного изображения дефектов кристаллической решётки. Схема получения топограмм, предложенная Лангом, приведена на рис. 1.

Проблема образования изображения дефектов впервые была обозначена А. Отье [12]. Однако для понимания физики образования изображения дефектов в рентгеновской топографии был необходим фундамент в виде динамической теории дифракции для кристаллов с искажениями кристаллической решётки. Основы теории рассеяния рентгеновских лучей для идеальных кристаллов, разработанные С.Г. Дарвином [13], П.П. Эвальдом [14] и М. Лауэ [15] ещё в 1920-е годы, обобщены в великолепной монографии Дж. Каули [16]. Первой в нашей стране фундаментальной книгой по классической динамической теории рассеяния рентгеновских лучей в идеальных кристаллах стал перевод монографии Р. Джеймса под редакцией В.И. Ивероновой [17]. Однако с дефектами, как известно, связаны локальные искажения кристаллической решётки (локальные деформации), поэтому для описания рассеяния излучения на таких искажениях необходима более сложная динамическая теория рассеяния рентгеновских лучей на *реальных кристаллах*.

Работы, направленные на построение таких теорий, продолжают уже более 60 лет. Одной из первых попыток в этом направлении, по-видимому, следует считать работу С. Такаги [18], в которой в динамическом приближении учтены смещения атомов, обусловленные тепловыми колебаниями.

Большое значение для понимания механизмов рассеяния рентгеновских лучей (РЛ) в реальных кристаллах имели работы П. Пеннинга и Д. Полдера [19, 20] по изучению дифракции в упругоизогнутых кристаллах. Однако наиболее фундаментально эта проблема была исследована Н. Като. В 1962–1973 гг. Н. Като опубликовал серию работ [21–29], в которых впервые были описаны основные принципы рентгеновской геометрической оптики кристаллов, содержащих упругие деформации.

Динамическая теория была обобщена П. Дедериксом [30, 31] для случая кристаллов, содержащих статистиче-

ски распределённые точечные дефекты. В 1970-е годы в работах М.А. Кривоглаза и его школы были сформулированы основные физические принципы рассеяния рентгеновских лучей в рамках кинематической теории на кристаллах со статистически распределёнными точечными дефектами, и позднее эти принципы были положены в основу динамической теории рассеяния излучений реальными кристаллами [32, 33].

Примерно в это же время (1962–1965 гг.) С. Такаги в Японии и Д. Топен во Франции предложили более общий подход к проблеме рассеяния рентгеновских волн на слабых искажениях кристаллической решётки. В результате была получена достаточно универсальная система дифференциальных уравнений (получившая название уравнений Такаги–Топена), описывающая этот сложный процесс в двухволновом приближении [34–37]. Появилась возможность моделировать процессы рассеяния рентгеновских лучей для сложных искажений кристаллической решётки. Другими словами, при известных характере и форме поля искажений кристаллической решётки можно было посредством численного решения уравнений Такаги–Топена получать изображения таких дефектов на рентгеновской топограмме. Достаточно подробно весь путь развития рентгеновской оптики и топографии описан в трёх прекрасных монографиях: Б. Таннера [38, 39] и А. Отье [40]. К сожалению, в них неполно отражены работы советских и российских учёных по этой проблеме.

В нашей стране в этом направлении одновременно работало несколько научных групп — в первую очередь следует назвать М.А. Елистратова, О.Н. Ефимова, И.Л. Шульпину (Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе, С.-Петербург), В.И. Иверонову, А.А. Кацнельсона (Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва), З.Г. Пинскера, В.Л. Инденбома, Ф.Н. Чуховского, И.Ш. Слободецкого, А.А. Штольберга, М.В. Ковальчука (Институт кристаллографии имени А.В. Шубникова, Москва), Ю.М. Кагана, А.М. Афонасьева, В.Г. Кона (Курчатовский институт, Москва), Э.В. Суворова, В.И. Половинкину, И.А. Смирнову, Е.В. Шулакова (Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка), М.А. Кривоглаза, Л.И. Даченко (Институт физики полупроводников, Киев), П.А. Безирганяна, К.Г. Труни (Ереванский государственный университет, Ереван), Л.Н. Данильчука (Новгородский государственный университет, Великий Новгород).

Интерес к проблеме в значительной степени был инициирован изданием в 1965 г. в нашей стране сборника из 13 работ ведущих зарубежных исследователей в области изучения дефектов в кристаллах методами электронной микроскопии и рентгеновской топографии, в послесловии которого редактор издания А.М. Елистратов сформулировал основные задачи исследования реальной структуры кристаллов прямыми методами [41]. Главный вопрос, поставленный в послесловии А.М. Елистратова, состоял в том, как образуется дифракционное изображение дефектов в методах рентгеновской топографии, электронной микроскопии и какую информацию можно получать из анализа этого изображения. В то время динамическая теория дифракции рентгеновских лучей и электронов для кристаллов с дефектами только начинала развиваться, поэтому поставленные задачи были чрезвычайно актуальными.

Сложность проблемы связана с тем, что длина волны λ рентгеновского излучения соизмерима с величиной d параметра решётки, $\lambda \sim d$, тогда как в оптике видимого света $\lambda \gg d$, а в электронной микроскопии $\lambda < d$. Соотношение $\lambda \sim d$ в рентгеновской оптике приводит, согласно уравнению Вульфа–Брэгга, к большим углам дифракции. В результате в формировании каждой детали рентгеновского изображения дефекта принимают участие области кристалла с протяжённостью не только в направлении просвечивания, но и в направлении вектора дифракции — основания так называемого треугольника Бормана (или треугольника рассеяния, образованного направлениями падающего и дифрагированного лучей). Поэтому каждой точке на входной поверхности кристалла всегда соответствует полоска на его выходной поверхности длиной порядка $2t \tan \theta$, где t — толщина образца, θ — угол дифракции. Следовательно, изображения соседних точек будут перекрываться. Поэтому в рентгеновской дифракционной микроскопии, например, невозможно использовать широко применяемый в электронной микроскопии метод колонкового приближения [42]. Изображение дефектов в методах рентгеновской топографии оказалось значительно сложнее и многообразнее по сравнению с электронно-микроскопическими. Эта проблема детально рассмотрена в обзоре В.Л. Инденбома и Ф.Н. Чуховского [43].

2. Основные понятия рентгеновской геометрической оптики кристаллов с дефектами

В оптике видимого света, радиоволн, заряженных частиц при прохождении в средах с разнообразными препятствиями широко применяются геометрические методы, использующие понятие "траектория волны", для определения параметров препятствий. Это очень наглядный способ описания прохождения волн в неоднородных средах. Необходимым условием применимости геометрического подхода является соотношение размеров неоднородностей среды L и длины волны λ излучения. Геометрическое приближение хорошо описывает процесс прохождения излучения через неоднородную среду при условии, что размеры неоднородностей намного больше длины волны λ излучения, $L \gg \lambda$. При этом используется очень простой критерий, сформулированный ещё П. Ферма, для определения траектории распространения света — луч, распространяющийся от одной точки пространства к другой, идёт по пути, который требует наименьшего времени для его прохождения. Для описания траекторий лучей в оптике обычно используются уравнения классической механики (например, уравнения Гамильтона – Якоби).

Поэтому представлялось очень заманчивым найти аналогичные решения для рентгеновского диапазона длин волн. Однако обычный подход в рентгеноструктурном диапазоне длин волн, где размеры неоднородностей среды одного порядка с длиной волны, оказывается неприменимым. Н. Като [21–29], а затем и В.Л. Инденбом [44], и уже в недавнее время В. Кон [45], исследуя дифракцию рентгеновского излучения в кристаллах, показали, что критерием применимости геометрической оптики является более жёсткое условие: $L \gg \Lambda$, где Λ — экстинкционная длина — основной параметр в динамической теории рассеяния на кристаллической

решётке:

$$\Lambda = \frac{2\pi}{\Delta k} = \frac{\lambda}{c} \frac{\cos \theta}{\sqrt{\chi_{hkl} \chi_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}}}. \quad (1)$$

Здесь χ_{hkl} и $\chi_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}$ — фурье-компоненты поляризуемости кристалла, hkl — индексы отражающих плоскостей, Δk — ширина щели в дисперсионной поверхности при точном брэгговском положении, θ — брэгговский угол.

Волновое поле любого происхождения (электромагнитное или корпускулярное), проникая в кристалл, качественно меняет свой характер. Это новое поле можно описать с помощью совокупности блоховских волн или, на языке квазичастиц, совокупностью квазичастиц с различными импульсами и массами, определяемыми положением точки возбуждения на дисперсионной поверхности $\omega(k) = \text{const}$. Нормаль к дисперсионной поверхности задаёт направление групповой скорости и, следовательно, направление движения квазичастиц. На границе зон Бриллюэна дисперсионная поверхность благодаря сильным брэгговским отражениям расщепляется. Именно этот участок дисперсионной поверхности, похожий на гиперболический цилиндр (в двухволновом случае), представляет интерес для анализа волновых полей в кристалле, находящемся вблизи положения брэгговского отражения. Как и всякая изоэнергетическая поверхность в обратном пространстве, дисперсионная поверхность перпендикулярна границе зоны Бриллюэна.

В двухволновом случае двум листам дисперсионной поверхности соответствуют два типа блоховских волн (или квазичастиц, различающихся знаком эффективной массы и величиной фазовой скорости). Разница в скоростях блоховских волн определяется величиной расщепления дисперсионной поверхности Δk . Для точного брэгговского положения расщепление минимально и, соответственно, равно расстоянию между вершинами гипербола,

$$\Delta k = k^1 - k^2 \approx 10^3 \text{ см}^{-1}. \quad (2)$$

Если на идеальный кристалл, находящийся в точном брэгговском положении, падает плоская монохроматическая волна, внутри кристалла возбуждается волновое поле, являющееся суперпозицией двух блоховских волн. Это соответствует возбуждению двух связанных точек на двух листах дисперсионной поверхности. В симметричном лауэвском случае такими точками являются вершины гипербола. Отклонение кристалла от точного брэгговского положения будет приводить к смещению точек возбуждения вдоль ветвей дисперсионной поверхности и соответствующим поворотам векторов групповой скорости.

Следует подчеркнуть, что незначительным по величине поворотам кристалла внутри области динамического отражения (на угол ~ 1 угловой секунды) соответствуют повороты вектора групповой скорости на угол порядка 2θ внутри треугольника Бормана, т.е. при дифракции имеет место своеобразный эффект "углового усиления" с коэффициентом $\sim 10^4 - 10^5$.

Не вдаваясь в детали достаточно громоздких математических выводов, мы наметим лишь канву этих рассуждений, следуя работе [44]. В амплитудах проходящей и дифрагированной волн можно выделить быстро изменяющиеся фазовые компоненты, их должно быть

две соответственно для двух листов дисперсионной поверхности. Подставив их в уравнения Такаги – Топена и проведя соответствующий анализ детерминанта на нетривиальность решения, а также вспоминая, как это делается в оптике видимого света (используя уравнения Гамильтона – Якоби из классической механики), получим уравнение для траекторий рентгеновских блоховских волн, которое оказывается аналогичным уравнению движения релятивистских частиц с массой покоя $\chi_{hkl}/2$ в силовом поле $F(x, z)$,

$$\pm \frac{\chi_{hkl}}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{dx/dz}{\sqrt{1 - (dx/dz)^2}} \right) = F(x, z). \quad (3)$$

Величина $F(x, z)$, которая соответствует силе, действующей на квазичастицу, определяется полем эффективных разориентаций отражающих плоскостей решётки $\beta(x, z)$,

$$F(x, z) = -\frac{1}{4} \left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \right) \beta(\mathbf{r}). \quad (4)$$

Функция $\beta(\mathbf{r})$ представляет собой локальные отклонения кристаллической решётки от точного условия Вульфа – Брэгга вблизи дефекта,

$$\beta(\mathbf{r}) = -2 \left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \right) \mathbf{K}_H \mathbf{U}(\mathbf{r}). \quad (5)$$

Здесь $\mathbf{K}_H$ — вектор дифракции, $\mathbf{U}(\mathbf{r})$ — поле смещений в кристаллической решётке, связанное с упругим полем дефекта. Функция $\beta(\mathbf{r})$, по существу, описывает полную локальную деформацию кристаллической решётки вблизи дефекта — локальные изменения параметра решётки и её локальную разориентацию, т.е.

$$\delta \approx \frac{\Delta d}{d} + \Delta \theta \cot \theta. \quad (6)$$

Локальные деформации в результате дифракции рентгеновских лучей приводят к изменению отражённой интенсивности, т.е. возникает изображение дефекта. Локальные отклонения кристаллической решётки от условий Вульфа – Брэгга (5), (6) получили название "комбинированные, или полные, искажения" [46].

Два знака перед левой частью уравнения (3) соответствуют двум знакам массы квазичастиц и определяют два семейства траекторий, обусловленные двумя ветвями дисперсионной поверхности. В идеальном кристалле траектории блоховских волн являются прямыми линиями, так как отсутствует поле внешних сил, $F = 0$ (рис. 2а). Если кристалл содержит упругие искажения, то траектории лучей искривляются. Например, в случае равномерного изгиба отражающих плоскостей траектории лучей приобретают форму гипербол, что соответствует движению квазичастиц в поле постоянной силы, $F = \text{const}$ (рис. 2б). Важно отметить, что блоховские волны, принадлежащие разным листам дисперсионной поверхности и обладающие эффективными массами противоположного знака, отклоняются в разные стороны; например, слабопоглощающиеся лучи изгибаются в ту же сторону, что и отражающие плоскости. При этом максимальная кривизна траекторий превышает кривизну отражающих плоскостей на 5–6 порядков. Траектории лучей, как обычно, должны быть перпендикулярны поверхностям равных фаз $S = \text{const}$.



Рис. 2. Схема, иллюстрирующая поведение траекторий рентгеновских лучей нормальных и аномальных волн в идеальных (а) и деформированных (б) кристаллах. Сплошные линии — траектории лучей слабопоглощающейся волны, штриховые линии — траектории лучей сильнопоглощающейся волны.

Анализ показывает, что в кристалле распространяются две волны: сильнопоглощающаяся (нормальная) волна и слабопоглощающаяся (аномальная или бормановская). Коэффициенты поглощения этих волн определяются соотношением

$$\mu_{1,2} \approx \frac{\mu}{\cos \theta} \left(1 \pm C \frac{\chi_{hkl i}}{\chi_{000 i}} \cos \varphi \right). \quad (7)$$

Здесь μ — фотоэлектрический коэффициент поглощения, θ — брэгговский угол, C — константа, $\chi_{hkl i}$ и $\chi_{000 i}$ — мнимые части фурье-компонент поляризуемости, φ — угол между отражающими плоскостями и поверхностью кристалла, учитывающий симметрию геометрии дифракции. Второе слагаемое в скобках в правой части (7) иногда оказывается близким к единице, и тогда выражение в скобках (7) для нормальной волны становится близким к 2 (сильное поглощение), а для аномальной — к нулю (слабое поглощение). Собственно, это и есть эффект Бормана [47–50].

На рисунке 3 показаны результаты компьютерного моделирования (численное решение уравнений Такаги – Топена) волнового поля в треугольнике рассеяния для толстого кристалла. Из рисунка видно, как по мере увеличения толщины кристалла нормальная волна поглощается, экстинкционные модуляции (в вершине треугольника Бормана на рис. 3а, которые в крупном масштабе показаны на рис. 3б) прекращаются и волновое поле, состоящее только из аномально проходящей волны, начинает стягиваться к середине треугольника рассеяния (средняя и нижняя части рис. 3а).

Методы геометрической оптики блоховских волн могут быть применены для анализа дифракционного изображения в тех случаях, когда упругое поле решётки изменяется достаточно плавно на расстояниях порядка

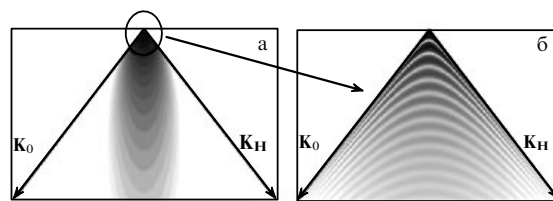


Рис. 3. (а) Результаты численного моделирования рентгеновского волнового поля в треугольнике рассеяния для случая толстого кристалла. (б) Вид волнового поля в верхней части треугольника рассеяния, показанного на рис. а, где толщина кристалла мала. $\mathbf{K}_0$ и $\mathbf{K}_H$ — волновые векторы проходящей и дифрагированной волн [51].

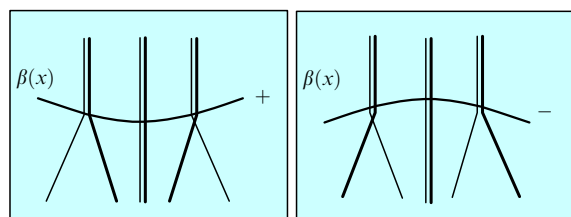


Рис. 4. Фокусировка траекторий нормальных и аномальных волн в кристаллах, содержащих комбинированные искажения кристаллической решётки в плоскости рассеяния, описываемые функцией $\beta(x)$. Схематически показан знак кривизны $\beta(x)$. Жирные линии — траектории слабопоглощающейся волны (аномальная волна), тонкие линии — траектории сильнопоглощающейся волны (нормальная волна).

экстинкционной длины и волновое поле успевает подстроиться под изменения кристаллической решётки. Эти методы оказались весьма эффективными при изучении механизмов формирования изображения на краю оксидной плёнки [29, 52, 53], на полосах роста [54], в дальнем поле дислокации [55–57] и пр. Из анализа уравнения (3) для траекторий следует несколько важных моментов [44]:

1) при отсутствии поля смещений, $\mathbf{U}(\mathbf{r}) = 0$, траектории рентгеновских лучей будут прямолинейными для любых направлений внутри треугольника Бормана (рис. 2а);

2) деформация кристаллической решётки (например, изгиб кристаллографических плоскостей) приводит к искривлению траекторий рентгеновского волнового поля;

3) при уменьшении поля смещений вдоль направления проходящей волны слабопоглощающиеся моды будут отклоняться в сторону вектора отражения, а сильнопоглощающиеся — в противоположную сторону (рис. 2б);

4) локальные участки кристалла, на которых функция локальных разориентаций решётки в плоскости дифракции имеет отрицательную кривизну, фокусируют слабопоглощающиеся лучи, наподобие собирающих линз; с другой стороны, сильнопоглощающиеся лучи рассеиваются, как это происходит в рассеивающих линзах. Локальные участки кристалла, на которых сечение функции локальных разориентаций решётки плоскостью дифракции имеет положительную кривизну, оказывают на два типа волн противоположное действие. Это явление схематически представлено на рис. 4.

3. Волновое поле в идеальном кристалле. Секционные топограммы

Дифракционный контраст на секционных топограммах для идеальных кристаллов формируется интерференционным взаимодействием динамических волновых полей, распространяющихся в кристаллической решётке, и определяется только отношением толщины кристалла к экстинкционной длине. При симметричной дифракции по Лауэ распределение интенсивности на выходной поверхности кристалла для точечного источника излучения описывается выражением [43, 58, 59]

$$I(x) = \exp\left(-\frac{\mu t}{\cos \theta}\right) J_0^2\left[\frac{\pi t}{A}(1-\sigma^2)^{1/2}\right]. \quad (8)$$

Здесь J_0 — цилиндрическая функция Бесселя нулевого порядка, μ — линейный коэффициент фотоэлектрического поглощения, t — толщина кристалла, θ — брэгговский угол, $A = \lambda \cos \theta / (C|\chi_{hkl}|)$ — экстинкционная глубина, где C — поляризационный фактор, χ_{hkl} — фурье-коэффициент поляризуемости кристалла. Параметр $\sigma = (x/z) \tan \theta$ изменяется внутри палатки Бормана от -1 до 1 . Для оценки степени поглощения будем использовать параметр $P = \mu t / \cos \theta$. Выражение (8) описывает картину осцилляций (интерференционных полос) на топограмме в случае слабого интерференционного поглощения ($P < 1$). В центре изображения — медленные осцилляции. К краям частота осцилляций существенно возрастает с увеличением их амплитуды. При изменении отношения t/A интерференционная картина также имеет осциллирующий характер с квазипериодом, равным единице.

Из выражения (8) видно, что фактор нормального поглощения $\exp(-\mu t / \cos \theta)$ определяет интенсивность интерференционной картины, однако он не влияет ни на характер распространения излучения в кристалле, ни на контраст топограмм. По аргументу бесселевой функции можно оценить характер изменения режима рассеяния в зависимости от толщины образца: 1) $P < \pi/(3\epsilon C)$ — тонкий кристалл, 2) $P > 8\pi/(3\epsilon C)$ — толстый кристалл, параметр $\epsilon = \chi_{hkl i} / \chi_{000 i}$. Области 1 соответствует картина интерференции волновых полей, а в области 2 контраст определяется эффектами аномального прохождения рентгеновских лучей. Соответственно, для σ -поляризации области тонкого и толстого кристалла определяются условиями 1) $P < 1$, и 2) $P > 9$. Промежуточная область характеризуется уменьшением контраста осцилляций и формированием в центре палатки Бормана распределения колоколообразного вида. На теоретических графиках слабые осцилляции заметны при значениях P вплоть до $P = 5$.

Экспериментальные распределения интенсивности, полученные на лабораторных источниках излучения, существенно отличаются от теоретического распределения интенсивности (8). Это связано, во-первых, с тем, что излучение рентгеновских трубок является неполяризованным и экстинкционные длины A для σ - и π -поляризации различаются: $A_\pi = A_\sigma / \cos \theta$. Так, для отражения Si(224) при излучении $\text{MoK}_{\alpha 1}$ $A_\sigma = 48,3$ мкм и $A_\pi = 60,7$ мкм [50]. Результирующая картина для неполяризованного излучения описывается соотношением

$$I_{\sigma+\pi}(x) = I_\sigma(x) + I_\pi(x) \cos^2 \theta. \quad (9)$$

Как следствие, полученное изображение имеет более сложный характер, представляя собой наложение интерференционных картин для σ - и π -поляризаций.

На рисунке 5 приведены три экспериментальные секционные топограммы кристаллов для трёх разных толщин и результаты численного моделирования волнового поля дифрагированной волны в треугольнике рассеяния в идеальном кристалле [56, 60].

Вторым существенным моментом является то, что изображение формируется протяжённым источником излучения. В случае, когда размер фокуса трубки в плоскости рассеяния существенно больше ширины входной щели, сама щель играет роль протяжённого некогерентного источника. Наблюдаемая на топограмме интерференционная картина описывается свёрткой распределе-

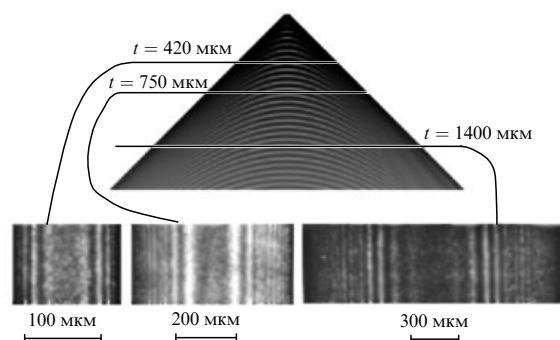


Рис. 5. Примеры экспериментальных секционных топограмм кристаллов с тремя разными толщинами t (в нижней части рисунка) и результат численного моделирования волнового поля дифрагированной волны в треугольнике рассеяния в идеальном кристалле (в верхней части рисунка) [60].

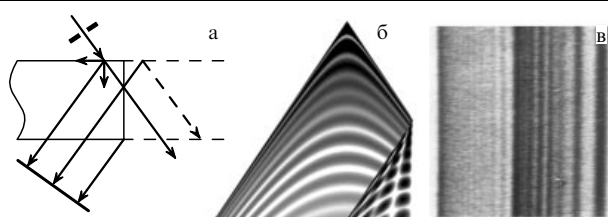


Рис. 6. (а) Схема эксперимента. (б) Результат численного моделирования. (в) Соответствующая экспериментальная секционная топограмма [64].

ния интенсивности (9) с функцией пропускания входной щели.

На проекционных топограммах описанный выше тип контраста будет размываться, поскольку структура интерференционных полос не связана с определённой областью образца.

Важную роль в образовании изображения дефектов в кристаллах играют разнообразные дифракционные явления. Рассмотрим подробнее некоторые из них. В первую очередь, это отражение рентгеновского волнового поля на границе раздела, известное в литературе как эффект Бормана – Лемана [61 – 64].

На рисунке 6 показано, как волновое поле взаимодействует с границей раздела кристалл–вакуум (эффект Бормана – Лемана). На границе возникает дифракционное отражение волны, распространяющейся в треугольнике рассеяния [61 – 64]. Отражённая волна всегда будет состоять из нормальной и аномальной волн. Эти новые волны интерферируют с волновым полем, уже существующим в треугольнике рассеяния, формируя изображение границы раздела. Естественно, аналогичное явление будет формироваться не только на идеальной границе, но и на быстро изменяющемся упругом поле в кристалле. Следовательно, этот эффект должен играть существенную роль при образовании изображений таких дефектов, как дислокации, двойниковые границы, межзёрненные границы.

Другим дифракционным эффектом, играющим большую роль в формировании изображения дефектов, является фокусировка рентгеновского волнового поля. Этот эффект, предсказанный В.Л. Инденбмом [65], позднее был исследован экспериментально [66]. Суть такой фокусировки становится понятной из рис. 7. Коллимированный до ширины менее 10 мкм рентгеновский луч дважды дифрагирует на П-образном интерферо-

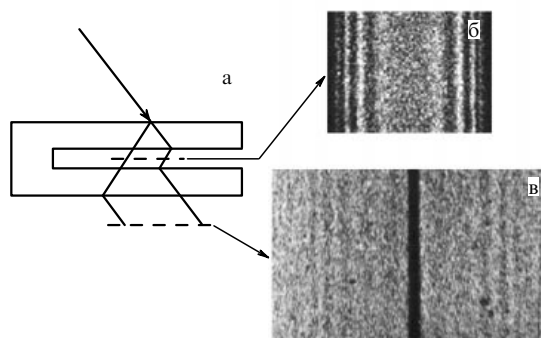


Рис. 7. (а) Схема двухкристального интерферометра. Плечи интерферометра имеют одинаковую толщину [66]. (б) Топограмма дифрагированной волны на первом плече интерферометра. (в) Топограмма дважды дифрагированной волны.

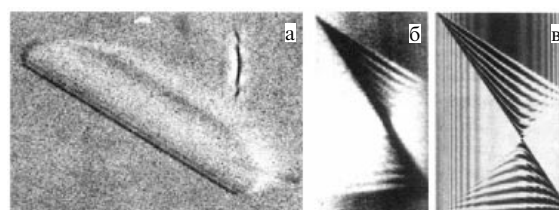


Рис. 8. Дифракционное изображение дефекта упаковки в кристалле кремния (111), отражение (111) CuK_α . (а) Топограмма, полученная по схеме Ланга со сканированием. (б) Секционная топограмма. (в) Результаты численного моделирования секционной топограммы дефекта упаковки [40].

метре. При дифракции на первой пластине интерферометра возникает модулированная по амплитуде и фазе волна, которая при дифракции на второй пластине сжимается в тонкий фокус. Аналогичное явление наблюдается при рассеянии, например, на дефекте упаковки (рис. 8), расположенном наклонно к поверхности кристалла [29, 40].

Наконец, рассмотрим эффект каналирования поля вдоль неоднородностей кристаллической решётки. Это явление также было предсказано В.Л. Инденбмом для случая дефекта упаковки, расположенного перпендикулярно поверхности кристалла [67, 68], а затем обнаружено экспериментально при дифракции рентгеновской волны на кристаллах с дефектом упаковки [69]. Вдоль дефекта упаковки в непосредственной близости от плоскости дефекта распространяется узкий пучок рентгеновского излучения, т.е. наблюдается волноводный эффект. На рисунке 9 представлены экспериментальные изображения дефекта упаковки, иллюстрирующие эффект каналирования и дифракционной фокусировки.

Естественно, все рассмотренные выше эффекты тесно связаны между собой и являются следствиями динамического рассеяния рентгеновского излучения в кристаллах. Оказалось, что именно эти три эффекта играют определяющую роль в формировании дифракционного изображения дефектов в рентгеновской топографии.

4. Некоторые аспекты численного моделирования дифракционного изображения

Для моделирования рассеяния рентгеновского волнового поля на дислокациях в кристаллах широко используется система дифференциальных уравнений Такаги –

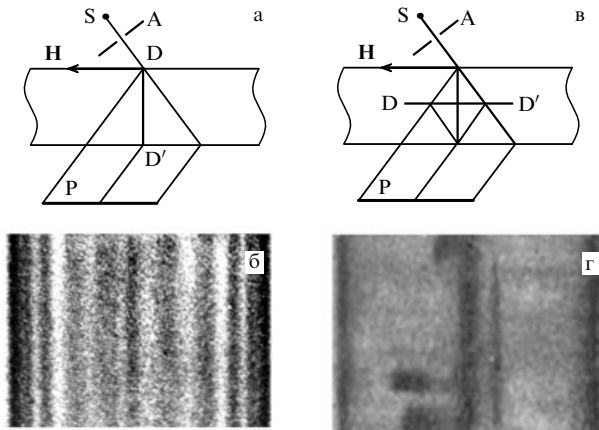


Рис. 9. Схема расположения дефекта упаковки вдоль биссектрисы палатки Бормана в плоскости (111) (а) и секционная топограмма (б) с использованием отражения от плоскости (333), на которой хорошо виден след каналирования вдоль дефекта упаковки. (в) Схема расположения дефекта упаковки в плоскости (111) в середине кристалла параллельно поверхности кристалла и (г) соответствующая секционная топограмма (220), иллюстрирующая фокусировку излучения в центр топограммы. Эксперимент выполнен на монокристаллах кремния, излучение $\text{MoK}_{\alpha 1}$ [69]. А — щель коллиматора, формирующая рентгеновский пучок, DD' — дефект упаковки, S — источник излучения, P — двумерный детектор излучения (фотопластинка), H — вектор дифракции.

Топена [34–37]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi_0}{\partial s_0} &= -i\pi K C \chi_{hkl} \psi_{hkl}, \\ \frac{\partial \psi_{hkl}}{\partial s_{hkl}} &= -i\pi K C \chi_{hkl} \psi_0 + i2\pi K \beta_{hkl} \psi_{hkl}, \end{aligned} \quad (10)$$

здесь ψ_0 и ψ_{hkl} — амплитуды прошедшей и дифрагированной волн, $\mathbf{K}$ — волновой вектор ($K = |\mathbf{K}| = 1/\lambda$), s_0 и s_{hkl} — текущие координаты точки s в плоскости рассеяния в системе координат, осями которой являются единичные векторы $\mathbf{s}_0$ и $\mathbf{s}_{hkl}$, определяющие направления падающей и рассеянной волн. C — поляризационный фактор. Функция β_{hkl} (аналогична функции (5), приведена здесь в координатах, используемых в уравнениях Такаги), описывающая локальные отклонения отражающих плоскостей от точного условия Брэгга, связана с полем смещений внутри кристалла $U(x, y, z)$ соотношением

$$\beta_{hkl} = \frac{1}{K} \frac{\partial}{\partial s_{hkl}} (\mathbf{H}\mathbf{U}), \quad (11)$$

где $\mathbf{H}$ — вектор обратной решётки, или вектор дифракции.

При решении уравнений Такаги–Топена для поля смещений дислокаций $\mathbf{U}(\mathbf{r})$ обычно используется выражение, описывающее поле смещений от прямолинейной дислокации в цилиндрической системе координат [70, 71],

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(\mathbf{r}) &= \frac{\mathbf{b}}{2\pi} \left[\varphi + \frac{\sin(2\varphi)}{4(1-\nu)} \right] - \\ &- \frac{\boldsymbol{\tau} \times \mathbf{b}}{2\pi} \left[\frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \ln r + \frac{\cos(2\varphi)}{4(1-\nu)} \right] + \text{const}. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь $\boldsymbol{\tau}$ — единичный вектор линии дислокации, $r(\varphi)$ описывает точку наблюдения вокруг линии дислокации, $\mathbf{b}$ — вектор Бюргерса, ν — коэффициент Пуассона. Краевая дислокация зеркально симметрична относительно следа дополнительной полуплоскости. Это накладывает на полярный угол φ дополнительные ограничения. Введём для дислокации декартову систему координат x_1, y_1, z_1 с осями $\mathbf{e}_1 = \mathbf{b}/b$, $\mathbf{e}_2 = \boldsymbol{\tau} \times \mathbf{b}/b$, $\mathbf{e}_3 = \boldsymbol{\tau}$. В этом случае угол $\varphi = \arctan(y_1/x_1)$, где функция $\arctan$ понимается в смысле главного значения. Расходимость выражения (12) вблизи ядра дислокации устраняется выбором начала координат в центре элементарной ячейки кристалла. Важное значение для интерпретации выражения (12) имеет константа интегрирования. Выберем её в виде

$$\text{const} = \frac{\mathbf{b}}{4} \text{sign } x_1. \quad (13)$$

Тогда поле смещения (12) будет удовлетворять граничным условиям $U_x(\infty, 0) = -U_x(-\infty, 0) = b/4$ для дислокационной модели в периодической среде Пайерлса–Набарро [70, 72]. Кроме того, такой выбор константы интегрирования устраняет потерю дальнего порядка на периферии дислокации в области $|y_1| \gg |x_1|$. Таким образом, существенным искажением кристаллической решётки отвечает окрестность линии дислокации, а на периферии — идеальная матрица. Такое положение согласуется с экспериментальным наблюдением дислокации в кристаллах.

Обратим внимание на изменение межплоскостного расстояния вдоль оси y_1 в окрестности $|x| = d$. Оно равно $2d$ в области $y_1 \gg d$ и d в области $y_1 < 0$ и $-y_1 \gg d$. Вблизи ядра дислокации межплоскостное расстояние плавно изменяется от $2d$ до d , проходя через значение $1,5d$ при $y_1 = 0$. Всё это означает, что при брэгговском рассеянии излучения в области ядра дислокации можно наблюдать эффекты зеркального отражения от границы раздела $x_1 = 0$.

При расчётах изображений дислокаций система (10) аппроксимировалась неявными конечно-разностными уравнениями второго порядка точности. Граничные условия задавались согласно схемам, предложенным в работах [68, 73, 74]. При моделировании топограмм обычно учитывается, что в экспериментальной схеме используется протяжённый источник излучения, размеры которого определяются шириной входной щели. Поэтому для соответствия условиям съёмки делалась свёртка рассчитанного изображения с функцией пропускания входной щели. Следует отметить, что область ядра реальной дислокации выходит за пределы применимости уравнений Такаги, поэтому при моделировании дифракционной задачи обычно учитывается размер ядра порядка 10 межатомных расстояний.

Область деформаций, в которой возможно применение уравнений Такаги, исследовалась многими авторами. Результаты этих исследований, которые наиболее полно представлены в работах [34–38], могут быть выражены в виде

$$\left| \frac{\partial^2 (\mathbf{H}\mathbf{U})}{\partial s_0 \partial s_{hkl}} \right| \Lambda^2 \ll 1, \quad (14)$$

где Λ — экстинкционная длина. Физически это означает, что радиус кривизны траекторий должен быть существенно больше экстинкционной длины.

Интенсивность дифрагированной и прошедшей волн будет соответственно определяться выражениями

$$I_{hkl}(x, y) = |\psi_{hkl} \psi_{hkl}^*|, \quad I_0(x, y) = |\psi_0 \psi_0^*|. \quad (15)$$

Для расчёта дифракционного изображения какого-либо дефекта необходимо найти значения амплитуд поля, а затем интенсивность в каждой точке рентгеновской топограммы, т.е. в узлах сетки (x_i, y_i) , которой разбивается всё поле топограммы. Распределение интенсивности дифрагированной волны на выходной поверхности кристалла в случае неполяризованного излучения будет определяться суммой интенсивностей для двух поляризаций. При решении уравнений подобного типа обычно используется метод конечных разностей [34–38, 68, 73, 74]. Решение соответствующей конечно-разностной задачи находится в точках сетки (x_i, y_i) для каждого фиксированного значения y_j (т.е. в каждой плоскости рассеяния, согласно выбранной сетке) для двух значений поляризации, т.е. в каждом сечении, образованном дифракционными векторами $\mathbf{K}_0, \mathbf{K}_1$ (так называемого треугольника Бормана). Шаг сетки, который обычно является переменным, подбирается исходя из требуемого разрешения получаемой топограммы.

5. Формирование рентгеновского дифракционного изображения дефектов в кристаллах

Проблема дифракционного изображения дефектов связана с потребностью расшифровки экспериментально наблюдаемых изображений дефектов кристаллической решётки. Наибольшее количество публикаций посвящено исследованию изображения дефектов в монокристаллах полупроводниковых материалов (германия, кремния, антимонида индия, арсенида галлия и пр.). Интерес к дефектам первоначально был связан с задачами практического применения указанных материалов в электронной промышленности, так как дефекты сильно влияли на их электрические свойства. Особое место в изучении механизмов образования дифракционного изображения в рентгеновской топографии занимают два типа дефектов: дефекты упаковки и дислокации.

Дефекты упаковки — это плоские дефекты, не имеющие упругого поля, и поэтому для дифракционных исследований они являются наиболее простыми и в то же время очень интересными, поскольку на плоскости дефекта возникают эффекты отражения, каналирования и фокусировки волнового поля [29, 40, 55, 75, 76].

Дислокации являются линейными дефектами с плавным убывающим упругим полем, которое обратно пропорционально расстоянию от оси дислокации. В окрестности оси дислокации (ядро дислокации) упругое поле скачком меняет знак и его можно приближённо описать двумя близко расположенными дефектами упаковки разных знаков. Это более сложный случай по сравнению со случаем дефекта упаковки, однако именно он наиболее интересен, поскольку здесь реализуются разнообразные ситуации взаимодействия рентгеновской волны с упругим полем: во-первых, её взаимодействие с плавным убывающим упругим полем, при котором может быть применена оптика траекторий; во-вторых, взаимодействие с быстро меняющимся упругим полем вблизи оси дислокации, где упругое поле меняет знак. Поэтому в дальнейшем мы в основном будем обсуждать контраст дислокаций, так как именно для этого дефекта проявляется всё многообразие взаимодействия рентгеновского волнового поля со сложным упругим полем дефекта.

Первые систематические представления о формировании дифракционного изображения дислокаций были даны А. Отье [12, 40, 75, 76]. На рисунке 10 изображена дислокация, расположенная в кристалле наклонно к поверхности образца. В подписи к рисунку приведена терминология, предложенная А. Отье для обозначения различных деталей изображения.

В работах А. Отье изображение дислокаций условно подразделялось на три части: "прямое", или "кинематическое", изображение, которое формируется в сильно искажённой области дислокационного упругого поля, вследствие того что падающий пучок имеет конечную расходимость и определённый спектральный состав; "динамическое" изображение, связанное с динамическими эффектами дифракции, и, наконец, "промежуточное" изображение, являющееся результатом интерференции волнового поля, распространяющегося в треугольнике Бормана, с новыми волновыми полями, возникающими в искажённой области вблизи дислокации [12, 40].

Последующие экспериментальные и теоретические исследования показали, что принципы, положенные А. Отье в основу дислокационного контраста, в основном соответствуют действительности, однако реальная картина формирования дифракционного изображения дислокаций сложнее [55, 63, 64, 76–86].

Кинематический контраст связан со значительными вариациями межплоскостного расстояния и ориентации отражающих плоскостей вблизи ядра дефекта. Как следствие, рассеянию первичного излучения в искажённой области соответствуют существенно более широкие

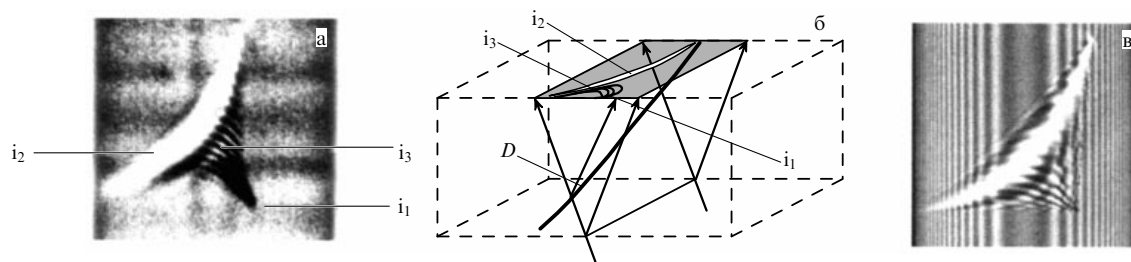


Рис. 10. (а) Экспериментальное секционное изображение дислокации D, расположенной наклонно в образце кремния, имеющем вид параллелепипеда. Излучение $\text{MoK}_{\alpha 1}$, толщина кристалла 0,8 мм, $\mu t = 1,12$, отражение (220). (б) Схематическое изображение кристалла с дефектом: i_1 — прямое изображение, i_2 — динамическое изображение, i_3 — промежуточное изображение. (в) Результат численного моделирования секционной топограммы, соответствующего рис. а и б [12, 40].

угловой и хроматический спектры падающей волны. Другими словами, в искажённой области кристалла рассеивается существенно бóльшая доля первичного пучка, чем на совершенных участках образца, и кинематическое изображение резко выделяется на топограмме по интенсивности. Кинематическое изображение переносится на выходную поверхность образца с нормальным поглощением вдоль направления дифрагированной волны. Фактически кинематическое изображение и является "прямым" изображением сильно искажённой области. Оно привязано к локальной области образца и, соответственно, воспроизводится на топограммах сканирования. Таким образом, сильно искажённой области вблизи ядра дислокации отвечает кинематический контраст, а на периферии в области слабых искажений формируется динамическое интерференционное изображение дефекта.

Явления, происходящие при рассеянии рентгеновского излучения на кристаллической решётке, искажённой упругим полем дислокаций, существенным образом зависят от величины градиентов деформаций. Вдали от дислокации, где упругое поле решётки изменяется достаточно слабо на расстояниях порядка экстинкционной длины, поток энергии волнового поля успевает подстраиваться под изменения кристаллической решётки. Основным механизмом, формирующим дислокационное изображение, в этом случае, если описывать эти процессы на языке траекторий, будет смещение траекторий блоховских волн, изменение их фаз и их интерференция. Это и будет представлять собой динамическое изображение. Динамический контраст дефектов на секционных топограммах проявляется в виде картины интерференционных полос вокруг прямого изображения дефекта. На проекционных топограммах этот тип контраста будет размываться, так как геометрия и структура этих полос зависят от положения дефекта в палатке Бормана. Динамические интерференционные полосы, которые очень чувствительны к степени совершенства кристалла, определяются напряжениями (точнее, полем смещений), вызванными дефектами. Так, при плотности дислокаций более чем 10^3 см^{-2} интерференционные полосы практически исчезают.

Дислокационные линии в монокристаллах обычно имеют весьма причудливую форму и ориентацию, поэтому анализ характера контраста таких дислокаций в общем случае является сложной задачей. Решить задачу обычно удаётся лишь для специальных ориентаций дислокаций, а именно в случаях, когда их ось парал-

лельна одному из выделенных в кристалле направлений. Такими ориентациями являются вектор дифракции, нормаль к плоскости рассеяния и, наконец, направление, перпендикулярное первым двум, т.е. когда ось дислокации лежит в плоскости рассеяния перпендикулярно вектору дифракции. Эти ориентации получили название "особые положения" дефекта. Идея такого подхода была предложена А.М. Елистратовым в послесловии к книге [41]. Сам термин "особое положение" впервые был употреблён в статье [81].

Для проведения анализа и моделирования любое общее пространственное расположение дефекта можно разбить на малые прямолинейные участки, далее разложить эти участки на три составляющие вдоль обозначенных выше направлений и решать три соответствующие задачи. Поэтому, чтобы разобраться в том, как происходит образование изображения, целесообразно изучить изображения дислокаций для этих ориентаций и построить для них соответствующие модели рассеяния. Такой подход был использован для изучения механизмов образования изображения дислокаций [82, 83–91]. На рисунке 11 схематически представлена идея этого подхода.

Сопоставление изображений разных ориентаций дислокаций в треугольнике рассеяния (палатке Бормана) позволяет выделить различные интерференционные эффекты, участвующие в формировании дифракционного изображения дислокаций, и оценить их роль [37–39, 82, 83–91]. В разделах 5.1–5.3 приведены экспериментальные изображения дислокаций в особых положениях, результаты численного моделирования этих изображений и проведён анализ механизмов, участвующих в образовании дифракционного контраста. Описанные в разделах 5.1–5.3 результаты получены на прямолинейных дислокациях; методика создания таких дислокаций описана в работе [82].

5.1. Линия дислокации, перпендикулярная плоскости рассеяния

Рассмотрим случай, в котором ось дислокации перпендикулярна плоскости рассеяния [80, 82–95]. На рисунке 12 показаны схема эксперимента, экспериментальные секционные топограммы и соответствующие результаты численного моделирования. Дислокация D — прямолинейная 60° -ная дислокация — расположена перпендикулярно плоскости рассеяния. Образец перемещается под рентгеновским пучком на строго фиксированные рас-

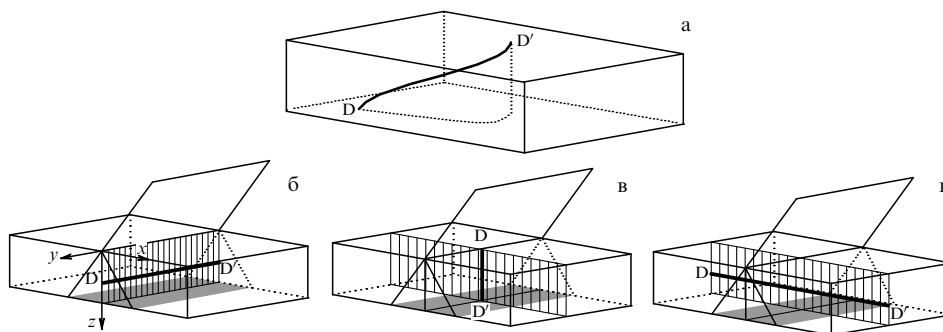


Рис. 11. (а) Общее расположение криволинейной дислокации D–D'. Особые положения дислокации: (б) ось дислокации перпендикулярна плоскости рассеяния, (в) ось дислокации лежит в плоскости рассеяния перпендикулярно вектору отражения, (г) ось дислокации лежит в плоскости отражения параллельно вектору дифракции [85].

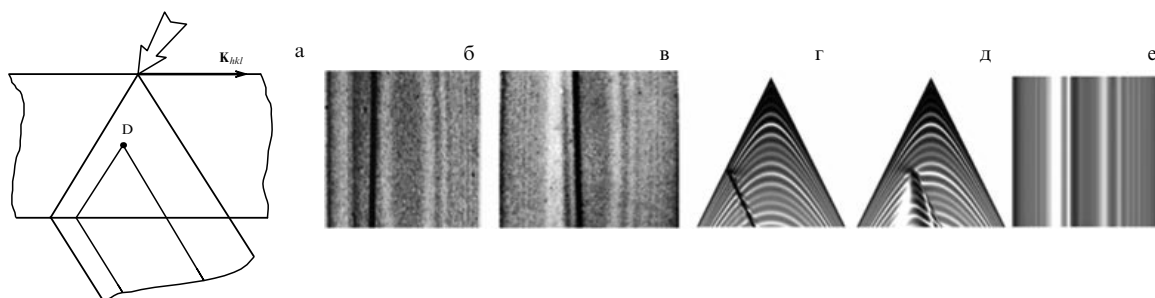


Рис. 12. (а) Схема эксперимента. (б) Фрагмент секционной топограммы с дислокацией, расположенной на краю треугольника Бормана ($x = -152$ мкм). (в) Фрагмент секционной топограммы, дислокация расположена в левой части треугольника рассеяния, $x = -57$ мкм (расстояние измеряется от биссектрисы треугольника рассеяния). (г, д) Результаты численного моделирования волнового поля внутри треугольника рассеяния, соответствующие рис. б и в. (е) Секционная топограмма, соответствующая рис. в [80]. Монокристалл кремния, 60° -ная дислокация на глубине 565 мкм, излучение $\text{MoK}_{\alpha 1}$, толщина кристалла $t = 730$ мкм.

стояния, кратные 10 мкм. Таким образом, получают секционные топограммы с различным расположением линии дислокации в треугольнике рассеяния.

На рисунке 12б дислокация находится в левой части палатки Бормана и пересекает направление падающего пучка, на рис. 12в дислокация находится примерно в середине левой части палатки Бормана.

Представляет интерес рассмотреть, как ведёт себя волновое поле внутри треугольника рассеяния. Отражающие плоскости перпендикулярны входной поверхности образца и плоскости рис. 12б. 60° -ная дислокация лежит перпендикулярно плоскости рисунка xu , а линия дислокации направлена вдоль оси y . Краевая компонента этой 60° -ной дислокации имеет вектор Бюргерса $\mathbf{b} = (b_x, 0, b_z)$. Следовательно, винтовая компонента в данной геометрии дифракции не даёт вклада в изображение дислокации. Изображение определяется только краевой компонентой. Распределения волнового поля в плоскости рассеяния показаны на рис. 12г и 12д. На рисунке 12г хорошо виден прожектор прямого изображения из области пересечения прямого пучка с сильно искажённой областью ядра дислокации. Обращает на себя внимание отсутствие яркого прямого изображения дислокации на рис. 12в, 12д. Это связано с тем, что положение ядра дислокации находится вне первичного пучка. С другой стороны, периферийные области дислокации вызывают существенное возмущение динамической интерференционной картины. Анализ экспериментальных секционных топограмм и расчётных изображений указывает на то, что структура изображения дислокации в случае секционных топограмм сильно зависит от того, в каком месте она пересекает треугольник рассеяния.

Прямое, или кинематическое, изображение дислокации присутствует на секционных топограммах только тогда, когда сильно искажённая область вблизи ядра дислокации с быстро меняющимся полем разориентаций пересекает падающий пучок. В этом случае из области пересечения падающего пучка с осью дислокации возникает яркий прожектор в направлении дифрагированного пучка. Прямое изображение дислокации на секционной топограмме позволяет определить глубину её залегания под поверхностью образца.

По мере удаления линии дислокации от оси первичного пучка рентгеновского излучения яркость этого прожектора быстро убывает, рассеянный пучок разбивается на множество интерференционных пятен и вблизи него

со стороны первичного пучка возникает светлая тень, связанная с перераспределением рассеянной волны на слабо искажённой области.

Рассмотрим ещё один очень важный механизм, ответственный за образование прямого изображения. Функция эффективных разориентаций вблизи ядра дислокаций очень быстро изменяется при приближении к оси дислокации, выходит за пределы кривой отражения, и локальная область вблизи ядра для падающей рентгеновской волны становится просто поглощающим материалом. Таким образом, вокруг оси дислокации существует область, в которой рентгеновское волновое поле практически не взаимодействует с кристаллической решёткой. Следовательно, возникает псевдограница, на которой должно происходить рассеяние рентгеновской волны, так же как это происходит в случае ограниченного кристалла, т.е. будет возникать отражение, как на зеркальной поверхности, с той лишь разницей, что каждый раз образуются нормальная и аномальная волны. Возникновение новых волн при взаимодействии проходящей волны с границей раздела получило в литературе название межветвевое рассеяния [38–40].

Здесь прослеживается аналогия с рассеянием на границе раздела в ограниченном кристалле — сильно искажённая область упругого поля деформации вблизи ядра дислокации подобна полупрозрачному зеркалу, на котором происходит отражение части сформированного внутри треугольника рассеяния волнового поля идеального кристалла [61–64]. Это отражённое поле когерентно первичному полю, так как порождено им, и, следовательно, отражённое поле интерферирует с первичным волновым полем, образуя наблюдаемое дифракционное изображение дислокации.

Описанный выше механизм подтверждается результатами работы [85]. Рассмотрим такую модель. Пусть внутри кристаллической решётки находится дефект в виде тонкой прямолинейной трубки диаметром около 1 мкм, материал которой полностью вышел из отражающего положения и всё его взаимодействие с рентгеновской волной сводится к фотоэлектрическому поглощению. Предлагаемая модель позволяет полностью исключить влияние убывающего упругого поля дислокации ($\sim 1/r$) на формирование изображения и исследовать в чистом виде физику образования прямого изображения дефекта. Проведём численное моделирование этой ситуации. В этой модели область взаимодействия волнового поля в треугольнике рассеяния локализована и

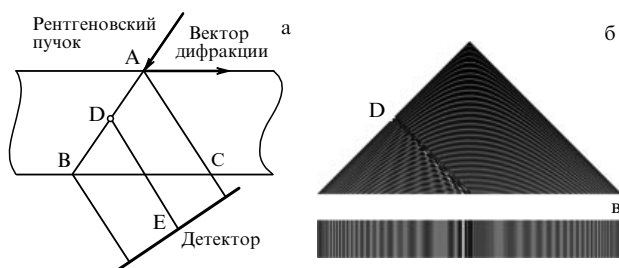


Рис. 13. (а) Схема численного эксперимента для кристалла, внутри которого расположен дефект D в виде тонкой прямолинейной трубки диаметром порядка 1 мкм, перпендикулярной плоскости рассеяния, материал трубки полностью вышел из отражающего положения. ABC — треугольник Бормана, E — след прямого изображения дефекта. (б) Волновое поле внутри треугольника Бормана. (в) Соответствующая секционная топограмма [85].

ограничивается областью сечения трубки-модели плоскостью дифракции.

Все процессы рассеяния здесь протекают на линии сечения трубки-модели плоскостью рассеяния. Из этой области возникает яркий прожектор в направлении дифрагированного пучка. Этот луч и является в данном случае прямым изображением нашей модели дефекта. Он образуется в результате рассеяния на стенках трубки, точно так же как это происходит в ограниченном кристалле [61–64]. На рисунке 13 приведены схема численного эксперимента и соответствующие секционная топограмма и треугольник рассеяния [85]. Естественно, внутри треугольника, образованного направлением падающего пучка и лучом, формирующим прямое изображение, происходит интерференция старого волнового поля с новым, возникшим при рассеянии основного волнового поля на стенках трубки. Этот процесс иллюстрируется на рис. 13б, в.

При получении топограмм со сканированием все эти тонкие детали изображения усредняются, остаются только яркий след прямого изображения и слабая светлая тень.

5.2. Линия дислокации, расположенная в плоскости рассеяния параллельно вектору отражения

Случай, в котором линия дислокации расположена в плоскости рассеяния параллельно вектору отражения,

представляет особый интерес, так как он является частным одномерным случаем при исследованиях тонких приповерхностных слоёв в монокристаллах, используемых в микроэлектронике, оптоэлектронике и рентгеновской оптике. Дислокации в данном случае являются лишь удобной моделью для изучения рассеяния рентгеновского волнового поля на локализованных деформациях в реальных кристаллах.

5.2.1. Изображения дислокаций в тонком кристалле. На рисунке 14 показаны геометрия эксперимента и секционные топограммы для трёх значений дифракционной мощности дислокаций [51, 55, 57, 77, 86–88]. Ось дислокации в этой геометрии пересекает весь треугольник рассеяния вдоль вектора дифракции и, следовательно, все точки дефекта, лежащие в плоскости рассеяния, будут вносить вклад в изображение дефекта, формируемое на выходной поверхности, как было показано в работах [38, 40]. Каждая точка сильно искажённой области вблизи оси дефекта будет рождать новые волновые поля, аналогично тому, как это происходит на границе раздела кристалл–вакуум [61–65]. Другими словами, каждая точка на оси дефекта становится источником рассеянных волн, т.е. в каждой точке образуется новый треугольник рассеяния, и на выходной поверхности кристалла будет формироваться сложное изображение дефекта, являющееся суперпозицией всех рассеянных волн [43, 55, 56, 95].

На экспериментальных секционных топограммах видно, что с возрастанием параметра m наблюдается усложнение формы изображения: 1) увеличивается изгиб интерференционных полос и возникают новые интерференционные полосы; 2) увеличиваются размеры прямого изображения и усложняется его форма. Этот результат подробно проанализирован в работе [55] в рамках геометрической оптики.

Траектории нормальных и аномальных волн, распространяющихся в кристаллической решётке вблизи дислокации, изгибаются в упругом поле, приобретают дополнительную разность хода и, следовательно, дополнительную разность фаз.

На рисунке 15 схематически представлена поверхность дополнительной разности фаз, возникающей при прохождении волн в упругом поле дислокации. Из рисунка виден механизм образования новых интерферен-

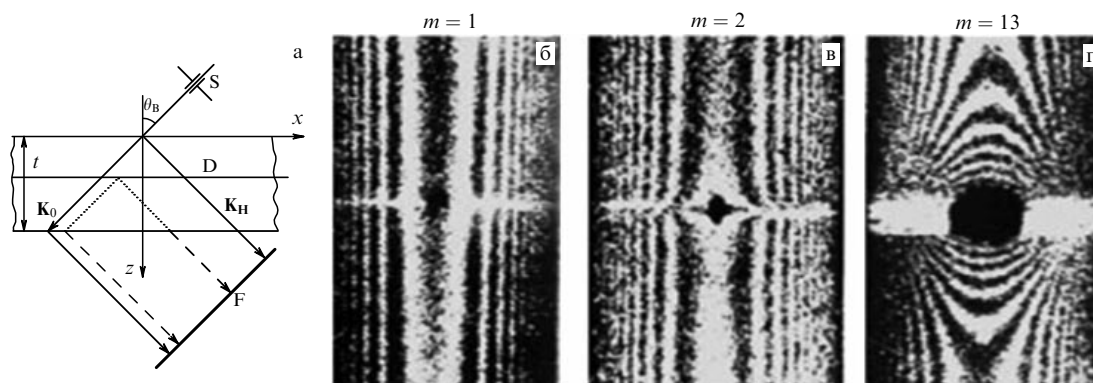


Рис. 14. (а) Геометрия эксперимента. S — формирующая щель коллиматора, F — прямое изображение дислокации D на детекторе, θ_B — угол Брэгга. (б–г) Секционные топограммы с изображением дислокаций с разными значениями дифракционной мощности $m = \mathbf{K}_H \mathbf{b} / (2\pi)$ упругого поля искажений. Толщина кристалла $t = 410$ мкм, излучение $\text{MoK}_{\alpha 1}$, отражение от плоскостей (220). Все дислокации винтовые, вектор Бюргерса ориентирован вдоль вектора дифракции $\mathbf{H}$ [88].

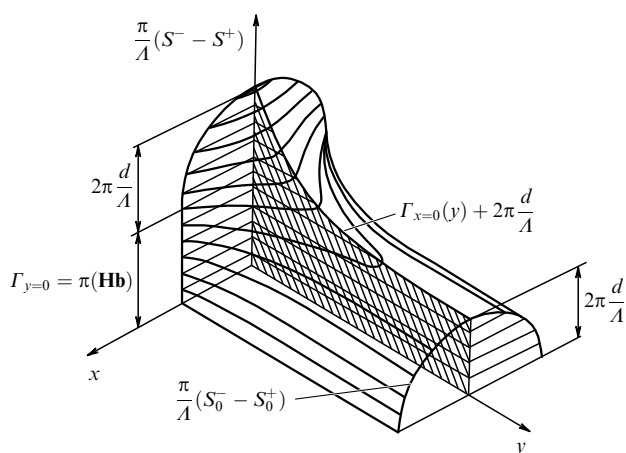


Рис. 15. Общий вид поверхности полной разности фаз для волн в упругом поле дислокации. S^+ и S^- — фазы двух типов блоховских волн, распространяющихся в треугольнике рассеяния, Γ — разность фаз этих волн, A — экстинкционная длина, $\mathbf{H}$ — вектор дифракции, $\mathbf{b}$ — вектор Бюргерса, d — межплоскостное расстояние. Горизонтальные линии соответствуют экстинкционным полосам на секционных топограммах [55].

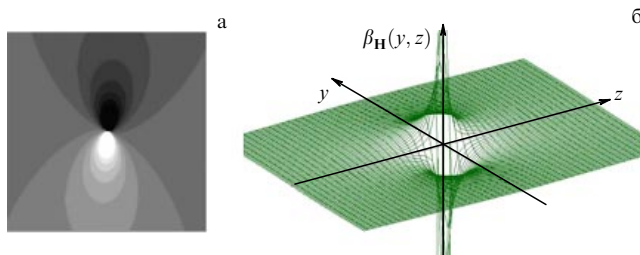


Рис. 16. Вид функции эффективных локальных разориентаций отражающей плоскости для единичной винтовой дислокации: (а) проекция на плоскость yz , (б) трёхмерное изображение функции локальных разориентаций. Вектор $\mathbf{H}$ соответствует отражению от плоскости (022) [84].

ционных максимумов и изгиб уже существующих. Понятно, что он связан с дополнительной разностью хода лучей в упругом поле дислокации.

На рисунке 16 показан вид функции локальных разориентаций для винтовой дислокации, изображённой на

рис. 14. Вид поля рассчитывался по формуле

$$\beta_H(y, z) = \frac{\mathbf{Hb}}{2\pi} \frac{y}{y^2 + z^2},$$

где $\mathbf{H}$ — вектор дифракции, $\mathbf{b}$ — вектор Бюргерса.

Описанный выше механизм образования контраста работает только в дальнем поле дислокации, когда искажения кристалла плавно изменяются на расстояниях экстинкционной длины, которая определяется расщеплением дисперсионной поверхности вблизи брэгговского отражения. Волновое поле в этом случае успевает подстроиться под изменения кристаллической решётки, поэтому здесь применимы подходы геометрической оптики.

Если изменения упругого поля дефекта на расстояниях экстинкционной длины являются значительными и локальные разориентации превышают ширину кривой отражения (т.е. $\beta(r) \geq |\chi_{hkl}|$), то волновое поле уже не успевает отслеживать изменения кристаллической решётки, происходит дифракция волн на сильных искажениях кристалла и возникает межветвевое рассеяние. При этом каждая волна будет рождать целое семейство новых блоховских волн, которые интерферируют как между собой, так и с уже существующим волновым полем, что значительно усложняет анализ механизмов рассеяния [85]. Именно в областях вблизи оси дислокации, где функция локальных разориентаций отражающих плоскостей резко меняет знак, образуется прямое (кинематическое) изображение дислокации. С возрастанием величины дифракционной мощности дефекта m происходит увеличение размеров прямого изображения и начинает проявляться его тонкая структура. Это связано с увеличением размеров сильно искажённой области вокруг оси дислокации.

На рисунке 17 показаны три секционные топограммы для больших значений дифракционных мощностей дефекта, на которых наблюдается тонкая структура прямого изображения. Образование столь сложного прямого изображения объясняется взаимодействием сильно искажённой области вблизи оси дислокации (где функция $\beta(r)$ меняет знак) с интерференционными максимумами волнового поля, формируемого в треугольнике рассеяния [85, 86, 89, 90]. В каждой точке, где сильно искажённая область вблизи оси дислокации пересекает

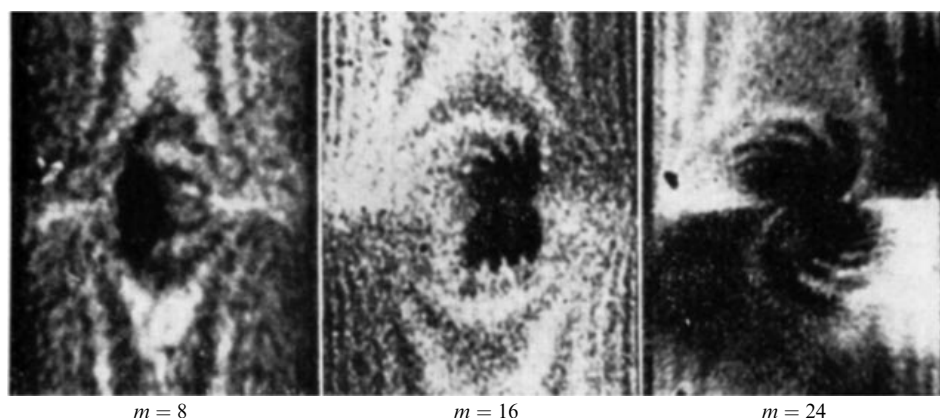


Рис. 17. Экспериментальные секционные топограммы одной и той же винтовой дислокации при значениях дифракционной мощности $m = 8, 16, 24$. Толщина кристалла кремния 410 мкм, отражение (220), излучение $\text{MoK}_{\alpha 1}$ [55].

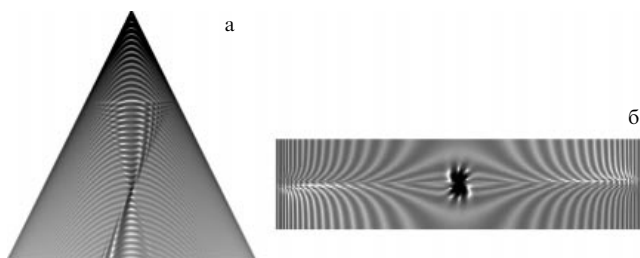


Рис. 18. Полученные в результате численного моделирования (а) сечение волнового поля внутри треугольника рассеяния при $y = 0$ и (б) соответствующая секционная топограмма [85].

интерференционные полосы гиперболической формы, образуются новые волны вследствие межветвевго рассеяния. Эти волны интерферируют с волновым полем, уже существующим в треугольнике рассеяния. В результате формируется сложное прямое изображение дислокации с развитой тонкой структурой.

На рисунке 18 приведены результат численного моделирования волнового поля в одном из сечений треугольника рассеяния ($y = 0$) и соответствующая секционная топограмма. Секционная топограмма состоит из нескольких сотен таких сечений ($-200 \text{ мкм} < y < 200 \text{ мкм}$).

Важно отметить, что вид упругого поля для каждого фрагмента дислокации и её ориентация довольно слабо влияют на характер нового рентгеновского волнового поля. Сильно искажённая область вблизи ядра дислокации при взаимодействии с рентгеновским волновым полем в треугольнике рассеяния играет роль рентгеновского зеркала. Возникает новое волновое поле в новом треугольнике рассеяния, когерентное взаимодействию которого со старым полем и приводит к образованию рентгеновского изображения. В то же время общий вид контраста будет определяться формой и ориентацией линии дислокации, так как каждое вновь образованное волновое поле, которое распространяется из определённой точки треугольника рассеяния, имеет свою определённую начальную фазу. Именно сложение этих волн с учётом их фаз и приводит к такому большому разнообразию изображений дефектов.

Для качественного объяснения наблюдаемых изображений, показанных на рис. 15, 16, ближнее поле дислокации можно приближённо рассматривать, согласно работам [64, 66, 67], как образованное двумя близко расположенными дефектами упаковки. В этом случае вновь образующееся волновое поле под дислокацией будет аналогично полю, возникающему в случае дефекта упаковки [29]. Это означает, что изображение ближнего поля дислокации будет состоять из двух частей: динамической осциллирующей тени, образованной расходящимся конусом лучей под дислокацией, и дифракционной фокусировки лучей нового волнового поля, формируемого сходящимся пучком траекторий [64].

Сказанное выше подтверждается результатами численного моделирования с использованием гипотетической модели дислокации в виде трубки, материал которой вышел из отражающего положения [85]. Рассмотрим геометрию, в которой ось дефекта является параллельной вектору дифракции и лежит на половине толщины кристалла. Анализ результатов моделирования показывает, что и треугольник рассеяния волнового поля, и численная топограмма такой модели практически совпа-

дают с соответствующими изображениями, полученными в случае обычной винтовой дислокации, когда её ось совпадает с направлением вектора дифракции [88]. Прямое изображение трубки-модели в плоскости рассеяния формируется в результате дифракционного взаимодействия новых и старых волновых полей на границе раздела [61–64]. Таким образом, прямое изображение, формируемое в данной геометрии, представляет собой результат суперпозиции всех волновых полей, рождённых в точках поверхности раздела трубки. Похожее явление наблюдается, например, на дефектах упаковки или на двухкристалльном рентгеновском интерферометре. В литературе данный эффект получил название *дифракционной фокусировки рентгеновских лучей* [65, 66]. Именно этот результат мы и фиксируем в виде прямого изображения дефекта на секционной топограмме.

Рассмотренные в этом разделе результаты эксперимента и моделирования показывают, что в формировании изображения дислокации в данном случае принимают участие все точки на оси дислокации или, точнее, все точки сильно искажённой области вблизи ядра дислокации, попадающие внутрь треугольника рассеяния. Каждая такая точка является источником распространения нового волнового поля. Интерференция всех этих полей и формирует изображение дислокации. Самая яркая часть этого изображения — прямое изображение — формируется в области пересечения оси дислокации с направлением падающего пучка (рис. 19).

Известны также случаи, когда на секционном изображении дефекта прямое изображение отсутствует [84, 91, 92]. На рисунке 20 приведён такой пример — изображение макродефекта (размером $\approx 250 \text{ мкм}$) в монокристалле кремния, легированного фосфором до концентрации $7 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Прямого изображения не возникает, так как локальные искажения кристаллической решётки являются малыми и не выходят из области брэгговского отражения. Аналогичные изображения большего размера наблюдались также в работе [96].

5.2.2. Изображения дислокаций в толстом кристалле. Рассмотрим механизмы образования изображения

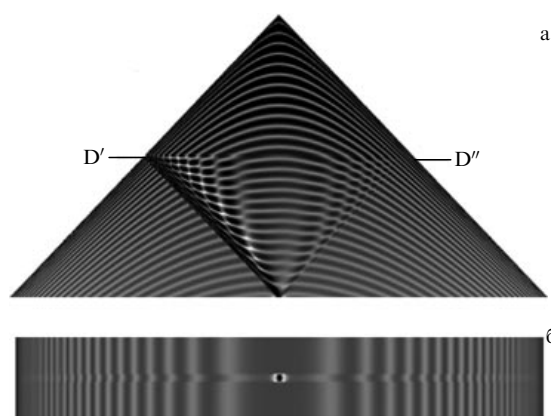


Рис. 19. Результаты численного моделирования треугольника рассеяния (а) и соответствующая секционная топограмма (б). Дефект с осью $D'D''$ в виде тонкой трубки, материал которой вышел из отражающего положения, располагается параллельно вектору дифракции в середине кристалла по толщине в плоскости рассеяния. Толщина кристалла 1000 мкм, в расчётах использовалось отражение от кристаллографических плоскостей (220), излучение $\text{MoK}_{\alpha 1}$ [85].

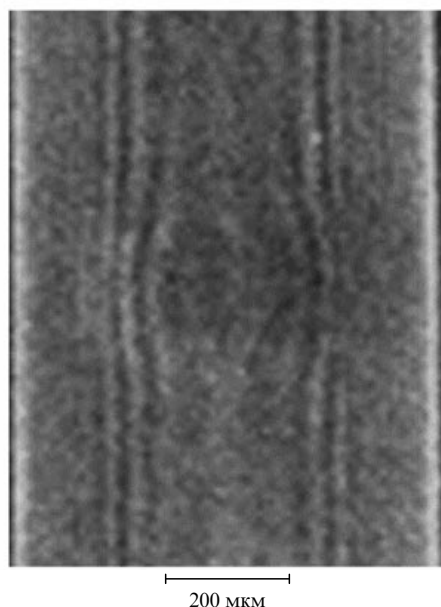


Рис. 20. Фрагмент секционной топограммы кремния с изображением макродефекта. Кремний, легированный фосфором до концентрации $7 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$, в исходном состоянии. Излучение MoK_α , отражение (440) [84].

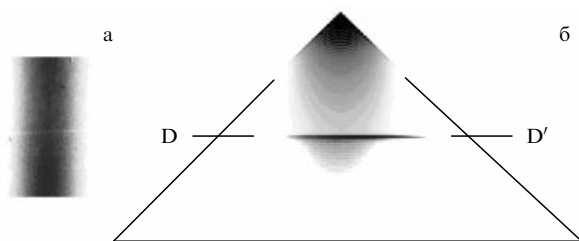


Рис. 21. (а) Экспериментальная секционная топограмма монокристалла кремния с изображением винтовой дислокации. Толщина кристалла 800 мкм, $\mu t \approx 15$, излучение $\text{CuK}_{\alpha 1}$, отражение (220). Ось дислокации расположена вдоль вектора дифракции. (б) Результат численного моделирования распределения волнового поля внутри треугольника рассеяния для случая, представленного на рис. а. Ось дислокации расположена в середине по толщине кристалла [83].

дислокаций в кристалле в случае, когда нормальная волна полностью поглотилась, т.е. $\mu t \gg 1$, и весь контраст формируется только аномальной волной. На рисунке 21а приведена типичная секционная топограмма винтовой дислокации, которая ориентирована вдоль вектора дифракции [78]. На топограмме наблюдается светлая тень под дислокацией. Естественно, интерференционных полос на топограмме нет. Интенсивность в поперечном направлении имеет колоколообразный вид.

Обращает на себя внимание сдвиг полосы светлой тени динамического изображения вверх и вниз по обе стороны изображения. Этот эффект, по-видимому, связан с асимметричным сдвигом траекторий для нормальной и аномальной мод волнового поля по обе стороны дислокации по y -координате, наблюдавшимся ранее в работе [55]. Так как поглощение для нормальной и аномальной мод волнового поля различно, будет наблюдаться асимметрия в распределении суммарного волнового поля в плоскости рассеяния.

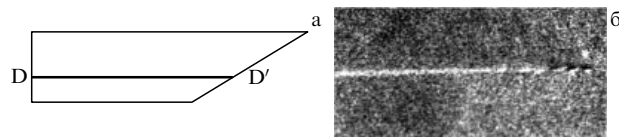


Рис. 22. (а) Схема клиновидного кристалла с дислокацией DD' . (б) Экспериментальная рентгеновская топограмма, полученная по методу Ланга со сканированием [51].

На рисунке 21б показано распределение волнового поля в треугольнике рассеяния для толстого кристалла. Хорошо видно, как экстинкционные осцилляции постепенно затухают по глубине кристалла по мере поглощения нормальной волны. Всё волновое поле стягивается к биссектрисе треугольника Бормана. До оси дислокации доходит только аномальная волна. При взаимодействии этой волны с сильно искажённой областью кристалла вблизи оси дислокации образуется новое волновое поле в результате межветвевое рассеяния. Это волновое поле вновь состоит из нормальной и аномальной волн, и снова возникают экстинкционные осцилляции. По мере прохождения вглубь кристалла нормальная составляющая постепенно поглощается и опять остаётся только аномальная бормановская волна. При этом примерно половина энергии поля в результате межветвевое рассеяния расходуется на образование нормальной волны. Поэтому до выходной поверхности кристалла под дислокацией дойдёт наполовину ослабленная аномальная составляющая, что и обуславливает контраст изображения в виде светлой тени на секционных и развёрнутых топограммах. Этот механизм образования изображения иллюстрируется рис. 22, на котором показана топограмма со сканированием, полученная на клиновидном кристалле кремния. По осцилляциям в тонкой части клина хорошо видно образование новых волн.

Приведённый пример ещё раз подчёркивает, что каждая точка сильно искажённой области вблизи ядра дислокации, попадая в волновое поле, распространяющееся в треугольнике рассеяния, становится источником нового волнового поля, т.е. будет возникать новый треугольник рассеяния.

5.3. Линия дислокации, расположенная в плоскости рассеяния перпендикулярно вектору отражения

5.3.1. Образование изображения дислокаций в тонком кристалле (слабое поглощение). Рассмотрим экспериментальные топограммы и результаты численного моделирования, полученные для тонкого кристалла [93]. Этот случай интересен тем, что здесь линия дислокации пересекает треугольник рассеяния и, следовательно, в каждой точке сильно искажённой области упругого поля дислокации внутри треугольника рассеяния будут возникать новые волновые поля [43, 93–95], взаимодействующие не только между собой, но и с первичным пучком. Так как кристалл является тонким, все образовавшиеся волны доходят до выходной поверхности кристалла.

На рисунке 23 показаны схема эксперимента, две наиболее характерные экспериментальные секционные топограммы, на которых хорошо видны детали дифрак-

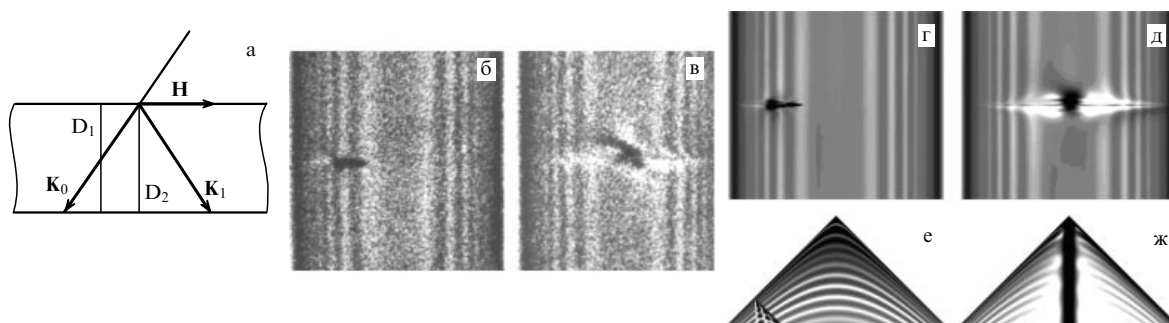


Рис. 23. (а) Схема эксперимента. (б, в) Экспериментальные секционные топограммы. (г, д) Рассчитанные на компьютере секционные топограммы для случаев рис. б и в. (е, ж) Соответствующие волновые поля в треугольнике рассеяния для этих же случаев. Кристалл кремния толщиной 450 мкм, излучение $\text{MoK}_{\alpha 1}$, отражение (220) [94].

ционного изображения дислокации, перпендикулярной входной поверхности кристалла, и соответствующие результаты моделирования. Представленные топограммы получены при двух положениях, D_1 и D_2 , дислокации в треугольнике рассеяния: в первом случае дислокация пересекает направление падающего пучка примерно на половине левой стороны треугольника рассеяния (рис. 23б), а во втором — расположена практически вдоль биссектрисы треугольника рассеяния (рис. 23в).

Обращает на себя внимание (рис. 23б) яркая полоска, перпендикулярно пересекающая интерференционные полосы. Это прямое изображение дислокации, формирующееся в окрестности пересечения сильно искажённой области вблизи оси дислокации с первичным пучком. Изображение неоднородно по длине. По мере перемещения линии дислокации внутрь треугольника рассеяния область прямого изображения перемещается по основанию треугольника рассеяния от левого края (рис. 23а, конец вектора K_0) через середину треугольника рассеяния в его правую часть (к концу вектора K_1). При этом яркость изображения постепенно уменьшается. Когда ось дислокации проходит вдоль вертикальной биссектрисы треугольника рассеяния, возникает яркое изображение точно в середине основания палатки Бормана, особенно хорошо наблюдаемое на рис. 23в. Наряду с этими яркими деталями изображения, на снимках хорошо видны светлые области геометрической тени слева от дислокации. Упругое поле дислокации как будто отбрасывает тень в направлении падающего пучка. Анализ экспериментальных топограмм и рассчитанных сечений волнового поля в плоскости рассеяния показывает, что изображение дислокаций в такой геометрии очень напоминает случай дифракции в ограниченном кристалле [61–64]. На рисунке 23г, д приведены результаты численного моделирования фрагментов секционных топограмм, показанных на рис. 8а, б. Изображения достаточно хорошо соответствуют экспериментально наблюдаемым секционным топограммам.

На рисунке 23е, ж приведены рассчитанные по уравнениям Такаги распределения интенсивности в треугольнике рассеяния для двух положений дислокаций, D_1 и D_2 . На распределениях интенсивности волнового поля в треугольниках рассеяния хорошо видно, как формируется топографическое изображение вследствие отражения волнового поля от сильно искажённой области вблизи оси дислокации, аналогичного отражению от границы раздела в случае ограниченного кристалла. На

рисунке 23ж хорошо видно образование волнового поля в виде осциллирующего жгута в ближнем поле дислокации.

Рассмотрим некоторые особенности наблюдаемых изображений. Изображения, полученные с помощью численного моделирования, более отчётливо, чем экспериментальные изображения, выявляют эффект отражения волнового поля в ближнем поле дислокации. Этот эффект, который проявляется в осциллирующем характере контраста, примыкающего к прямому изображению (рис. 23е), аналогичен эффекту отражения волнового поля от края образца внутрь палатки Бормана [61–64]. По-видимому, область, разделяющая сильно искажённую часть кристалла и область с плавным изменением упругого поля, в данном случае работает как своеобразная поверхность раздела внутри кристалла. Это объясняет аналогию с ограниченным кристаллом.

Второй интересный эффект показан на рис. 23в, д, где видна повышенная концентрация волнового поля вблизи сильно искажённой области дефекта в случае, когда ось дислокации совпадает с биссектрисой треугольника рассеяния. Этот эффект, по-видимому, аналогичен наблюдаемому нами ранее интерференционному эффекту фокусировки волнового поля в кристаллах с ультразвуковым полем [95]. Похожее явление описано также в работах В.И. Инденбома с соавторами для случая рассеяния рентгеновских лучей на дефектах упаковки, где фаза рассеянных волн изменяется на π [67, 68]. Однако экспериментально этот эффект наблюдался только для случая дефектов упаковки [69].

По-видимому, зарегистрированный в работе [94] дифракционный эффект, концентрирующий волновое поле в сильно искажённой области в ближнем поле дислокации, связан с эффектом каналирования волнового поля. Последний качественно можно описать, если представить сильно искажённую область кристалла вблизи оси дислокации как вышедшую из отражения часть кристалла. Тогда части стенок такой трубки, располагающиеся в плоскости рассеяния, должны работать благодаря многократным отражениям как бесщелевой коллиматор, предложенный ещё в 1960-х годах в работах [96–98].

В наиболее "чистом" виде эффект каналирования описан в работе [85] при численном моделировании дифракции на кристалле, внутри которого перпендикулярно поверхности располагается тонкая трубка $D'D''$, материал которой вышел из отражающего положения.

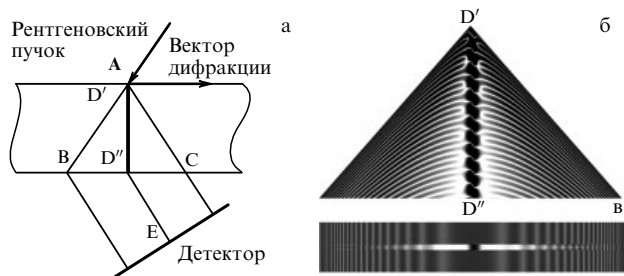
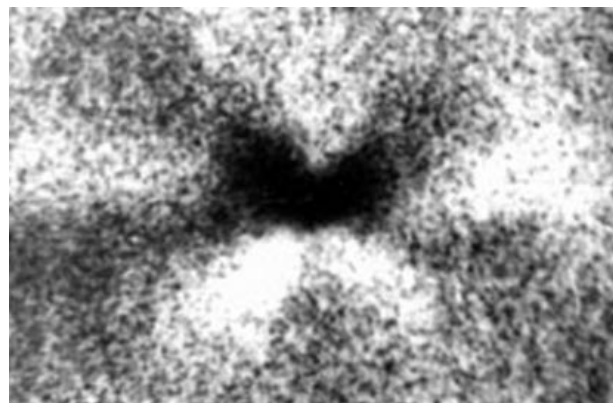
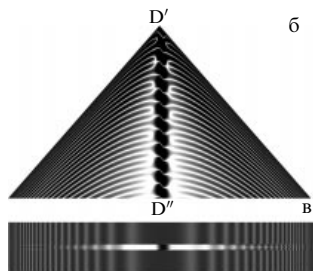


Рис. 24. (а) Схема дифракции. Образец содержит участок в виде тонкой трубки $D'D''$, материал которой вышел из отражающего положения. (б) Распределение волнового поля в плоскости рассеяния, полученное в результате численного моделирования, и (в) соответствующая секционная топограмма [85].



Результаты этого численного эксперимента представлены на рис. 24.

5.3.2. Образование изображения дислокаций в толстом кристалле (сильное поглощение). Рентгеновские изображения краевых дислокаций, перпендикулярных поверхности, в монокристаллах кремния были исследованы в работах [99–101]. Характерная топограмма с изображением 60° -ной дислокации приведена на рис. 25.

Топограмма получена по схеме Бормана в широком пучке. Сопоставление экспериментально наблюдаемого изображения с розеткой эффективных разориентаций для краевой дислокации (см. рис. 25) показывает, что в общих чертах они совпадают. Однако имеются некоторые различия. На экспериментальном изображении наблюдается целый ряд деталей, которые отсутствуют на розетке эффективных разориентаций. Во-первых, на экспериментальной топограмме наблюдаются горизонтальные чёрно-белые лепестки вдоль горизонтальной осевой линии справа и слева. Во-вторых, вдоль вертикальной средней линии изображения хорошо видны два лепестка: в верхней части — светлый, а в нижней — тёмный. На карте функции локальных разориентаций такие детали отсутствуют (см. ниже рис. 27).

Поэтому были проведены исследования изображения краевых дислокаций методами секционной топографии

Рис. 25. Изображение краевой дислокации, перпендикулярной поверхности образца. Ось дислокации параллельна направлению $[110]$. Отражение (220) . Излучение $\text{CuK}_{\alpha 1}$, $\mu t = 20$ [101].

[93–95]. На рисунке 26 представлены секционные изображения краевых дислокаций, перпендикулярных поверхности кристаллов кремния, для двух ориентаций расположения дислокации в кристалле: 1) вектор обратной решётки параллелен вектору Бюргерса, отражение $\text{Si}(220)$; 2) вектор обратной решётки перпендикулярен вектору Бюргерса, отражение $\text{Si}(004)$, а также соответствующие расчётные топограммы для трёх положений дислокации в треугольнике рассеяния.

Для указанных двух ориентаций получены наборы секционных топограмм с дислокациями, расположенными в разных участках треугольника рассеяния: для излучения $\text{CuK}_{\alpha 1}$. Приведённые топограммы получены на одном образце толщиной $t = 1810$ мкм для одной и той же дислокации [102, 103].

Наиболее интересной с точки зрения разнообразия дифракционных эффектов оказалась указанная выше ориентация 1. Поэтому мы рассмотрим именно этот случай.

Сопоставление экспериментальных и рассчитанных секционных топограмм показывает очень хорошее согласие, что свидетельствует о достаточно точном описании

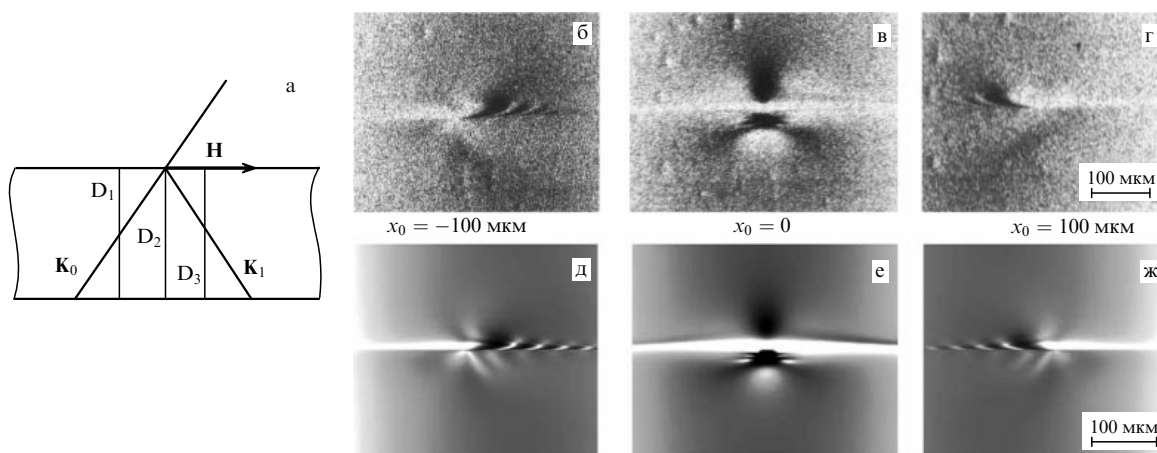


Рис. 26. (а) Рентгеновская схема получения секционных топограмм. (б–г) Экспериментальные секционные топограммы, полученные для трёх положений дислокации, D_1 , D_2 , D_3 , в треугольнике рассеяния. (д–ж) Смоделированные с помощью уравнений Такаги секционные топограммы, соответствующие эксперименту. x_0 — положение дислокации в основании треугольника рассеяния. Материал Si , отражение (220) , излучение $\text{CuK}_{\alpha 1}$ [102].

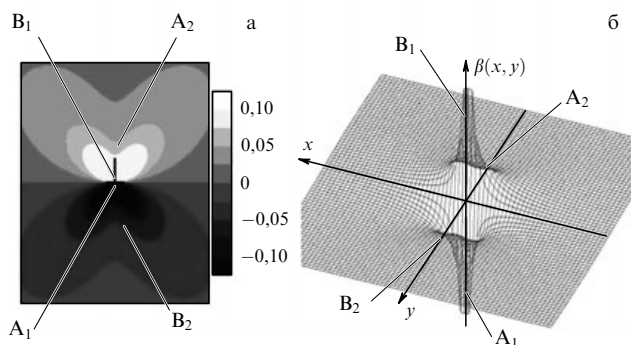


Рис. 27. (В цвете онлайн.) Изображение функции локальных разориентаций $\beta(x, y)$ для краевой дислокации для отражающих плоскостей (220): (а) проекция функции разориентации на плоскость xy , (б) трёхмерное изображение функции $\beta(x, y)$. Точками A_1, A_2, B_1, B_2 обозначены области с различными знаками кривизны $\beta(x, y)$ [102].

дифракционной задачи с помощью уравнений Такаги – Топена. Анализ приведённых изображений приводит к интересным выводам.

На рисунке 27 показана функция эффективных разориентаций, рассчитанная для краевой дислокации при отражении (220). Вид функции локальных разориентаций показывает, что она имеет две плоскости симметрии βx и βy . В то же время экспериментальное и расчётное изображения краевой дислокации имеют только одну плоскость симметрии — xz . Конечно, плоскость βx — инверсионная плоскость отражения, но это не может нарушить симметрию изображения. Для того чтобы понять, почему это происходит, необходимо вспомнить некоторые выводы геометрической оптики.

На рисунке 28 представлены рассчитанные на компьютере распределения волновых полей в сечениях, параллельных плоскости рассеяния, вблизи сильно искажённой области дислокации. Сечения рассчитаны для значений $y = \pm 5$ мкм и $y = \pm 105,0$ мкм. Ось дислокации при этом проходит через биссектрису треугольника рассеяния с координатами (0,0). Из рисунка видно, что на поверхности функции локальных разориентаций имеются обла-

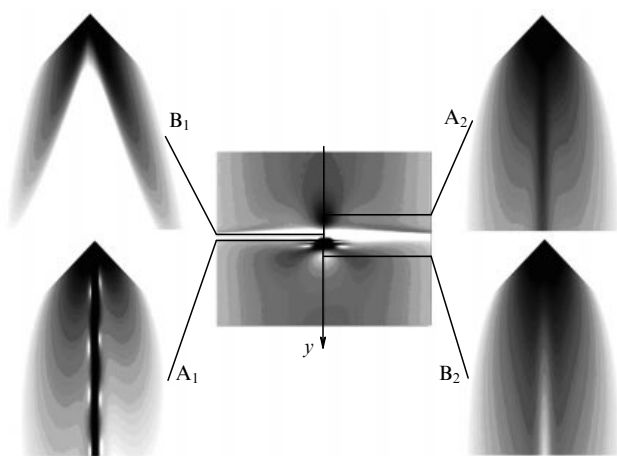


Рис. 28. Результаты численного моделирования секционной топограммы с изображением краевой дислокации, расположенной в середине треугольника рассеяния вдоль его биссектрисы, и четыре сечения (A_1, A_2, B_1, B_2) волнового поля в треугольнике рассеяния на разных расстояниях y от оси дислокации: A_1 — $y = 5$ мкм, A_2 — $y = -105$ мкм, B_1 — $y = -5$ мкм, B_2 — $y = 105$ мкм [103].

сти с разными знаками кривизны функции. Например, в областях A_1 и A_2 фокусируются аномально проходящие волны и, соответственно, происходит расфокусировка нормальных волн. Поэтому в этих областях регистрируются тёмные пятна. С другой стороны, в областях B_1 и B_2 фокусируются нормальные волны и имеет место расфокусировка аномально проходящих волн. Естественно, в этих областях наблюдаются светлые пятна. Таким образом, становится понятным происхождение несоответствия между видом поля локальных разориентаций и изображением дислокации в секционной топографии.

Следует подчеркнуть, что полученные секционные изображения дислокаций не передают вид розетки эффективных угловых разориентаций. В то же время в методах развёрнутых топограмм (топограммы, полученные со сканированием), методах аномального прохождения рентгеновского излучения, а также в электронной микроскопии изображение дислокаций практически соответствует розетке эффективных угловых разориентаций [70, 99–101]. Последнее обстоятельство связано, в первую очередь, с тем, что каждая точка дефекта всегда изображается полоской, длина которой определяется толщиной кристалла и углом дифракции, и при усреднении тонкие детали контраста, которые видны на рис. 28, сглаживаются.

6. Заключение

Итак, каждую точку сильно искажённой области упругого поля вблизи ядра дислокации можно представить как источник нового волнового поля, распространяющегося под дислокацией в новом треугольнике рассеяния, аналогично тому, как происходит рассеяние на границе раздела (эффект Бормана – Лемана) [61–64]. Это "новое поле" когерентно с первичным полем, так как порождено им за счёт межветвевое рассеяния и, следовательно, интерferирует с первичным волновым полем, образуя наблюдаемое дифракционное изображение дислокации.

На основе анализа экспериментальных секционных топограмм и изображений, полученных в результате компьютерного моделирования, можно сделать главный вывод: структура изображения дислокации кардинально зависит от её положения в треугольнике рассеяния. Это связано со структурой волнового поля проходящей и дифрагированной волн в треугольнике рассеяния [40, 65].

Сравнение разных ориентаций дислокации в треугольнике Бормана позволяет оценить роль различных эффектов, определяемых интерференцией исходного и вновь образованного в сильно искажённой области кристалла волновых полей. Анализ явлений, описанных в настоящей статье, позволяет определять параметры дислокации [57, 56] и оптимизировать дифракционные условия топографической съёмки для исследования характеристик упругого поля.

Прямое, или кинематическое, изображение дислокации присутствует на секционных топограммах только в случае, когда сильно искажённая область вблизи ядра дислокации пересекает падающий первичный пучок. В этом случае из области пересечения падающего пучка с осью дислокации возникает яркий прожектор в направлении дифрагированного пучка. Это и есть прямое изображение дислокации. Его положение на секционной

топограмме позволяет достаточно точно определить глубину залегания дислокации под поверхностью кристалла. Следует подчеркнуть, что прямое изображение возникает только тогда, когда величина разориентации превышает область дифракционного отражения [91, 92].

По мере удаления оси дислокации от первичного пучка яркость этого прожектора заметно убывает, монолитный пучок разбивается на множество интерференционных лучей и вблизи него со стороны первичного пучка возникает светлая тень, связанная с перераспределением волнового поля внутри треугольника рассеяния. Именно этот контраст, по терминологии А. Отье, получил название динамического изображения.

Список литературы

- Berg W *Naturwissenschaften* **19** 391 (1931)
- Berg W Z. *Kristallogr.* **89** 286 (1934)
- Barrett C S *Trans. AIME* **161** 15 (1945)
- Schulz L G *Trans. AIME* **200** 1082 (1954)
- Fujiwara T *Memo. Defense Acad.* **2** (5) 127 (1963)
- Fujiwara T, Dohi S, Takeda T *Memo. Defense Acad.* **3** (2) 17 (1963)
- Turner A P, Vreeland T (Jnr.), Pope D P *Acta Cryst. A* **24** 452 (1968)
- Bonse U Z. *Phys.* **153** 278 (1958)
- Kohra K J. *Phys. Soc. Jpn.* **17** 589 (1962)
- Kohra K, Kikuta S *Acta Cryst. A* **24** 200 (1968)
- Lang A R *Acta Cryst.* **12** 249 (1959)
- Authier A *Adv. X-Ray Analysts* **10** 9 (1967)
- Darwin C G *Phil. Mag.* **27** 315 (1914)
- Ewald P P *Ann. Physik* **49** 117 (1916)
- v. Laue M *Ergebnexant Naturwiss* **10** 133 (1931)
- Cowley J M *Diffraction Physics* (Amsterdam: North-Holland, 1975); Каули Дж М *Физика дифракции* (М.: Мир, 1979)
- James R W *The Crystalline State* (Eds Sir W H Bragg, W L Bragg) Vol. 2 *The Optical Principles of the Diffraction of X-Rays* (London: G. Bell and Sons, 1948); Джеймс Р *Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей* (М.: ИЛ, 1950)
- Takagi S J. *Phys. Soc. Jpn.* **13** 278 (1958)
- Penning P, Polder D *Philos. Res. Rep.* **16** (4) 499 (1961)
- Penning P, Polder D *Philos. Res. Rep.* **16** (5) 419 (1961)
- Kato N *Acta Cryst.* **16** 276 (1963)
- Kato N *Acta Cryst.* **16** 282 (1963)
- Kato N J. *Phys. Soc. Jpn.* **18** 1785 (1963)
- Kato N J *Phys. Soc. Jpn.* **19** 67 (1964)
- Kato N J. *Phys. Soc. Jpn.* **19** 971 (1964)
- Patel J R, Kato N *Appl. Phys. Lett.* **13** 40 (1968)
- Kato N, Patel J R J. *Appl. Phys.* **44** 965 (1973)
- Patel J R, Kato N J. *Appl. Phys.* **44** 971 (1973)
- Ando Y, Patel J R, Kato N J. *Appl. Phys.* **44** 4405 (1973)
- Dederichs P H *Phys. Status Solidi B* **23** 377 (1967)
- Dederichs P H *Phys. Rev. B* **1** 1306 (1970)
- Кривоглаз М А *Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами* (М.: Наука, 1967); Krivoglaз M A *Theory of X-ray and Thermal-Neutron Scattering by Real Crystals* (New York: Plenum Press, 1969)
- Кривоглаз М А *Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах* (Киев: Наукова думка, 1983); Krivoglaз M A *X-ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin: Springer, 1996)
- Takagi S *Acta Cryst.* **15** 1311 (1962)
- Takagi S J. *Phys. Soc. Jpn.* **27** 1239 (1969)
- Taupen D *Bull. Soc. Franc. Mineral. Cryst.* **87** 469 (1964)
- Taupen D *Acta Cryst.* **23** 25 (1967)
- Tanner B K, Phil M A *X-Ray Diffraction Topography* (New York: Pergamon Press, 1966)
- Bowen D K, Tanner B K *High Resolution X-Ray Diffractometry and Topography* (New York: Taylor and Francis 1998); Боуэн Д К, Таннер Б К *Высокоразрешающая рентгеновская дифрактометрия и топография* (СПб.: Наука, 2002)
- Authier A *Dynamical Theory of X-Ray Diffraction* (Oxford: Science Publ., 2001)
- Елистратов А М, в сб. *Прямые методы исследования дефектов в кристаллах* (Под ред. А М Елистратова) (М.: Мир, 1965) с. 268
- Hirsch P B et al. *Electron Microscopy of Thin Crystals* (London: Butterworths, 1965); Хирш П и др. *Электронная микроскопия тонких кристаллов* (М.: Мир, 1968)
- Инденбом В Л, Чуховский Ф Н *УФН* **107** 229 (1972); Indenbom V L, Chukhovskii F N *Sov. Phys. Usp.* **15** 298 (1972)
- Инденбом В Л, Чуховский Ф Н *Кристаллография* **16** 1101 (1971); Indenbom V L, Chukhovskii F N *Sov. Phys. Crystallogr.* **16** 972 (1971)
- Кон В Г *Кристаллография* **52** 625 (2007); Kohn V G *Crystallogr. Rep.* **52** 598 (2007)
- Amelinckx S *The Direct Observation of Dislocations* (New York: Academic Press, 1964); Амелинкс С *Методы прямого наблюдения дислокаций* (М.: Мир, 1968)
- Borrmann G Z. *Phys.* **42** 157 (1941)
- Borrmann G Z. *Phys.* **127** 297 (1950)
- Иверонова В И, Ревкевич Г П *Теория рассеяния рентгеновских лучей* (М.: Изд-во МГУ, 1978)
- Пинскер З Г *Рентгеновская кристаллооптика* (М.: Наука, 1982); Pinsker Z G *Dynamical Scattering of X-Rays in Crystals* (New York: Springer, 1978)
- Суворов Э В, Смирнова И А *ФТТ* **52** 241 (2010); Suvorov E V, Smirnova I A *Phys. Solid State* **52** 258 (2010)
- Шульпина И Л, Петрашень П В, Осмакова О Ю, в сб. *Динамические эффекты рассеяния рентгеновских лучей и электронов, 4-е совещание, Ленинград, 31 марта–2 апреля 1976, Тезисы докладов* (Л.: ЛИЯФ, 1976) с. 50
- Petrashen P V, Shulpina I L *Phys. Status Solidi A* **78** K105 (1983)
- Данильчук Л Н, Никитенко В И *ФТТ* **9** 2027 (1967)
- Suvorov E V et al. *Phys. Status Solidi A* **26** 385 (1974)
- Indenbom V L, Nikitenko V I, Suvorov E V, Kaganer V M *Phys. Status Solidi A* **46** 379 (1978)
- Suvorov E V et al. *Phys. Status Solidi A* **54** 29 (1979)
- Kato N *Acta Cryst.* **14** 526 (1961)
- Aristov V V et al. *Phys. Status Solidi A* **72** 483 (1982)
- Суворов Э В, Половинкина В И, Никитенко В И *ФТТ* **13** 2692 (1971); Suvorov E V, Polovinkina V I, Nikitenko V I *Sov. Phys. Solid State* **13** 2253 (1972)
- Borrmann G, Lehmann K *Crystallography and Crystal Perfection* (Ed. G N Ramachandran) (London: Academic Press, 1963) p. 101
- Lehmann K, Borrmann G Z. *Kristallogr.* **125** 234 (1967)
- Шулаков Е В, Смирнова И А, Суворов Э В *Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед.* (7) 32 (1996)
- Шулаков Е В, Смирнова И А, Суворов Э В *Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед.* (1) 101 (2002)
- Инденбом В Л, Слободетский И Ш, Труни К Г *ЖЭТФ* **66** 1110 (1974); Indenbom V L, Slobodetskii I Sh, Truni K G *Sov. Phys. JETP* **39** 542 (1974)
- Суворов Э В, Половинкина В И *Письма в ЖЭТФ* **20** 326 (1974); Suvorov E V, Polovinkina V I *JETP Lett.* **20** 145 (1974)
- Инденбом В Л, Чуховский Ф Н *Кристаллография* **19** 35 (1974)
- Инденбом В Л, Слободетский И Ш *Кристаллография* **19** 42 (1974)
- Суворов Э В, Мухин К Ю, в сб. *Динамические эффекты рассеяния рентгеновских лучей и электронов, 4-е совещание, Ленинград, 31 марта–2 апреля 1976, Тезисы докладов* (Л.: ЛИЯФ, 1976) с. 42
- Hirth J P, Lothe J *Theory of Dislocations* (New York: McGraw-Hill, 1968); Хирт Дж, Лоте И *Теория дислокаций* (М.: Атомиздат, 1972)
- de Wit R *Phys. Status Solidi B* **20** 567 (1967)
- Brümmer O, Stephanik H *Dynamische Interferenztheorie. Grundlagen und Anwendungen bei Röntgenstrahlung, Elektronen und Neutronen* (Leipzig: Akademische Verlagsgesellschaft Geest und Portig K.-G., 1976)
- Epelboin Y, Riglet P *Phys. Status Solidi A* **54** 547 (1979)
- Chukhovskii F N, Shtolberg A A *Phys. Status Solidi B* **41** 815 (1970)
- Authier A *Bull. Soc. Franc. Mineral. Cristallogr.* **84** 51 (1961)
- Balibar F, Authier A *Phys. Status Solidi B* **21** 413 (1967)
- Indenbom V L, Nikitenko V I, Suvorov E V, Kaganer V M *Phys. Status Solidi A* **46** 379 (1978)
- Suvorov E V et al. *Phys. Status Solidi A* **60** 27 (1980)

79. Indenbom V L, Kaganer V M, Möhling W, Suvorov E V *Phys. Status Solidi A* **83** 195 (1984)
80. Суворов Э В, Смирнова И А, Шулаков Е В *Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед.* (4) 100 (2004)
81. Шульпина И Л, Даценко Л И *Укр. физ. журн.* **12** 1474 (1967)
82. Ерофеев В Н, Никитенко В И, Половинкина В И, Суворов Э В *Кристаллография* **16** 190 (1971); Erofeev V N, Nikitenko V I, Polovinkina V I, Suvorov E V *Sov. Phys. Crystallogr.* **16** 151 (1971)
83. Суворов Э В, Шульпина И Л *Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед.* (7) 3 (2001)
84. Шульпина И Л, Суворов Э В *Изв. РАН Сер. физ.* **74** 1547 (2010); Shulpina I L, Suvorov E V *Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.* **74** 1488 (2010)
85. Суворов Э В, Смирнова И А *ФТТ* **52** 2325 (2010); Suvorov E V, Smirnova I A *Phys. Solid State* **52** 2485 (2010)
86. Инденбом В Л, Каганер В М, Суворов Э В *ЖЭТФ* **86** 675 (1984); Indenbom V L, Kaganer V M, Suvorov E V *Sov. Phys. JETP* **59** 394 (1984)
87. Смирнова И А, Суворов Э В, Шулаков Е В *Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед.* (12) 1 (2006)
88. Суворов Э В, Смирнова И А, Шулаков Е В *Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед.* (9) 1 (2007)
89. Суворов Э В, Смирнова И А *Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед.* (12) 1 (2011)
90. Суворов Э В, Смирнова И А *Письма ЖТФ* **38** (21) 70 (2012); Suvorov E V, Smirnova I A *Tech. Phys. Lett.* **38** 991 (2012)
91. Кютт Р Н, Рувимов С С, Шульпина И Л *Письма в ЖТФ* **32** (24) 79 (2006); Kyutt R N, Ruvimov S S, Shulpina I L *Tech. Phys. Lett.* **32** 1079 (2006)
92. Мильвидский М Г и др. *Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед.* (4) 5 (2001)
93. Суворов Э В, Смирнова И А, Шулаков Е В *Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед.* (11) 74 (2004)
94. Суворов Э В, Смирнова И А, Шулаков Е В *Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед.* (12) 12 (2005)
95. Смирнова И А, Суворов Э В, Шулаков Е В, Алежко-Ожевский О П *Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед.* (1) 99 (2000)
96. Bonse U, Hart M *Appl. Phys. Lett.* **6** 155 (1965)
97. Bonse U, Hart M *Appl. Phys. Lett.* **7** 99 (1965)
98. Hart M *Proc. R. Soc. London A* **309** 281 (1969)
99. Данильчук Л Н, Смородина Т А *ФТТ* **7** 1245 (1965)
100. Данильчук Л Н, Георгиев А И *Кристаллография* **11** 2349 (1966)
101. Данильчук Л Н, Никитенко В И *ФТТ* **9** 2027 (1967)
102. Смирнова И А, Суворов Э В, Шулаков Е В *ФТТ* **49** 1050 (2007); Smirnova I A, Suvorov E V, Shulakov E V *Phys. Solid State* **49** 1104 (2007)
103. Суворов Э В, Смирнова И А *Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед.* (10) 7 (2008)

X-ray diffraction imaging of defects in topography (microscopy) studies

E.V. Suvorov, I.A. Smirnova

Institute of Solid State Physics, Russian Academy of Sciences,

ul. Akademika Ossipyan 2, 142432 Chernogolovka, Moscow region, Russian Federation

E-mail: suvorov@issp.ac.ru, irina@issp.ac.ru

This review examines how the X-ray diffraction images of crystal lattice defects form and acquire structure when using X-ray topography methods. The description approaches (beam optics and wave optics) and application fields of the geometrical and diffraction optics of a real crystal are analyzed. Specific experimental images of dislocations and other defects are used as examples to demonstrate the role of various diffraction effects (wave reflection from lattice distortions, diffraction focusing, channeling) in determining the nature of the image formed. The potential for obtaining quantitative information on defect parameters is discussed.

Keywords: crystal structure defects, X-ray diffraction physics, X-ray topography, X-ray optics, diffraction contrast of defects, diffraction image, section topograms, Bloch waves, beam paths, elastic dislocation field, Takagi–Topen equations, diffraction image simulation

PACS numbers: 61.05.C–, 61.72.Dd, 61.72.Ff

DOI: 10.3367/UFNr.0185.201509a.0897

Bibliography — 103 references

Received 5 May 2015

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **185** (9) 897–915 (2015)

Physics–Uspekhi **58** (9) (2015)