Письма в ЖЭТФ, том 107, вып. 10, с. 689 – 692

Теория диффузного рассеяния рентгеновских лучей поверхностными блистерами

В. И. Пунегов[1)]

Физико-математический институт Коми научного центра Уральского отделения РАН, 167982, Сыктывкар, Россия

Поступила в редакцию 27 марта 2018 г.

Разработана теория диффузного рассеяния рентгеновских лучей на новом типе дефектов – хаотически распределенных поверхностных блистерах. Получено выражение для амплитуды диффузного рассеяния от поверхностных блистеров в рамках модели усеченного шарового слоя. Проведено численное моделирование карт распределения интенсивности рассеяния от поверхностных блистеров. Показано влияние упругого изгиба отражающих плоскостей решетки поверхностных блистеров на угловое распределение интенсивности рассеяния в обратном пространстве.

DOI: 10.7868/S0370274X18100132

Введение. Исследования углового распределения диффузного рассеяния (ДР) рентгеновских лучей вблизи узла обратной решетки позволяет получать информацию о кристаллических дефектах [1, 2], наноструктурах [3, 4], пористых кристаллах [5], а также элементах рентгеновской оптики [6]. В ряде случаев анализ диффузного рассеяния бывает весьма сложным из-за одновременного возникновения разных дефектов, например, в результате ионной имплантации [7] или лазерного воздействия на поверхность кристалла [8].

Известно, что в результате ионной имплантации помимо деформаций кристаллической решетки возникают разного типа дефекты в приповерхностном слое материала, такие как вакансии, скопления газовых пузырей, дислокационные петли, тромбоциты и т.д. Хаотически распределенные блистеры (волдыри) также представляют определенный тип дефектов. Впервые образование блистеров и участков отслоения при облучении легкими ионами наблюдалось на поверхности изоляторов [9], оксидов и металлов [10]. Исследования блистеринга полупроводниковых материалов [11, 12], прежде всего, связано с процессом создания отслаивающихся тонких слоев с целью переноса их на другую подложку [13]. Возникновение блистеров зависит от многих параметров, таких как свойства полупроводникового материала, дозы и энергии ионов, а также температуры имплантации [11, 12].

Отметим, что теория диффузного рассеяния поверхностными блистерами до сих пор не разработана. А это затрудняет характеризацию нарушенных в результате ионной имплантации приповерхностных слоев с использованием анализа ДР [7]. Поэтому цель данной работы состоит в рассмотрении диффузного рассеяния поверхностными блистерами на основе модели усеченного шарового слоя.

Диффузное рассеяние. Рассмотрим диффузное рассеяние рентгеновских лучей от хаотически распределенных блистеров, возникших на поверхности кристалла, например, в результате ионной имплантации (рис. 1). Распределение интенсивности рентгеновского диффузного рассеяния вблизи узла обратной решетки может быть представлено как [2]

$$I_h^d(\mathbf{q}) = K_D \tau(\mathbf{q}), \tag{1}$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{Q} - \mathbf{h}$ – отклонение вектора дифракции $\mathbf{Q} = \mathbf{k_h} - \mathbf{k}_0$ от узла обратной решетки $\mathbf{h}$, $\mathbf{k}_{0,\mathbf{h}}$ – волновые векторы падающего и отраженного рентгеновского пучка, K_D – постоянный коэффициент,

$$\tau(\mathbf{q}) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\boldsymbol{\rho} \exp(i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}) g(\boldsymbol{\rho}) \tag{2}$$

– корреляционный объем, $g(\boldsymbol{\rho})$ – корреляционная функция [2]. Корреляционный объем (2) можно записать в виде $\tau(\mathbf{q}) = |D(\mathbf{q})|^2$, где

$$D(\mathbf{q}) = \int D(\mathbf{r}) \exp(i[\mathbf{qr} + \mathbf{hu}(\mathbf{r})]) d\mathbf{r}, \tag{3}$$

– амплитуда диффузного рассеяния, $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ – поле атомных смещений из-за упругих деформаций решетки,

$$D(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{r} \in V_B, \\ 0, & \mathbf{r} \notin V_B \end{cases}$$

– функция формы и V_B – объем блистера.

[1)]e-mail: vpunegov@dm.komisc.ru

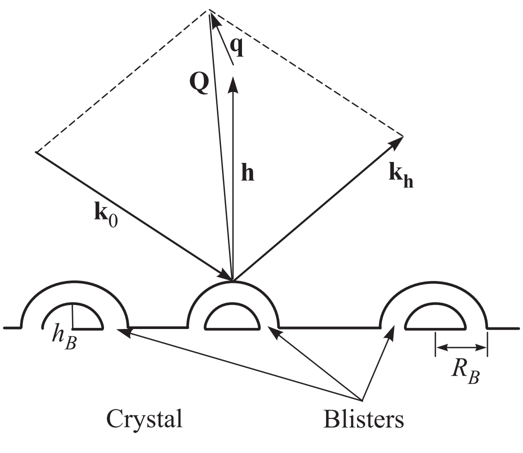

Рис. 1. Схематическое изображение диффузного рассеяния от кристалла с поверхностными блистерами. h_B – высота микрополости блистера, R_B – радиус блистера

Поскольку размеры блистеров меняются в широких пределах, от 2 мкм [10] до 30 мкм [11], то такие образования следует относить к крупномасштабным дефектам. Кроме того, внутри объема блистера кристаллическая структура может быть нарушена мелкомасштабными дефектами (водородные пузыри, дислокационные петли и т.д.), а также упругими деформациями решетки. Мелкомасштабные дефекты приводят к уменьшению отражательной способности блистера, а также появлению протяженного (вторичного) диффузного рассеяния. Упругие деформации решетки вызывают изменение углового распределения диффузного рассеяния [14]. Далее мы не будем учитывать диффузное рассеяние мелкомасштабными дефектами, отражательную способность кристаллической структуры блистера будем считать постоянной величиной.

Модель поверхностного блистера. За основу возьмем модель блистера в форме усеченного шарового слоя (рис. 2). Основание блистера лежит в плоскости $x0y$, ось z направлена вверх. Усеченный шаровой слой формируется усеченными сферами с радиусами R_1 и R_2. Высоты усеченных сфер обозначим h_1 и h_2 соответственно. Объем блистера равен $V_B = V_1 - V_2$, где для $j = 1, 2$, $V_j = \pi h_j^2 (3R_j - h_j)/3$ – объем усеченной сферы с номером j. Радиус блистера оценивается формулой $R_B = \sqrt{R_1^2 - (R_1 - h_1)^2}$. Высота полости под блистером $h_B = h_2$, толщина блистера $t_B = h_1 - h_2$.

Предположим, что в объеме блистера отражающие решеточные плоскости имеют упругий изгиб, поле атомных смещений для наиболее простой модели запишется как

$$u(\mathbf{r}) = u(x, y) = \frac{x^2 + y^2}{2R_b},$$

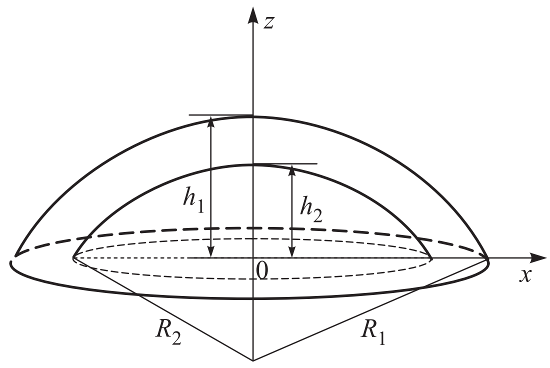

Рис. 2. Модель поверхностного блистера в виде усеченного шарового слоя

где R_b – радиус изгиба отражающих плоскостей.

Амплитуда диффузного рассеяния от поверхностных блистеров запишется в виде

$$D(\mathbf{q}) = \Phi(\mathbf{q}; h_1, R_1) - \Phi(\mathbf{q}; h_2, R_2), \tag{4}$$

где для $j = 1, 2$

$$\Phi(\mathbf{q}; h_j, R_j) =$$

$$= 2\pi \int\limits_{-(R_j - h_j)}^{h_j} dz \exp(iq_z[z + R_j - h_j])\Omega(q_0, R_z^{(j)}). \tag{5}$$

Здесь функция под интегралом в (5) равна

$$\Omega(q_0, R_z^{(j)}) = -(1/2)\exp(ibR_z^{(j)^2}/2) \times$$

$$\times \left[U_1\left(\frac{q_0^2}{2b}, q_0 R_z^{(j)}\right) + iU_0\left(\frac{q_0^2}{2b}, q_0 R_z^{(j)}\right)\right] \frac{\sin(bR_z^{(j)^2}/2)}{(bR_z^{(j)^2}/2)}, \tag{6}$$

где $U_n(z, \zeta) = \sum\limits_{k=0}^{\infty} (-1)^k \left(\frac{z}{\zeta}\right)^{2k+n} J_{2k+n}(\zeta)$ – функция Ломмеля двух переменных [15], в нашем случае n принимает значения 0 и 1, $J_{2k+n}(\zeta)$ – функция Бесселя $2k + n$ порядка, $b = \frac{h}{2R_b}$, h – величина вектора обратной решетки, $q_0 = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$, $R_z^{(j)} = \sqrt{R_j^2 - z^2}$. В интегральном виде функции Ломмеля двух переменных в (6) могут быть представлены через функции Бесселя первого порядка $J_1(q_0 R_z^{(j)} t)$ как

$$U_0\left(\frac{q_0^2}{2b}, q_0 R_z^{(j)}\right) =$$

$$= -q_0 R_z^{(j)} \int\limits_0^1 J_1(q_0 R_z^{(j)} t) \cos\left(\frac{q_0^2}{2b}[1 - t^2]/2\right) dt,$$

$$U_1\left(\frac{q_0^2}{2b}, q_0 R_z^{(j)}\right) =$$

$$= -q_0 R_z^{(j)} \int\limits_0^1 J_1(q_0 R_z^{(j)} t) \sin\left(\frac{q_0^2}{2b}[1 - t^2]/2\right) dt.$$

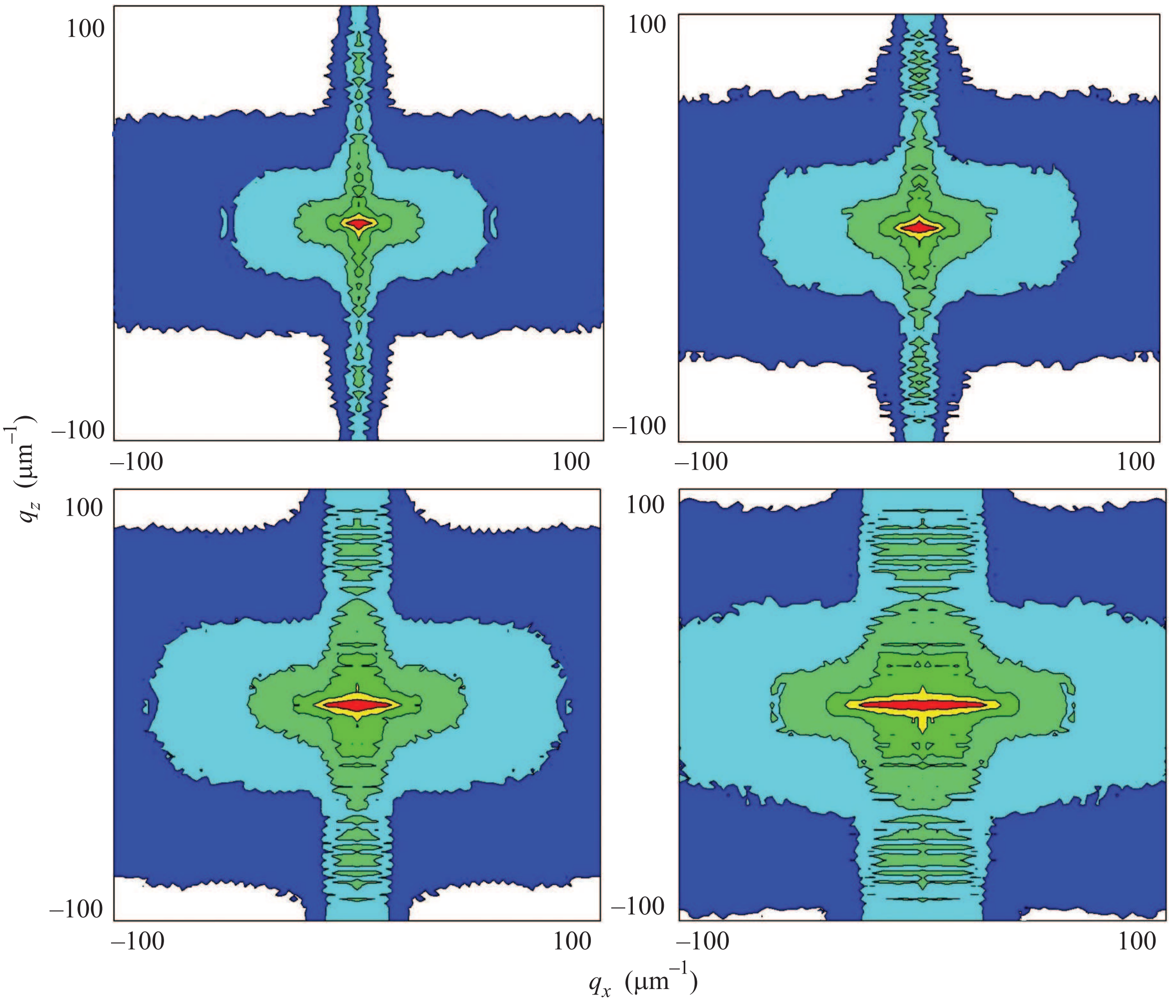

Рис. 3. (Цветной онлайн) RSM диффузного рассеяния от хаотически распределенных блистеров радиуса $R_B = 3$ мкм, толщиной $t_B = 1$ мкм, высотой микрополости $h_B = 0.5$ мкм. Радиус изгиба плоскостей R_b: 0.03 м (a); 0.02 м (b); 0.01 (c); 0.005 м (d)

В отсутствие упругого изгиба отражающих решеточных плоскостей ($R_b \to \infty$) соотношение (5) трансформируется к более простому виду

$$\Phi(\mathbf{q}; h_j, R_j) =$$

$$= 2\pi \int\limits_{-(R_j-h_j)}^{h_j} dz \exp(iq_z[z + R_j - h_j]\frac{R_z^{(j)}}{q_0} J_1(q_0 R_z^{(j)}),$$

где $J_1(q_0 R_z^{(j)})$ – функция Бесселя первого порядка.

В трехосевой схеме двумерной дифракции интенсивность диффузного рассеяния в обратном пространстве запишется как

$$I_h^d(q_x, q_z) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dq_y I_h^d(\mathbf{q}), \qquad (7)$$

где под интегралом решение (1) для случая 3D дифракции. Отметим, что угловое распределение интенсивности рассеяния обычно регистрируется в виде карт в обратном пространстве RSM (*reciprocal space map*).

Численное моделирование. Численные расчеты углового распределения диффузного рассеяния блистерами выполнены для (004) отражения σ-поляризованного рентгеновского Cu$K_{\alpha 1}$ излучения от приповерхностного слоя GaAs. Радиус блистера для всех вычислений $R_B = 3$ мкм, толщина $t_B = 1$ мкм, высота микрополости $h_B = 0.5$ мкм. Контуры равной интенсивности диффузного рассеяния на картах RSM представлены в логарифмическом масштабе, отношение интенсивностей между соседними линиями составляет 0.01.

На рис. 3 показаны карты RSM от поверхностных блистеров в зависимости от радиуса изгиба отражающих плоскостей. В случае малых деформаций распределение диффузного рассеяния в обратном пространстве имеет овальную форму (рис. 3a), интенсивность рассеяния сконцентрирована вблизи узла обратной решетки. С увеличением величины изгиба отражающих плоскостей наблюдается уширение диффузного пятна, как в латеральном, так и вертикальном направлениях (рис. 3b). Дальнейшее уменьшение радиуса изгиба приводит к уширению контуров равной интенсивности в латеральном направлении (рис. 3c, d).

На рис. 4 приведены профили кривых q_x- и q_z-сечений RSM диффузного рассеяния от хаотически

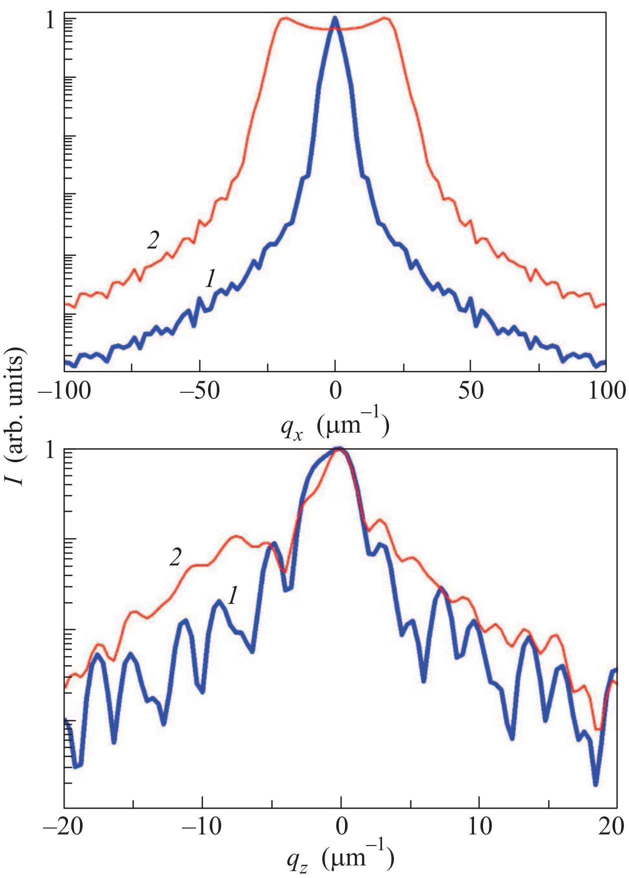

Рис. 4. (Цветной онлайн) Кривые q_x- (a) и q_z-сечений (b) RSM диффузного рассеяния от хаотически распределенных блистеров радиуса $R_B = 3$ мкм, толщиной $t_B = 1$ мкм, высотой микрополости $h_B = 0.5$,мкм. Радиус изгиба плоскостей R_b: *1* – 0.03 м; *2* – 0.005 м

распределенных блистеров радиуса $R_B = 3$ мкм, толщиной $t_B = 1$ мкм, высотой микрополости $h_B = 0.5$ мкм с разными радиусами изгиба отражающих плоскостей. В случае малого изгиба (кривые *1*) как вертикальное, так и латеральное сечение RSM заметно уже, чем для сильного изгиба отражающих плоскостей (кривая *2*). Причем q_x-сечение для слабодеформированных поверхностных блистеров имеет максимальное пиковое значение интенсивности рассеяния в центре узла обратной решетки, в то время как в случае сильного изгиба в этой области наблюдается небольшой провал.

Таким образом, разработанная теория диффузного рассеяния от поверхностных блистеров будет весьма полезна при анализе ионно-имплантированных слоев на основе экспериментальных данных высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке программы фундаментальных исследований Уральского отделения РАН (проект 18-10-2-23) и Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 17-02-00090-а; 16-43-110350).

1. М. А. Кривоглаз, *Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах*, Наукова думка, Киев (1983), 408 с.
2. В. И. Пунегов, Кристаллография **54**, 415 (2009) [V. I. Punegov, Crystallography Reports **54**, 391 (2009)].
3. В. И. Пунегов, УФН **185**, 449 (2015) [V. I. Punegov, Phys. Usp. **58**, 419 (2015)].
4. В. И. Пунегов, Н. Н. Фалеев, Письма в ЖЭТФ **92**, 483 (2010) [V. I. Punegov and N. N. Faleev, JETP Lett. **92**, 437 (2010)].
5. A. A. Lomov, V. I. Punegov, D. Nohavica, M. A. Chuev, A. L. Vasiliev, and D. V. Novikov, J. Appl. Cryst. **47**, 1614 (2014).
6. D. V. Irzhak, M. A. Knyasev, V. I. Punegov, and D. V. Roshchupkin, J. Appl. Cryst. **48**, 1159 (2015).
7. K. Shcherbachev and M. J. Bailey, Phys. Status Solidi (a) **208**, 2576 (2011).
8. V. I. Punegov, A. P. Petrakov, and N. A. Tikhonov, Phys. Status Solidi (a) **122**, 449 (1990).
9. W. Primak, J. Appl. Phys. **34**, 3630 (1963).
10. W. Primak and J. Luthra, J. Appl. Phys. **37**, 2287 (1966).
11. B. Terreault, Phys. Status Solidi (a) **204**, 2129 (2007).
12. R. Singh, S. H. Christiansen, O. Moutanabbir, and U. Gosele, J. Electron. Mater. **39**, 2177 (2010).
13. M. Bruel, Nucl. Instr. and Meth. B **108**, 313 (1996).
14. В. И. Пунегов, С. И. Колосов, Кристаллография **52**, 215 (2007) [V. I. Punegov and S. I. Kolosov, Crystallography Rep. **52**, 191 (2007)].
15. G. N. Watson, *A treatise on the theory of Bessel functions*, 2 nd ed., Cambridge. University press (1944), 804 p.