

ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В КРИСТАЛЛЕ С ПОВЕРХНОСТНОЙ РЕШЕТКОЙ ДРУГОГО МАТЕРИАЛА

В. И. Пунегов*

*Физико-математический институт
Федерального исследовательского центра «Коми научный центр»
Уральского отделения Российской академии наук
167982, Сыктывкар, Россия*

Поступила в редакцию 1 февраля 2019 г.,
после переработки 1 февраля 2019 г.
Принята к публикации 12 марта 2019 г.

Разработана общая теория динамической рентгеновской дифракции в кристалле, на поверхности которого сформирована латеральная периодическая структура из тонкопленочных линий (полос) другого материала. На основе модели краевых сил вычислены поля упругих решеточных смещений в подложке, возникающих в результате создания латеральной поверхностной решетки. Используя формализм дифракции пространственно-ограниченных рентгеновских пучков, мы получили решения для амплитуд отраженных рентгеновских волн от кристалла с поверхностной решеткой, химический состав которой отличается от состава подложки. Выполнено численное моделирование рентгеновской дифракции в подложке кремния с поверхностными решетками вольфрама и оксида SiO_2 . Показано, что угловые распределения интенсивностей рассеяния от кристалла кремния с одинаковыми по размеру вольфрамовыми и оксидными линиями существенно различаются, установлена физическая природа такого различия.

DOI: 10.1134/S0044451019080030

1. ВВЕДЕНИЕ

Первые эксперименты трехосевой рентгеновской дифрактометрии [1] на кристаллах кремния с прямоугольным поверхностным рельефом [2, 3] и на структурах, промодулированных поверхностной акустической волной [4, 5], показали, что наряду с основным дифракционным пиком возникают побочные дифракционные порядки (сателлиты). Латеральные порядки появляются и в случае рентгеновского рассеяния на кристаллах кремния с периодически повторяющимися тонкопленочными линиями (полосами) SiO_2 [6, 7]. Оксидные пленочные линии создаются термическим окислением поверхности или осаждением оксида SiO_2 из паровой фазы, при этом часть оксидной пленки удаляется методом литографии с последующим химическим травлением так, что поверхность

подложки Si становится покрытой поверхностной решеткой (ПР) оксидного материала [6, 7].

В работах [8, 9] исследована дифракция рентгеновских лучей в кристаллах кремния, на поверхности которых методом литографии была сформирована решетка в виде периодически расположенных линий золота и вольфрама. При этом в отличие от известных латеральных решеток [2–7], сателлиты на картах распределения интенсивности рассеяния (Reciprocal Space Maps (RSM)) возникали не только в горизонтальном направлении обратного пространства, но и вдоль линий псевдопиков монохроматора и анализатора. Отметим, что ранее была получена двумерная карта распределения интенсивности рентгеновского рассеяния на системе Au/Si(111), ПР которой имела период 2 мкм из чередующихся золотых линий [10]. Из-за плохого углового разрешения и относительно большого периода в расположении металлических полос, дифракционные порядки были размыты и результаты детально не анализировались.

Для объяснения необычного появления диагональных сателлитов вдоль направлений псевдопи-

* E-mail: vpunegov@dm.komisc.ru

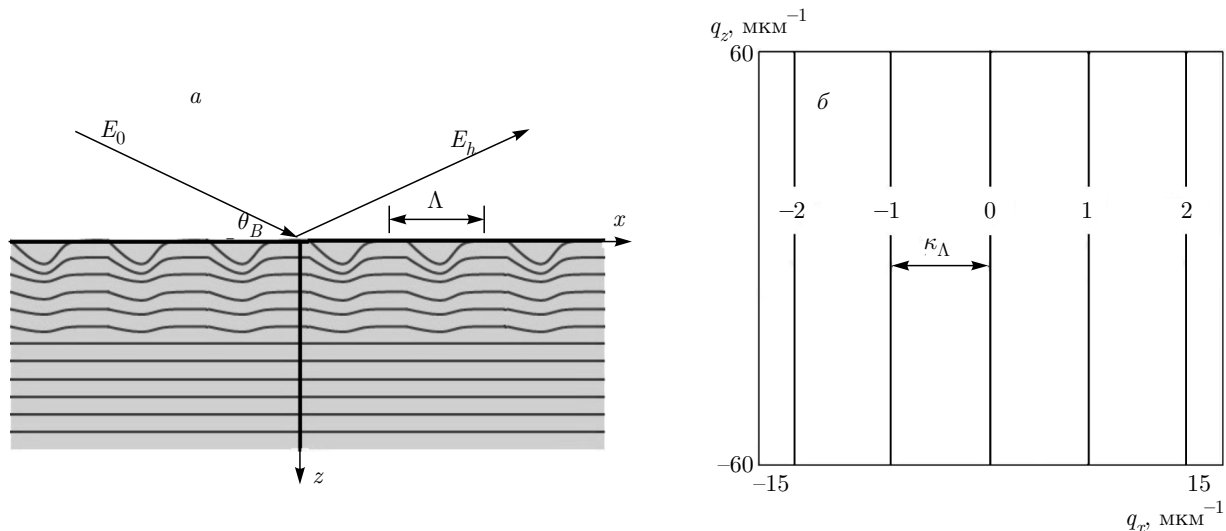


Рис. 1. Схематическое изображение дифракции плоской рентгеновской волны на кристалле с периодической латеральной деформацией решетки (а) и соответствующая карта распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве (б)

ков монохроматора и анализатора в работе [9] предложена феноменологическая модель, на основе которой выполнено численное моделирование углового распределения интенсивности рассеяния и проведено сопоставление теоретических результатов с экспериментальными данными. Однако формирование сегментальной структуры рентгеновских полей в объеме кристалла в рамках феноменологической модели [9] являлось лишь предположением. Строгая модель динамической дифракции на кристалле с периодически расположенными на его поверхности металлическими линиями без учета деформаций в приповерхностном слое кремния предложена в работе [11]. Численные расчеты в рамках этой модели позволили получить ромбоидальную структуру дифракционного поля внутри кристалла, предсказанную в работе [9]. С другой стороны, на расчетной карте углового распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве отсутствовали некоторые дифракционные порядки, которые были зарегистрированы на экспериментальных картах RSM. Следовательно, результаты [11] также полностью не отвечают физическому явлению рентгеновской дифракции на кристалле с вольфрамовой поверхностной решеткой. Кроме того, не выяснена причина разного углового распределения интенсивности рассеяния на кристалле с металлической и оксидной поверхностной решеткой [7, 9]. Таким образом, данная работа посвящена более глубокому, последовательному и полному изучению рентгеновской дифракции на кристаллах с поверхностной решеткой из другого материала.

2. ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ НА КРИСТАЛЛЕ С ПЕРИОДИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТНОЙ ДЕФОРМАЦИЕЙ. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим динамическую дифракцию рентгеновских лучей в кристалле, который имеет периодическую деформацию вдоль поверхности. Такие деформации могут возникать в кристалле тантала лития с периодически расположенными доменами противоположной полярности [12] в структурах, промодулированных поверхностной акустической волной [5] или при латеральной периодической ионной имплантации поверхности кристалла [13]. Кроме того, периодические упругие напряжения в кристаллической решетке подложки появляются в результате нанесения на поверхность кремния периодических тонкопленочных линий SiO_2 [6, 7, 14], Si_3N_4 [15], Au [10] и W [9], а также при создании на поверхности кристалла канавок, заполненных оксидным материалом [16].

Пусть на кристалл с периодической поверхностной деформацией под углом $\theta = \theta_B + \omega$ падает плоская рентгеновская волна, где $\omega = \theta - \theta_B$ — отклонение рентгеновского пучка от угла Брэгга θ_B подложки (рис. 1а). Динамическая дифракция рентгеновских лучей в деформированных кристаллах традиционно описывается уравнениями Такаги [17], которые в декартовой системе координат имеют вид:

$$\begin{aligned}
& \left(\operatorname{ctg} \theta_B \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \right) E_0(\eta; x, z) = ia_0 E_0(\eta; x, z) + \\
& \quad + ia_{\bar{h}} \phi(x, z) E_h(\eta; x, z), \\
& \left(\operatorname{ctg} \theta_B \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial z} \right) E_h(\eta; x, z) = \\
& \quad = i(a_0 + \eta) E_h(\eta; x, z) + ia_h \phi^*(x, z) E_0(\eta; x, z),
\end{aligned} \quad (1)$$

где $a_0 = \pi \chi_0 / (\lambda \gamma_0)$; $a_{h, \bar{h}} = C \pi \chi_{h, \bar{h}} / (\lambda \gamma_{h, 0})$; $\eta = 4\pi \cos(\theta_B) \omega / \lambda$ — угловой параметр, используемый в двухкристальной дифрактометрии в режиме θ - 2θ -сканирования; λ — длина волны рентгеновского излучения в вакууме; C — поляризационный фактор; $\chi_g = -r_0 \lambda^2 F_g / (\pi V_c)$ — фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости для $g = 0, h, \bar{h}$; V_c — объем элементарной ячейки; $r_0 = e^2 / (mc^2)$ — классический радиус электрона; e, m — соответственно заряд и масса электрона; F_g — структурный фактор. В уравнениях (1) фазовый фактор $\phi(x, z) = \exp(ihu_z(x, z))$, при этом «звездочка» означает комплексное сопряжение, h — величина вектора обратной решетки ($h = 2\pi/d_{hkl}$), где d_{hkl} — межплоскостное расстояние кристаллической подложки, $u_z(x, z)$ — проекция вектора упругих решеточных смещений на направление вектора обратной решетки отражающих атомных плоскостей.

В уравнениях (1) выполним фурье-преобразование для амплитуд рентгеновских полей [18, 19]:

$$E_{0,h}(\eta; x, z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \exp(i\kappa x) \hat{E}_{0,h}(\kappa, \eta; z), \quad (2)$$

где амплитуды в фурье-пространстве имеют вид

$$\hat{E}_{0,h}(\kappa, \eta; z) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-i\kappa x) E_{0,h}(\eta; x, z). \quad (3)$$

Проведем также фурье-преобразование для фазового множителя $\phi(x, z)$:

$$\phi(x, z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa' \exp(i\kappa' x) \hat{\phi}(\kappa', z), \quad (4)$$

$$\hat{\phi}(\kappa', z) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-i\kappa' x) \phi(x, z). \quad (5)$$

Подставляя (2), (4) в (1), получаем одномерные интегродифференциальные уравнения

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \hat{E}_0(\kappa, \eta; z)}{\partial z} = i(a_0 - \kappa \operatorname{ctg} \theta_B) \hat{E}_0(\kappa, \eta; z) + \\
& \quad + ia_{\bar{h}} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa' \hat{\phi}(\kappa', z) \hat{E}_h(\kappa - \kappa', \eta; z), \\
& -\frac{\partial \hat{E}_h(\kappa, \eta; z)}{\partial z} = i(a_0 + \eta - \kappa \operatorname{ctg} \theta_B) \hat{E}_h(\kappa, \eta; z) + \\
& \quad + ia_h \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa' \hat{\phi}^*(\kappa', z) \hat{E}_0(\kappa - \kappa', \eta; z).
\end{aligned} \quad (6)$$

Отметим, что уравнения (6) имеют аналитическое решение в отсутствие деформаций кристаллической решетки, т.е. когда $\phi(x, z) = 1$ и $\hat{\phi}(\kappa', z) = 2\pi \delta(\kappa')$ [18].

В кристалле с чередующейся латеральной деформацией поле упругих решеточных смещений $u_z(x, z)$ является периодической функцией вдоль направления x , при этом $u_z(x + \Lambda, z) = u_z(x, z)$, где Λ — период латеральной модуляции (рис. 1а). Следовательно, присутствующий в уравнениях дифракции фазовый фактор (4) также будет периодической функцией, т.е. $\phi(x + \Lambda, z) = \phi(x, z)$. Считая фронт падающей рентгеновской волны неограниченным (ширина пятна засветки поверхности кристалла много больше периода модуляции), фазовая функция $\phi(x, z)$ представима в виде ряда Фурье:

$$\phi(x, z) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} B_m(z) \exp(-im\kappa_\Lambda x), \quad (7)$$

где $\kappa_\Lambda = 2\pi/\Lambda$ — волновое число латеральной модуляции кристаллической решетки. Фурье-коэффициенты в (7) зависят от координаты z , направленной в глубь кристалла и запишутся как

$$\begin{aligned}
B_m(z) &= \frac{1}{\Lambda} \int_{-\Lambda/2}^{\Lambda/2} \exp[i(hu_z(x, z) + \kappa_\Lambda mx)] dx = \\
&= (2\pi)^{-1} \int_0^{2\pi} \exp[i(hu_z(\varphi/\kappa_\Lambda, z) + m\varphi)] d\varphi.
\end{aligned} \quad (8)$$

Фазовую функцию в фурье-пространстве $\hat{\phi}(\kappa', z)$ запишем с учетом ее периодичности:

$$\begin{aligned}
\hat{\phi}(\kappa', z) &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} B_m(z) \times \\
&\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i(\kappa' + m\kappa_\Lambda)x) dx
\end{aligned} \quad (9)$$

и подставим в (6). Поскольку

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i(\kappa' + m\kappa_{\Lambda})x) dx = \delta(\kappa' + m\kappa_{\Lambda})$$

— дельта-функция Дирака, уравнения дифракции для рентгеновских амплитуд в результате простых преобразований примут вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{E}_0(\kappa, \eta; z)}{\partial z} &= i(a_0 - \kappa \operatorname{ctg} \theta_B) \hat{E}_0(\kappa, \eta; z) + \\ &+ ia_{\bar{h}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} B_m(z) \hat{E}_h(\kappa + m\kappa_{\Lambda}, \eta; z), \\ -\frac{\partial \hat{E}_h(\kappa, \eta; z)}{\partial z} &= i(a_0 + \eta - \kappa \operatorname{ctg} \theta_B) \hat{E}_h(\kappa, \eta; z) + \\ &+ ia_h \sum_{m=-\infty}^{\infty} B_m^*(z) \hat{E}_0(\kappa + m\kappa_{\Lambda}, \eta; z). \end{aligned} \quad (10)$$

Система связанных дифференциальных уравнений (10) соответствует описанию многоволновой дифракции рентгеновских лучей в кристаллах [20], включая структуры с периодической упруго деформированной кристаллической решеткой вдоль поверхности [5, 21], при этом отличную от нуля амплитуду $\hat{E}_{0,h}(\kappa, \eta; z)$ получаем при значениях κ , кратных волновому числу латеральной модуляции κ_{Λ} , т. е. при $\kappa = n\kappa_{\Lambda}$, где $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Следовательно, система уравнений (10) может быть представлена в виде отдельных уравнений для разных дифракционных порядков. Например, для произвольного порядка с номером n можно записать

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{E}_{0,n}(\kappa, \eta; z)}{\partial z} &= i[a_0 - (\kappa - n\kappa_{\Lambda}) \operatorname{ctg} \theta_B] \times \\ &\times \hat{E}_{0,n}(\kappa, \eta; z) + \\ &+ ia_{\bar{h}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} B_m(z) \hat{E}_{h,n-m}(\kappa, \eta; z), \\ -\frac{\partial \hat{E}_{h,n}(\kappa, \eta; z)}{\partial z} &= i[a_0 + \eta - (\kappa - n\kappa_{\Lambda}) \operatorname{ctg} \theta_B] \times \\ &\times \hat{E}_{h,n}(\kappa, \eta; z) + \\ &+ ia_h \sum_{m=-\infty}^{\infty} B_m^*(z) \hat{E}_{0,n-m}(\kappa, \eta; z). \end{aligned} \quad (11)$$

Наличие суммы в правой части (11) указывает на то, что для углового положения основного максимума ($n = 0$) или сателлита с номером n имеет место не только динамическое взаимодействие отраженной $\hat{E}_{0,n}(\kappa, \eta; z)$ и дифракционной $\hat{E}_{h,n}(\kappa, \eta; z)$ волны данного порядка, но и взаимодействие с волнами других дифракционных сателлитов.

Без учета взаимодействия волн соседних дифракционных порядков (одномодовый режим) имеем

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{E}_{0,n}(\kappa, \eta; z)}{\partial z} &= i[a_0 - (\kappa - n\kappa_{\Lambda}) \operatorname{ctg} \theta_B] \times \\ &\times \hat{E}_{0,n}(\kappa, \eta; z) + ia_{-h} B_n(z) \hat{E}_{h,n}(\kappa, \eta; z), \\ -\frac{\partial \hat{E}_{h,n}(\kappa, \eta; z)}{\partial z} &= i[a_0 + \eta - (\kappa - n\kappa_{\Lambda}) \operatorname{ctg} \theta_B] \times \\ &\times \hat{E}_{h,n}(\kappa, \eta; z) + ia_h B_n^*(z) \hat{E}_{0,n}(\kappa, \eta; z). \end{aligned} \quad (12)$$

Как правило, система уравнений (11) используется для описания дифракции в кристаллах с большим периодом модуляции ($\Lambda > 10$ мкм) [21]. Поскольку в рассматриваемом случае период продольной упругой деформации $\Lambda \propto 1$ мкм, достаточно исходить из более простых уравнений (12).

3. ДИФРАКЦИЯ ПЛОСКОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ВОЛНЫ

Сначала рассмотрим общеизвестную трактовку рентгеновской дифракции, согласно которой фронт рентгеновской волны неограничен в латеральном направлении вдоль оси x (рис. 1а). В этом случае справедливы следующие граничные условия в прямом пространстве: для амплитуды рентгеновской волны, падающей на поверхность кристалла, примем $E_{0,n}(\eta; x, z = 0) = 1$. Пусть толщина кристалла l_z , тогда для дифракционной волны $E_{h,n}(\eta; x, z = l_z) = 0$. В фурье-пространстве, в котором представлены уравнения (12), граничные условия запишутся как $\hat{E}_{0,n}(\kappa, \eta; z = 0) = 2\pi\delta(\kappa)$ и $\hat{E}_{h,n}(\kappa, \eta; z = l_z) = 0$. Здесь $\delta(\kappa)$ — дельта-функция Дирака.

В уравнениях (12) присутствуют фурье-коэффициенты $B_n(z)$, зависящие от координаты z в глубь кристалла. Эта система уравнений в общем случае не имеет аналитического решения, поэтому, как правило, применяются численные методы [5]. С другой стороны, если коэффициенты $B_n(z)$ для всех дифракционных порядков не зависят от z , т. е. $B_n(z) = B_n$, то система (12) решается аналитически. Таким образом, если разбить кристалл на отдельные элементарные слои толщиной $z^p - z^{p-1} = l_z^p$, в пределах которых коэффициенты $B_n^p = B_n(z^p - z^{p-1} = l_z^p)$ можно считать постоянными величинами, то решение находится в виде рекуррентных соотношений. Здесь z^p, z^{p-1} — координаты верхней и нижней границы слоя с номером p , при этом нумерация слоев выполнена снизу вверх ($p = 0, 1, 2, \dots, P$). В рамках данной модели рассмотрим неоднородную по глубине кристаллическую систему, состоящую из P

слоев. Для произвольного элементарного слоя, например, с номером p , находящегося внутри многослойной структуры решение уравнений (12) представим в виде

$$\hat{E}_{0,n}^p(\kappa, \eta; z) = \left(\hat{M}_1^p \exp(i\hat{\xi}_n^p z) + \hat{M}_2^p \right) \times \exp\left(i \left[\hat{\sigma}_0^p + \hat{\xi}_{n,2}^p \right] z\right), \quad (13)$$

$$\hat{E}_{h,n}^p(\kappa, \eta; z) = \left(\hat{b}_1^p \hat{M}_1^p \exp(i\hat{\xi}_n^p z) + \hat{b}_2^p \hat{M}_2^p \right) \times \exp\left(i \left[\hat{\sigma}_0^p + \hat{\xi}_{n,2}^p \right] z\right), \quad (14)$$

где

$$\hat{\psi}_n = 2a_0 + \eta - 2(\kappa - n\kappa_\Lambda) \operatorname{ctg} \theta_B,$$

$$\hat{\xi}_n^p = \sqrt{(\hat{\psi}_n)^2 - 4B_n^p B_n^{p*} a_h a_{\bar{h}}},$$

$$\hat{\xi}_{n,1,2}^p = (-\hat{\psi}_n \pm \hat{\xi}_n^p)/2, \quad \hat{Q}_n^p = \hat{\xi}_{n,1}^p \exp(i\hat{\xi}_n^p l_z^p) - \hat{\xi}_{n,2}^p,$$

$$\hat{\sigma}_0 = a_0 - (\kappa - n\kappa_\Lambda) \operatorname{ctg} \theta_B, \quad \hat{b}_{1,2}^p = \hat{\xi}_{1,2}^p / [B_n^p a_{-h}].$$

Коэффициенты $\hat{M}_{1,2}^p$ находятся из граничных условий на интерфейсах, где амплитуда рентгеновской волны, падающей на элементарный слой с номером p , задается сверху этого слоя $\hat{E}_{0,n}^p(\kappa, \eta; z_p)$ и амплитуда дифракционной волны фиксируется на нижней границе $\hat{E}_{h,n}^p(\kappa, \eta; z_{p-1})$:

$$\hat{M}_1^p = -\hat{E}_{0,n}^p(\kappa, \eta; z_p) \frac{\hat{S}_2^p \exp\left(-i \left[\hat{\sigma}_0^p + \hat{\xi}_{n,1}^p \right] z_p\right)}{\hat{S}_1^p - \hat{S}_2^p}, \quad (15)$$

$$\hat{M}_2^p = \hat{E}_{0,n}^p(\kappa, \eta; z_p) \frac{\hat{S}_1^p \exp\left(-i \left[\hat{\sigma}_0^p + \hat{\xi}_{n,2}^p \right] z_p\right)}{\hat{S}_1^p - \hat{S}_2^p}. \quad (16)$$

Здесь $\hat{S}_1^p = (\hat{R}_n^{p-1} - \hat{b}_1^p) \exp(i\hat{\xi}_n^p l_z^p)$, $\hat{S}_2^p = \hat{R}_n^{p-1} - \hat{b}_2^p$;

$$\hat{R}_n^{p-1} = \hat{E}_{h,n}^{p-1}(\kappa, \eta; z_{p-1}) / \hat{E}_{0,n}^{p-1}(\kappa, \eta; z_{p-1})$$

— амплитудный коэффициент отражения от $(p-1)$ нижних слоев многослойной структуры. Решения для дифракционного порядка с номером n в прямом пространстве находятся обратным преобразованием Фурье выражений (13) и (14) и запишутся как

$$E_{0,n}^p(\eta; z) = (M_1^p \exp(i\xi_n^p z) + M_2^p) \times \exp(i[\sigma_0 + \xi_{n,2}^p]z), \quad (17)$$

$$E_{h,n}^p(\eta; z) = (b_1^p M_1^p \exp(i\xi_n^p z) + b_2^p M_2^p) \times \exp(i[\sigma_0 + \xi_{n,2}^p]z), \quad (18)$$

где коэффициенты $M_{1,2}^p$, ψ_n , ξ_n^p , $\xi_{n,1,2}^p$, Q_n^p , σ_0 следуют из соответствующих параметров, присутствующих в решениях (13) и (14) при $\kappa = 0$. Отметим, что в случае падающей на кристалл плоской, пространственно-неограниченной волны, амплитуды проходящего (17) и отраженного (18) рентгеновского поля не зависят от продольной координаты x .

Трехосевая регистрация рентгеновских полей в обратном пространстве определяется параметрами ω и ε , фиксирующими угловое положение образца и анализатора [1]. В симметричной брэгговской геометрии эти параметры связаны с проекциями отклонения вектора дифракции от узла обратной решетки соотношениями [18]

$$q_x = k \sin \theta_B (2\omega - \varepsilon),$$

$$q_z = -k \cos \theta_B \varepsilon.$$

Переход к трехосевой дифракционной схеме выполняется фурье-преобразованием (17) и (18):

$$\hat{E}_{0,h,n}^p(q_x + n\kappa_\Lambda, q_z; z) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-i[q_x + n\kappa_\Lambda]x) E_{0,h,n}^p(\eta; z). \quad (19)$$

Таким образом, в случае падающей плоской волны получаем математические решения для амплитуд рентгеновских полей в обратном пространстве:

$$\hat{E}_{0,h,n}^p(q_x + n\kappa_\Lambda, \eta; z) = 2\pi \delta(q_x + n\kappa_\Lambda) E_{0,h,n}^p(\eta; z), \quad (20)$$

где $E_{0,h,n}^p(\eta; z)$ — амплитуды полей в прямом пространстве (17) и (18). Угловая переменная η , используемая в двухкристальной дифракционной схеме, теперь представима в виде $\eta = (q_x + n\kappa_\Lambda) \operatorname{ctg} \theta_B - q_z$, параметр $\psi_n = 2a_0 + (q_x + n\kappa_\Lambda) \operatorname{ctg} \theta_B - q_z$. Соотношение (20) имеет совершенно прозрачную физическую интерпретацию. В рамках трехосевой дифракционной схемы угловое распределение интенсивности рассеяния в обратном пространстве представимо в виде чередующихся бесконечно узких полос (дельта-функций) соответствующих дифракционных порядков в латеральном направлении (рис. 1б). Распределение интенсивностей в вертикальном направлении определяется соотношениями (17), (18) и зависит от угловой переменной $\eta = -q_z$ при $q_x = -n\kappa_\Lambda$, что соответствует $(\omega - 2\theta)$ -сканированию в трехосевой дифрактометрии [18]. Амплитуда отраженной волны на входной поверхности кристалла ($z = z_P = 0$) вычисляется на последнем этапе рекуррентной процедуры:

$$\hat{E}_{h,n}^P(q_x, q_z) = 2\pi\delta(q_x + n\kappa_\Lambda) \left(\frac{b_2^P S_1^P - b_1^P S_2^P}{S_1^P - S_2^P} \right). \quad (21)$$

Если многослойная структура — конечной толщины, то при $p = 0$ амплитуда дифракционной волны на ее нижней границе $E_{h,n}^0(q_z; z = z_0) = 0$. В случае, когда многослойная структура лежит на полубесконечной подложке, начальная амплитуда имеет вид

$$\begin{aligned} E_{h,n}^0(q_z; z = z_0) &= \frac{a_h}{\xi_{n,1}^0}; \quad \text{Im}(\xi_n^0) < 0, \\ E_{h,n}^0(q_z; z = z_0) &= \frac{a_h}{\xi_{n,2}^0}; \quad \text{Im}(\xi_n^0) > 0, \end{aligned} \quad (22)$$

где коэффициенты ξ_n^0 и $\xi_{n,1,2}^0$ такие же, что и в соотношениях (13), (14), и зависят от характеристик рентгеновского излучения и материала подложки. Полная амплитуда рентгеновской волны, отраженной от кристалла с периодической латеральной деформацией, находится суммированием по всем дифракционным порядкам:

$$\hat{E}_h^P(q_x, q_z) = \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} \hat{E}_{h,n}^P(q_x, q_z). \quad (23)$$

4. ДИФРАКЦИЯ ПРОСТРАНСТВЕННО-ОГРАНИЧЕННОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ПУЧКА НА КРИСТАЛЛЕ С ПЕРИОДИЧЕСКОЙ ЛАТЕРАЛЬНОЙ ДЕФОРМАЦИЕЙ

Устоявшийся формализм плосковолновой динамической теории дифракции [22] не отвечает описанию реальных экспериментальных условий. Более того, как показано выше, становится затруднительным анализ карт распределения интенсивности рассеяния вблизи узла обратной решетки (рис. 1б), поэтому следующим шагом является переход к рассмотрению дифракции пространственно-ограниченных рентгеновских пучков на кристалле с периодической латеральной деформацией.

Пусть на кристалл с периодической латеральной деформацией решетки падает рентгеновский пучок шириной w , ограниченный щелью S_1 (рис. 2). Линейный размер засветки этим пучком поверхности кристалла в направлении оси x равен $l_x^{(in)} = w/\sin(\theta_B)$. Наличие щели S_2 в дифракционном направлении задает ширину отраженного пучка на входной поверхности кристалла (рис. 2). Дифракцией рентгеновских лучей на краях щелей падающего S_1 и отраженного S_2 пучков пренебрегаем (приближение геометрической оптики).

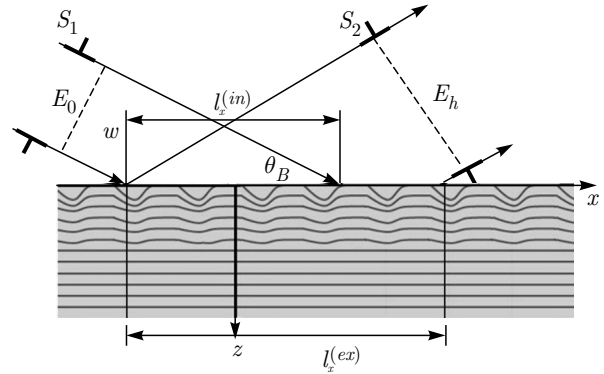


Рис. 2. Схематическое изображение дифракции ограниченного рентгеновского пучка на кристалле с периодической латеральной деформацией решетки; $w = l_x^{(in)} \sin(\theta_B)$ — ширина падающего пучка, ограниченного щелью S_1

Уравнения дифракции (12) для пространственно-ограниченных пучков должны быть дополнены новыми граничными условиями. Наличие щели S_1 позволяет записать в прямом пространстве следующее выражение для амплитуды рентгеновского пучка, падающего на поверхность кристалла: $E_{0,n}(\eta; x, z = 0) = Y(x, l_x^{(in)})$, где

$$Y(x, l_x^{(in)}) = \begin{cases} 1, & x \in \pm l_x^{(in)}/2, \\ 0, & x \notin \pm l_x^{(in)}/2. \end{cases} \quad (24)$$

Это граничное условие в фурье-пространстве задается равенством $\hat{E}_{0,n}^P(\kappa, \eta; z = 0) = \hat{Y}(\kappa, l_x^{(in)})$, при этом фурье-образ функции (24) имеет вид

$$\hat{Y}(\kappa, l_x^{(in)}) = \frac{\sin(\kappa l_x^{(in)}/2)}{\kappa/2}. \quad (25)$$

Второе граничное условие для кристалла толщиной l_z :

$$E_{h,n}(\eta; x, l_z) = \hat{E}_{h,n}(\kappa, \eta; l_z) = 0.$$

Полагая, что периодическая латеральная деформация кристаллической решетки изменяется с глубиной z , в рамках рекуррентной процедуры получаем соотношения, по структуре аналогичные (13), (14). Отличие заключается в том, что для плоской волны граничные коэффициенты $\hat{M}_{1,2}^P \propto \delta(\kappa)$, для ограниченного падающего пучка $\hat{M}_{1,2}^P \propto \hat{Y}(\kappa, l_x^{(in)})$.

Переход к решениям, описывающим трехосевую регистрацию рентгеновских полей, требует выполнить фурье-преобразования (19). Для амплитуды отраженного рентгеновского пучка n -го дифракционного порядка на поверхности кристалла ($z = z_P =$

= 0) в трехосевой геометрии с щелями S_1 и S_2 получаем

$$\hat{E}_{h,n}^P(q_x, q_z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \left(\frac{\hat{b}_2^P \hat{S}_1^P - \hat{b}_1^P \hat{S}_2^P}{\hat{S}_1^P - \hat{S}_2^P} \right) \times \\ \times \hat{Y}(\kappa, l_x^{(in)}) \hat{Y}(\kappa - n\kappa_\Lambda - q_x, l_x^{(ex)}), \quad (26)$$

где

$$\hat{Y}(\kappa - n\kappa_\Lambda - q_x, l_x^{(ex)}) = \\ = \frac{\sin([\kappa - n\kappa_\Lambda - q_x]l_x^{(ex)}/2)}{[\kappa - n\kappa_\Lambda - q_x]/2}. \quad (27)$$

Коэффициенты в (26) зависят от угловой переменной $\hat{\psi}_n^p = 2a_0 + (q_x + n\kappa_\Lambda - 2\kappa) \operatorname{ctg} \theta_B - q_z$. Амплитудный коэффициент отражения запишется как

$$R_{h,n}(q_x, q_z) = \frac{1}{2\pi l_{norm}} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \left(\frac{\hat{b}_2^P \hat{S}_1^P - \hat{b}_1^P \hat{S}_2^P}{\hat{S}_1^P - \hat{S}_2^P} \right) \times \\ \times \hat{Y}(\kappa, l_x^{(in)}) \hat{Y}(\kappa - n\kappa_\Lambda - q_x, l_x^{(ex)}). \quad (28)$$

Величина l_{norm} равна наименьшему из значений $l_x^{(in)}$ и $l_x^{(ex)}$.

5. ДИФРАКЦИЯ ПРОСТРАНСТВЕННО-ОГРАНИЧЕННОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ПУЧКА НА КРИСТАЛЛЕ С ПОВЕРХНОСТНОЙ РЕШЕТКОЙ ДРУГОГО МАТЕРИАЛА

Рассмотрим симметричную брэгговскую дифракцию ограниченных рентгеновских пучков в кристалле, на поверхности которого, например, методом литографии сформирована поверхностная решетка из другого материала в виде периодически расположенных латерально-ограниченных тонкопленочных линий одинаковой высоты h_f и ширины l_f . Эти линии могут быть кристаллическими, аморфными или поликристаллическими и, в отличие от кристалла, на котором они размещены, находятся вне дифракционного условия. Из-за различия в коэффициентах термического расширения при комнатной температуре, в тонкопленочных линиях и в подложке возникают упругие напряжения, приводящие к возникновению деформаций кристаллической решетки подложки. Период в расположении линий другого материала Λ совпадает с периодом деформаций в подложке, $(\Lambda - l_f)$ — расстояние между соседними линиями (рис. 3).

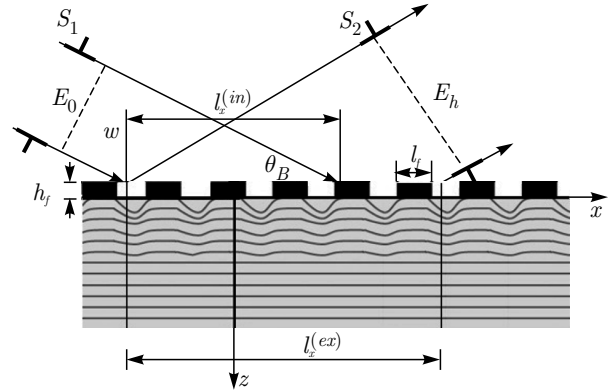


Рис. 3. Схема дифракции ограниченных рентгеновских пучков на кристалле с поверхностной решеткой другого материала

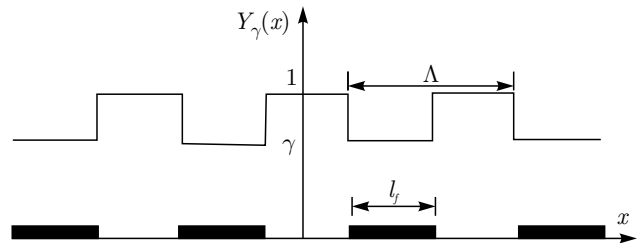


Рис. 4. Функция модуляции интенсивности падающего рентгеновского излучения: γ — доля пропускаемого излучения через периодически расположенные поглотители, l_f — ширина поглощающей тонкопленочной линии, Λ — период модуляции

Если на поверхности кристалла находится система тонкопленочных линий другого материала, то в общем случае падающий рентгеновский пучок, прежде чем он достигнет поверхности подложки, будет испытывать поглощение на участках, где эти линии присутствуют. Кроме того, наличие линий приводит к периодической деформации приповерхностной области кристалла, поэтому динамическая дифракция для произвольного сателлита будет описываться системой уравнений (12). На участках между линиями поглощение отсутствует, тем самым возникает периодическая модуляция интенсивности падающего излучения в латеральном направлении. Для описания динамической дифракции на кристалле с такой модуляцией падающего излучения примем следующую модель граничных условий в прямом пространстве: $E_{0,n}(\eta; x, z=0) = Y_\gamma(x, M)$, где модуляция падающего рентгеновского излучения задается функцией вида (рис. 4):

$$\begin{aligned}
Y_\gamma(x, M) &= 1, \quad x \in \pm \frac{\Lambda - l_f}{2}, \quad -\frac{M\Lambda}{2} \leq x \leq \frac{M\Lambda}{2}, \\
Y_\gamma(x, M) &= \gamma, \quad x \notin \pm \frac{\Lambda - l_f}{2}, \quad -\frac{M\Lambda}{2} \leq x \leq M\Lambda, \quad (29) \\
Y_\gamma(x, M) &= 0, \quad x < -\frac{M\Lambda}{2}, \quad x > \frac{M\Lambda}{2}.
\end{aligned}$$

Здесь γ — доля излучения, пропускаемого через поглотитель (тонкопленочную линию), M — число периодов модуляции, $l_x^{(in)} = M\Lambda$ — ширина засветки поверхности кристалла с ПР падающим рентгеновским пучком. Для кристалла толщиной l_z справедливо второе граничное условие: $E_{h,n}(\eta; x, z = l_z) = 0$. Поскольку система уравнений (12) представлена в фурье-пространстве, граничные условия имеют вид $\hat{E}_{0,n}(\kappa, \eta; z = 0) = \hat{Y}_\gamma(\kappa, M)$ и $\hat{E}_{h,n}(\eta; x, z = l_z) = 0$, где

$$\begin{aligned}
\hat{Y}_\gamma(\kappa, M) &= \frac{\sin(\kappa M\Lambda/2)}{\sin(\kappa\Lambda/2)} \times \\
&\times \left[(1 - \gamma) \frac{\sin(\kappa(\Lambda - l_f)/2)}{\kappa/2} + \gamma \frac{\sin(\kappa\Lambda/2)}{\kappa/2} \right]. \quad (30)
\end{aligned}$$

Отметим, что при $\gamma = 1$, т.е. когда материал ПР является непоглощающим, выражение (30) сводится к (25):

$$\hat{Y}_\gamma(\kappa, M) = \sin(\kappa M\Lambda/2)/(\kappa/2).$$

Пусть отраженный рентгеновский пучок, выходящий с нижней границы поверхности подложки, засвечивает L полос ПР. В режиме трехосевой регистрации амплитудный коэффициент отражения n -го дифракционного порядка от кристалла с поверхностной решеткой другого материала запишется как

$$\begin{aligned}
R_{h,n}(q_x, q_z) &= \frac{1}{2\pi l_{norm}} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \left(\frac{\hat{b}_2^P \hat{S}_1^P - \hat{b}_1^P \hat{S}_2^P}{\hat{S}_1^P - \hat{S}_2^P} \right) \times \\
&\times \hat{Y}_\gamma(\kappa, M) \hat{Y}_\gamma(\kappa - n\kappa_\Lambda - q_x, L), \quad (31)
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
\hat{Y}_\gamma(\kappa - n\kappa_\Lambda - q_x, L) &= \frac{\sin([\kappa - n\kappa_\Lambda - q_x]\Lambda/2)}{\sin([\kappa - n\kappa_\Lambda - q_x]\Lambda/2)} \times \\
&\times \left[(1 - \gamma) \frac{\sin([\kappa - n\kappa_\Lambda - q_x](\Lambda - l_f)/2)}{[\kappa - n\kappa_\Lambda - q_x]/2} + \right. \\
&\left. + \gamma \frac{\sin([\kappa - n\kappa_\Lambda - q_x]\Lambda/2)}{[\kappa - n\kappa_\Lambda - q_x]/2} \right]. \quad (32)
\end{aligned}$$

При $\gamma = 1$, т.е. в отсутствие модуляции падающего рентгеновского пучка, соотношение (32) непосредственно сводится к формуле (28), при этом $l_x^{(ex)} = L\Lambda$.

6. ПОЛЕ УПРУГИХ ДЕФОРМАЦИЙ

Тонкопленочные линии одного материала на поверхности кристаллической подложки другого материала имеют широкое применение в приборах микро- и нанoeлектроники, например, в технологии интегральных схем [23]. Известно, что пленки, осажденные на подложке, находятся в напряженном состоянии. Эти напряжения являются результатом различий коэффициентов теплового расширения пленки и подложки [24]. Когда тонкая пленка покрывает всю поверхность толстой подложки, то упругие напряжения в основном присутствуют в пленке. Если при этом система пленка-подложка испытывает упругий изгиб, эти напряжения могут быть вычислены с использованием классической формулы Стони [25]. В случае, когда пленка, например, методом литографии трансформируется в систему из периодически расположенных линий, напряженное состояние накапливается в подложке и усиливается преимущественно у краев тонкопленочных линий. Такое усиление упругих напряжений в ряде случаев приводит к генерации дислокаций в подложке [26].

Анализ упругих деформаций кристаллической решетки на краях пленки впервые выполнен в работе [27]. Позже предложено несколько различных моделей для изучения упругих напряжений в системе пленка-подложка [28–31]. На основе этих моделей [32–35], а также расчетов с использованием метода конечных элементов [36, 37] спрогнозированы краевые эффекты в системе тонкопленочная линия-подложка.

Для простоты будем исходить из первой, наиболее простой модели краевых сил [28]. Согласно этой модели, на краю пленки, лежащей на полубесконечной подложке из другого материала, концентрируется сила в направлении, параллельном интерфейсу между пленкой и подложкой. Величина этой силы равна $F_f = \sigma_{fxx} h_f$, где σ_{fxx} — компонента напряжения, присутствующая у края пленки, h_f — толщина пленки. В результате действия этой силы в подложке возникают упругие напряжения, компоненты которых в плоскости дифракции xz имеют вид [28]

$$\begin{aligned}
\sigma_{xx} &= -\frac{2F_f}{\pi} \left(\frac{x^3}{(x^2 + z^2)^2} \right), \\
\sigma_{zz} &= -\frac{2F_f}{\pi} \left(\frac{xz^2}{(x^2 + z^2)^2} \right). \quad (33)
\end{aligned}$$

Строго говоря, величина σ_{fxx} зависит от ширины тонкопленочной линии l_f , — чем уже линия, тем меньше ее значение. Имеются теоретические моде-

ли и эксперименты по нахождению величины σ_{fxx} [33, 37]. Так, в работе [37] получена универсальная кривая среднего напряжения в пленке, латеральный размер которой существенно меньше поверхности подложки:

$$\sigma_{fxx} = \sigma_0 \frac{X}{X + a}, \quad (34)$$

где $X = K_{hu} l_f / h_f$, $K_{hu} = E_s(1 - \nu_f^2) / E_f(1 - \nu_s^2)$, $a = 5.545$, σ_0 — однородное напряжение в пленке больших латеральных размеров, $E_{f,s}$, $\nu_{f,s}$ — модули Юнга и коэффициенты Пуассона пленочной линии (индекс «f») и подложки (индекс «s»).

Фурье-коэффициенты $B_n(z)$, присутствующие в решениях для амплитуд полей рентгеновских пучков, определяются упругими смещениями атомов из узлов кристаллической решетки (см. Приложение, формула (A.4))

$$u_z(x, z) = u_0 \left(\frac{zx}{x^2 + z^2} - \frac{1 - \nu_s}{1 + \nu_s} \operatorname{arctg} \frac{z}{x} \right), \quad (35)$$

где максимальное значение решеточных смещений $u_0 = F_f(1 + \nu_s) / (\pi E_s)$ зависит от характеристик тонкопленочной линии (краевой силы F_f), а также от коэффициента Пуассона и модуля Юнга подложки. Для численных расчетов поле решеточных смещений вдоль вектора обратной решетки удобно представить в виде

$$u_z \left(\frac{\varphi}{\kappa_\Lambda}, z \right) = u_0 \left(\frac{z(\varphi/\kappa_\Lambda)}{(\varphi/\kappa_\Lambda)^2 + z^2} - \frac{1 - \nu_s}{1 + \nu_s} \operatorname{arctg} \frac{z}{\varphi/\kappa_\Lambda} \right). \quad (36)$$

Выражения (35), (36) записаны для одного края пленки, латеральный размер которой меньше поверхности подложки, поэтому для одной линии упругие решеточные смещения запишутся как

$$u_{z,line}(x, z) = u_z(x - l_f/2, z) - u_z(x + l_f/2, z). \quad (37)$$

Аналогичная запись справедлива и для упругих решеточных напряжений, а также деформаций кристаллической решетки [38]. В случае периодического расположения M линий общее поле упругих решеточных смещений в подложке запишется как суперпозиция смещений для одной изолированной тонкопленочной линии:

$$u_{z,gr}(x, z) = \sum_{m=-M/2}^{M/2} u_{z,line}(x + m\Lambda, z). \quad (38)$$

Следующим шагом в рассмотрении является вычисление фурье-коэффициентов $B_n(z)$. Формула (8) дает связь этих коэффициентов с полем решеточных смещений $u_{z,line}(\varphi/\kappa_\Lambda, z_p)$ для отдельной линии:

$$B_n^p = (2\pi)^{-1} \times \int_0^{2\pi} \exp[i(hu_{z,st}(\varphi/\kappa_\Lambda, z_p) + n\varphi)] d\varphi, \quad (39)$$

где $u_{z,line}(\varphi/\kappa_\Lambda, z_p)$ задается соотношением (37) заменой $x \rightarrow \varphi/\kappa_\Lambda$ и при значении координаты $z = z_p$.

7. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Численное моделирование углового распределения интенсивности рентгеновского рассеяния выполнено для кристалла кремния с поверхностными решетками из вольфрама и оксида SiO_2 . В обоих случаях период ПР составлял 1 мкм, ширины металлической и оксидной линий 0.5 мкм, их толщины равны 100 нм.

Использованы табличные данные для симметричного (111) отражения σ -поляризованного рентгеновского $K_{\alpha 1}$ -излучения Cu с длиной волны $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$ (см. ссылку [39] и указанный в ней адрес сайта “X-Ray Server”). Длина первичной экстинкции составляет $l_{ext} = 1.51$ мкм. Угол Брэгга для выбранного отражения равен 14.221° , межплоскостное расстояние $d_{111} = 3.1355 \text{ \AA}$.

В численных расчетах значения модулей Юнга и коэффициентов Пуассона для кремния, вольфрама и оксида SiO_2 взяты из работ [33, 40, 41]. Несмотря на то что однородные напряжения в пленках больших латеральных размеров для вольфрама (1300 МПа) и оксида SiO_2 (400 МПа) сильно разнятся, компоненты напряжений, присутствующие у краев пленок вольфрама (360 МПа) и SiO_2 (300 МПа) различаются незначительно. Это связано с тем, что коэффициенты K_{hu} в (34) для вольфрама (0.427) и оксида кремния (2.608) имеют заметное различие. Максимальные решеточные смещения на краю пленки u_0 в (35) и (36) имеют значения 0.064 нм для вольфрама и 0.051 нм для SiO_2 . Для периодически расположенных тонкопленочных линий максимальные значения смещений равны 0.053 нм для W и 0.042 нм для SiO_2 . Карты равнозначных контуров упругих решеточных смещений для вольфрама и оксида SiO_2 вычислены на основе формул (36)–(38) и показаны на рис. 5.

На рис. 6 представлены профили (горизонтальные сечения на картах рис. 5) упругих решеточных

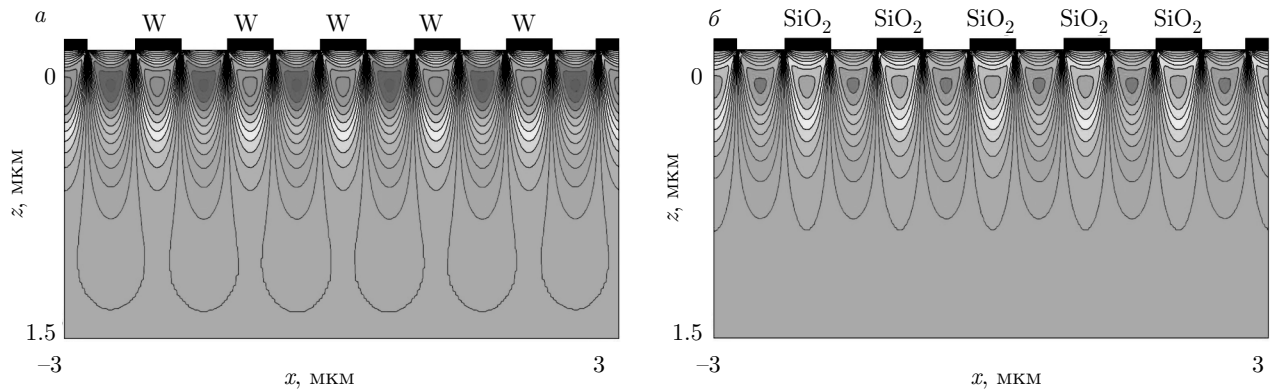


Рис. 5. (В цвете онлайн) Поля упругих решеточных смещений в кристалле кремния $u_{z,gr}(x, z)$, вызванные поверхностными решетками вольфрама (а) и SiO_2 (б). Ширина каждой тонкопленочной линии обоих материалов 0.5 мкм, толщина 0.1 мкм. Период решетки 1.0 мкм. Контурные равных смещений представлены в линейном масштабе, максимальное значение $u_z^{(max)} = 0.06$ нм (красный цвет), минимальное значение $u_z^{(min)} = -0.06$ нм (синий цвет). Разность между соседними контурными линиями 0.005 нм

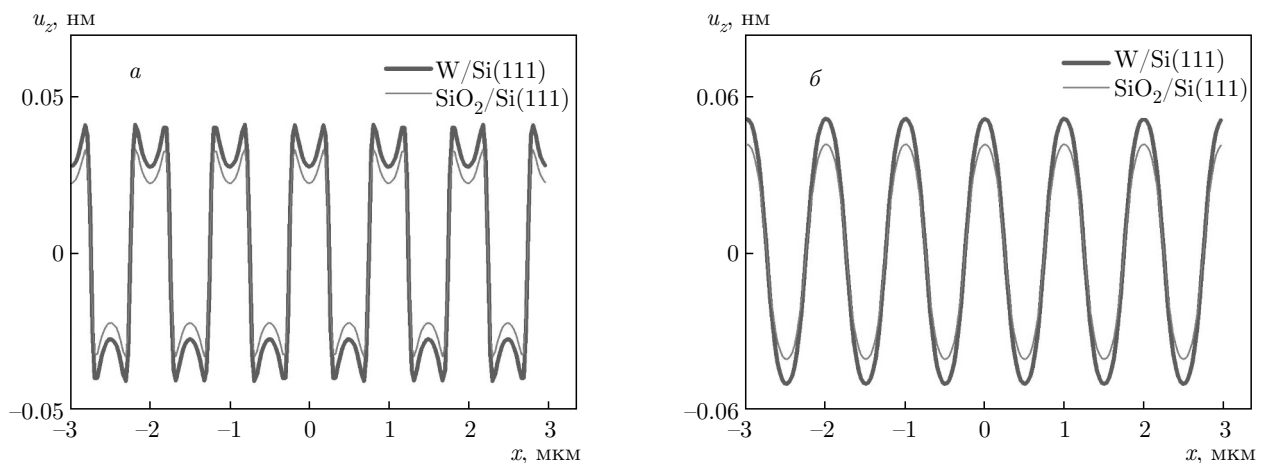


Рис. 6. (В цвете онлайн) Профили упругих решеточных смещений $u_{z,gr}(x)$ кристалла кремния вдоль латеральной оси x на глубине $z = 0.06$ мкм (а) и $z = 0.23$ мкм (б) для поверхностных решеток вольфрама (жирная синяя линия) и SiO_2 (красная тонкая линия)

смещений $u_{z,gr}(x)$ подложки кремния вдоль латеральной оси на разной глубине кристалла. Нетрудно видеть, что максимальные значения упругих смещений локализуются не на поверхности подложки, а на глубине 0.23 мкм. При этом вблизи интерфейса (рис. 5, 6а) смещения максимальны у краев тонкопленочных линий, с увеличением глубины максимумы упругих деформаций концентрируются под центром линии (рис. 5, 6б). Более наглядно распределения упругих смещений по глубине подложки для ПР разных материалов показаны на рис. 7. Вычисления углового распределения интенсивности рентгеновского рассеяния вблизи узла обратной решетки на кристалле кремния с поверхностными решетками

вольфрама и SiO_2 выполнялись на основе соотношения

$$I_h(q_x, q_z) = \left| \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} R_{h,n}(q_x, q_z) \right|^2, \quad (40)$$

где $R_{h,n}(q_x, q_z)$ — амплитудный коэффициент отражения (31). Результаты вычислений представлены в виде карт распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве (RSM). Поскольку в эксперименте, как правило, ширина падающего пучка, ограниченного щелью S_1 , составляет порядка $w = 100$ мкм, получаем $l_x^{(in)} = M\Lambda = 400$ мкм. Это значение для $l_x^{(in)}$, а также $l_x^{(ex)} = L\Lambda = 400$ мкм

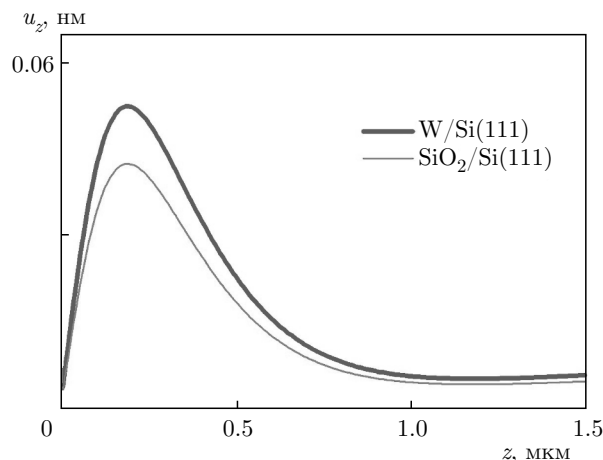


Рис. 7. (В цвете онлайн) Профили упругих решеточных смещений $u_{z,gr}(z)$ кристалла кремния вдоль вертикальной оси z для поверхностных решеток вольфрама (жирная линия) и SiO₂ (красная тонкая линия) при $x = 0$

($M = L = 400$), было использовано в численном моделировании рентгеновской дифракции на кристалле кремния с ПР обоих материалов. Вычисления карт RSM проводились непосредственно с применением формулы (40). Чтобы полученные теоретические результаты визуально были похожи на результаты экспериментальных измерений, выполнено численное моделирование с учетом инструментальной функции [18, 42] для дифракционной схемы с четырехкратно отражающим монохроматором Ge(022) и двукратно отражающим анализатором Ge(022).

На рис. 8 показаны карты RSM от кристалла кремния с вольфрамовой (а) и оксидной (б) поверхностной решеткой, а на рис. 9 то же самое, но с учетом инструментальной функции. Нетрудно видеть, что угловые распределения интенсивностей рассеяния вблизи узла обратной решетки для систем W/Si(111) и SiO₂/Si(111) существенно различаются. В случае вольфрамовой ПР на картах RSM, помимо традиционных латеральных дифракционных порядков, возникают диагональные сателлиты. Причина такого различия в дифракционных картинах сводится к следующему. Мнимые части фурье-коэффициентов рентгеновской поляризуемости вольфрама $\chi_{0,W}^{im} = i0.684 \cdot 10^{-5}$ и SiO₂ $\chi_{0,SiO_2}^{im} = i0.0116 \cdot 10^{-5}$ [39] различаются в 41 раз, на эту же величину различаются линейные коэффициенты поглощения. Таким образом, параметр γ в (29) и (30), определяющий долю пропускаемого излучения через периодически расположенные тонкоплечные линии, для вольфрама $\gamma = 0.87$, для оксида кремния $\gamma = 0.99$. Из этого следует, что воль-

фрамовая поверхностная решетка периодически модулирует падающее на кристалл кремния рентгеновское излучение, в то время как оксидная ПР пропускает падающее излучение к поверхности подложки практически без поглощения. Таким образом, периодическая модуляция падающего на кристалл излучения с ПР сильно поглощающего материала приводит к возникновению дополнительных диагональных дифракционных порядков, которые могут быть более интенсивными по сравнению с сателлитами, вызванными периодической деформацией приповерхностной области подложки (рис. 8а, 9а). Латеральные дифракционные порядки на всех расчетных RSM обозначены нулем, положительными и отрицательными целыми числами. Диагональные сателлиты имеют два цифровых значения, первое число указывает на латеральное положение, второе — на вертикальную координату на картах RSM.

Ранее была рассмотрена модель рентгеновской дифракции от системы W/Si(111) без учета периодических упругих деформаций в приповерхностной области подложки [11]. Теоретические расчеты RSM показали наличие диагональных дифракционных порядков, однако отсутствовали некоторые латеральные сателлиты, наблюдаемые на экспериментальных картах интенсивности рассеяния [9]. Здесь в рамках этой модели с целью сравнения результатов выполнено численное моделирование для кристалла кремния с ПР вольфрама и оксида SiO₂. Расчетные карты RSM представлены на рис. 10 и 11. В отсутствие периодических деформаций в подложке с вольфрамовой ПР на картах RSM присутствуют диагональные дифракционные порядки, при этом отсутствуют ± 1 сателлиты (рис. 10а, рис. 11а). Кроме того, отсутствуют сателлитные пики с номерами $(\pm 2, \pm 1)$, наблюдаемые на картах рис. 8а и 9а, поскольку на дифракционных картинах (рис. 10а, рис. 11а) нет латеральных сателлитов ± 1 . Что касается оксидной ПР, то без периодических латеральных деформаций в подложке, дифракционные порядки вовсе отсутствуют. В данном случае угловое распределение интенсивности рассеяния в обратном пространстве соответствует дифракции пространственно-ограниченного рентгеновского пучка в совершенном кристалле (рис. 10б, рис. 11б) [18].

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Суммируя изложенное выше, можно сделать вывод, что разработанная теория полностью объясняет

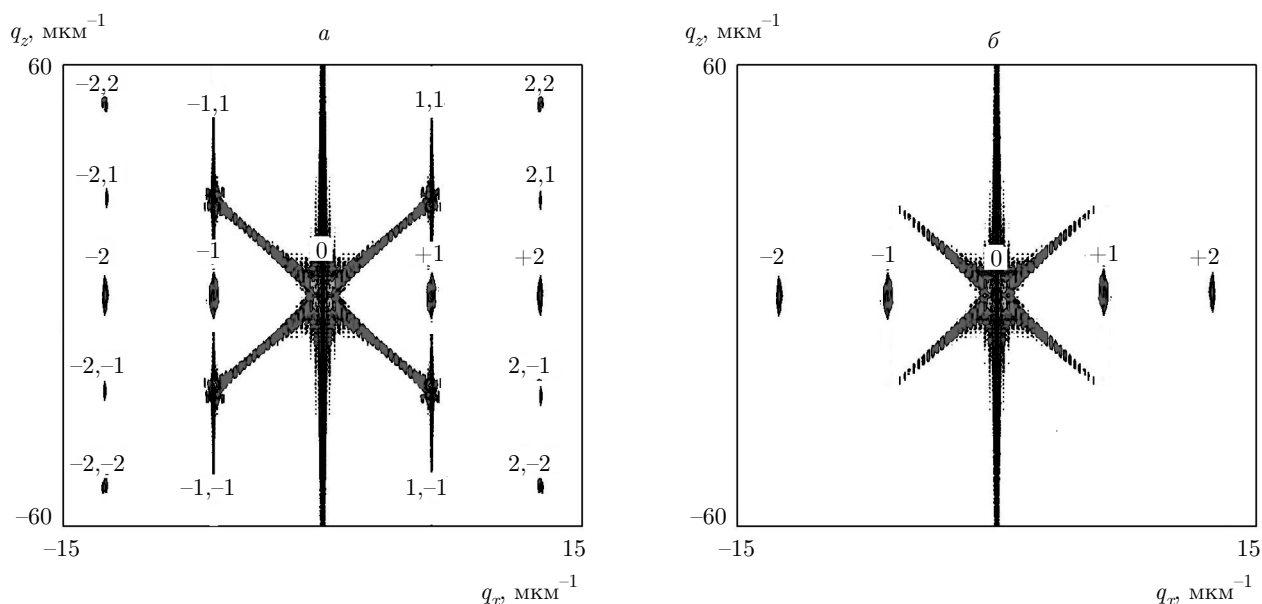


Рис. 8. Карты распределения интенсивности рассеяния от кристалла кремния с вольфрамовой (а) и оксидной (б) поверхностными решетками. Ширина падающего и отраженного рентгеновских пучков 100 мкм

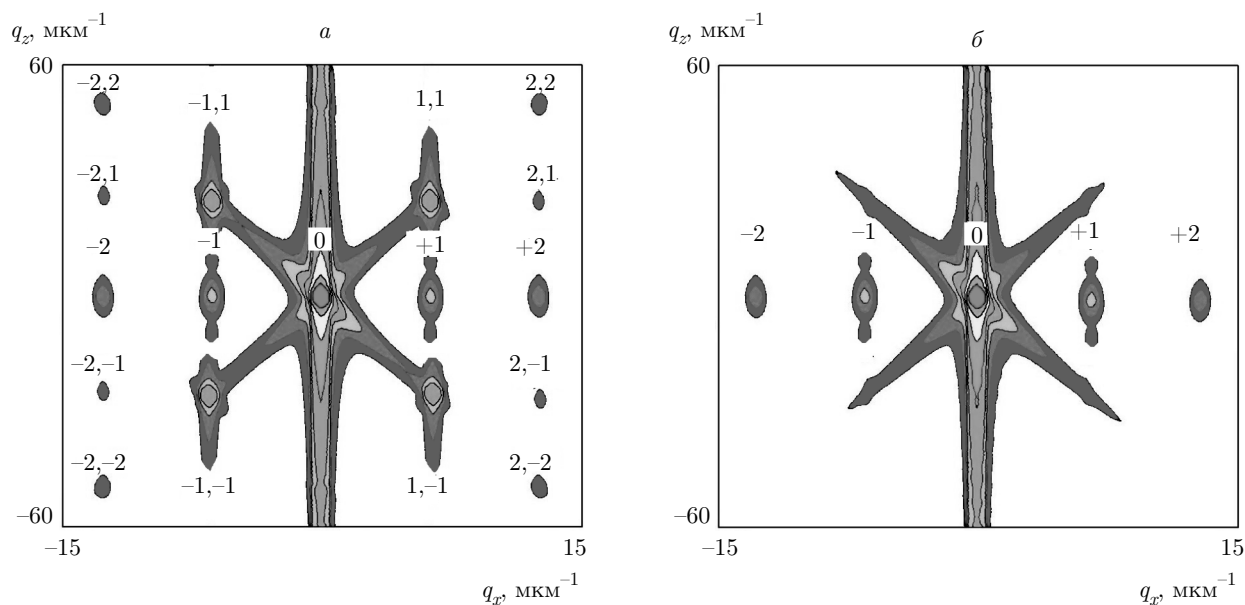


Рис. 9. Карты распределения интенсивности рассеяния от кристалла кремния с вольфрамовой (а) и оксидной (б) поверхностными решетками с учетом инструментальной функции. Ширина падающего и отраженного рентгеновских пучков 100 мкм

наблюдаемое в эксперименте различие в угловых распределениях интенсивности рассеяния от кристалла кремния с вольфрамовой [9] и оксидной [7] поверхностной решеткой. В зависимости от граничных условий и вида периодических полей упругих деформаций теория может быть использована для описания динамической дифракции рентгеновских лучей и тепловых нейтронов в кристаллах, про-

дулированных поверхностной акустической волной [4, 5, 21], доменных структурах [12], системах с поверхностным рельефом с канавками, заполненными, другим материалом [16], и т. д. Следует также подчеркнуть, что разработанный подход оперирует с пространственно-ограниченными рентгеновскими пучками, что может существенно облегчить анализ экспериментальных данных, сопровождаемый

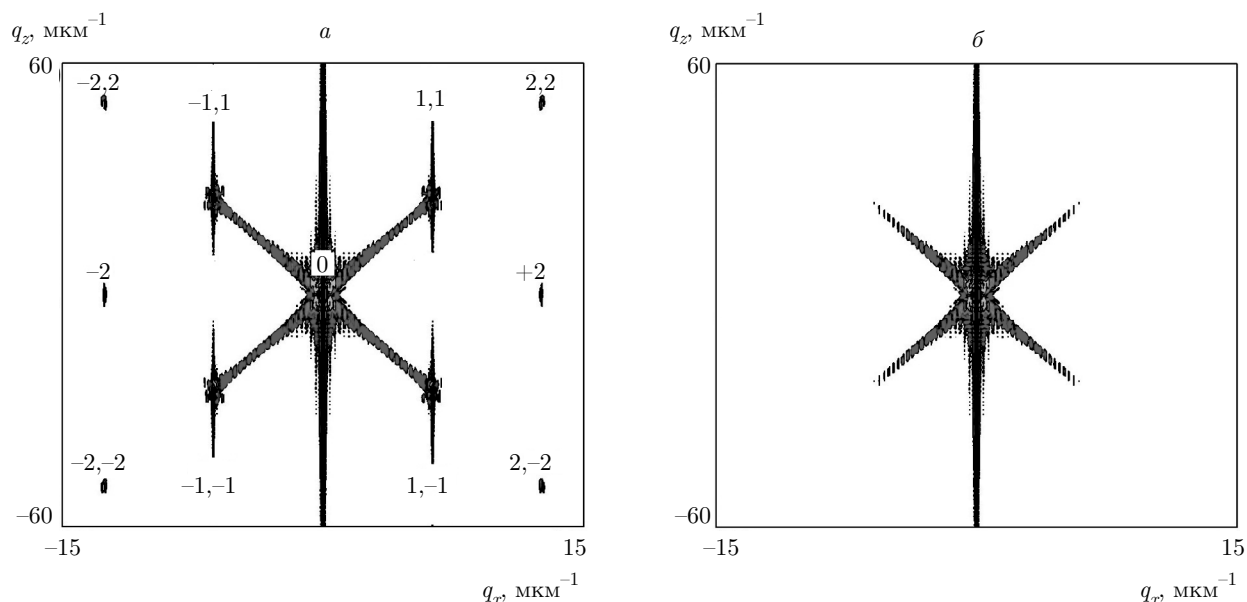


Рис. 10. Карты распределения интенсивности рассеяния от кристалла кремния с вольфрамовой (а) и оксидной (б) поверхностными решетками без учета деформаций в подложке. Ширина падающего и отраженного рентгеновских пучков 100 мкм

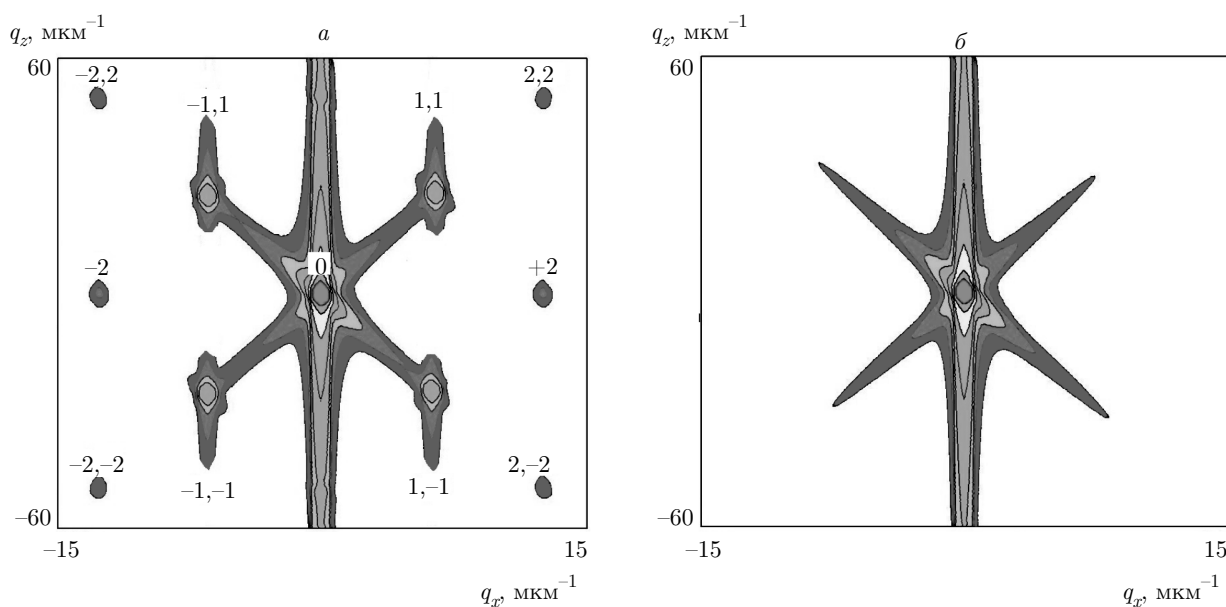


Рис. 11. Карты распределения интенсивности рассеяния от кристалла кремния с вольфрамовой (а) и оксидной (б) поверхностными решетками без учета деформаций в подложке и с учетом инструментальной функции. Ширина падающего и отраженного рентгеновских пучков 100 мкм

численным моделированием или в рамках строгого решения обратных задач рентгеновской дифракции [43].

Финансирование. Работа выполнена при час-

тичной финансовой поддержке программы фундаментальных исследований Уральского отделения Российской академии наук (проект № 18-10-2-23) и Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 17-02-00090-а).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Возникающие в подложке упругие деформации можно рассчитать с использованием соотношений (33)

$$\varepsilon_{xx} = \frac{1}{E_s} [\sigma_{xx} - \nu_s \sigma_{zz}] =$$

$$= -\frac{2F_f}{\pi E_s} \left(\frac{x^3}{(x^2 + z^2)^2} - \nu_s \frac{xz^2}{(x^2 + z^2)^2} \right), \quad (\text{A.1})$$

$$\varepsilon_{zz} = \frac{1}{E_s} [\sigma_{zz} - \nu_s \sigma_{xx}] =$$

$$= -\frac{2F_f}{\pi E_s} \left(\frac{xz^2}{(x^2 + z^2)^2} - \nu_s \frac{x^3}{(x^2 + z^2)^2} \right). \quad (\text{A.2})$$

Зная связь деформаций с полями атомных смещений $\varepsilon_{xx} = du_x/dx$, $\varepsilon_{zz} = du_z/dz$, получаем

$$u_x = -\frac{2F_f}{\pi E_s} \left(\frac{x^2 + \nu_s z^2}{2(x^2 + z^2)} + \frac{1}{2} \ln |x^2 + z^2| \right), \quad (\text{A.3})$$

$$u_z = \frac{2F_f}{\pi E_s} \times$$

$$\times \left((1 + \nu_s) \frac{zx}{2(x^2 + z^2)} - (1 - \nu_s) \frac{1}{2} \operatorname{arctg} \frac{z}{x} \right). \quad (\text{A.4})$$

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Iida and K. Kohra, Phys. Stat. Sol. (a) **51**, 533 (1979).
2. V. V. Aristov, A. I. Erko, A. Yu. Nikulin et al., Opt. Commun. **58**, 300 (1986).
3. V. V. Aristov, A. Yu. Nikulin, A. A. Snigirev et al., Phys. Stat. Sol. (a) **95**, 81 (1986).
4. R. Tucoulou, R. Pascal, M. Brunel et al., J. Appl. Cryst. **33**, 1019 (2000).
5. V. I. Punegov, Ya. I. Nesterets, and D. V. Roshchupkin, J. Appl. Cryst. **43**, 520 (2010).
6. V. V. Aristov, S. M. Kuznetsov, A. V. Kouyumchyan et al., Phys. Stat. Sol. (a) **125**, 57 (1991).
7. P. Ershov, S. Kuznetsov, I. Snigireva et al., J. Appl. Cryst. **46**, 1475 (2013).
8. D. V. Roshchupkin, D. V. Irzhak, S. L. Shabel'nikova et al., J. Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques **7**, 663 (2013).
9. D. V. Irzhak, M. A. Knyasev, V. I. Punegov et al., J. Appl. Cryst. **48**, 1159 (2015).
10. A. Erko and A. Firsov, Proc. SPIE **5539**, 148 (2004).
11. В. И. Пунегов, С. И. Колосов, Письма в ЖЭТФ **102**, 159 (2015).
12. M. Bazzan, C. Sada, N. Argiolas et al., J. Appl. Phys. **106**, 104121 (2009).
13. V. V. Aristov, V. N. Mordkovich, A. Yu. Nikulin et al., Phys. Stat. Sol. (a) **120**, K1 (1990).
14. A. Daniel, Y. Zhuang, J. Stangl et al., Proceedings GMe Forum (2001), p. 165.
15. Y. Ezzaidi, G. Gaudeau, S. Escoubas et al., Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **284**, 23 (2012).
16. M. Eberlein, S. Escoubas, M. Gailhanou et al., Phys. Stat. Sol. (a) **204**, 2542 (2007).
17. S. Takagi, Acta Cryst. **15**, 1311 (1962).
18. V. I. Punegov, K. M. Pavlov, A. V. Karpov et al., J. Appl. Cryst. **50**, 1256 (2017).
19. В. И. Пунегов, ЖЭТФ **154**, 248 (2018).
20. Shin-Lin Chang, *Multiple Diffraction of X-Rays in Crystals*, Springer-Verlag, Berlin (1984).
21. В. И. Пунегов, Д. В. Рощупкин, Кристаллография **57**, 29 (2012).
22. A. Authier, *Dynamical Theory of X-Ray Diffraction*, Oxford University Press, New York (2001).
23. T. Arai, H. Nakaie, K. Kamimura et al., J. Mat. Sci. Chem. Engin. **4**, 29 (2016).
24. S. C. Jain, H. E. Maes, K. Pinardi et al., J. Appl. Phys. **79**, 8145 (1996).
25. G. G. Stoney, Proc. R. Soc. London, Ser. A **82**, 172 (1909).
26. Z. Zhang, J. Yoon, and Z. Suo, Appl. Phys. Lett. **89**, 261912 (2006).
27. A. Blech and E. S. Meieran, J. Appl. Phys. **38**, 2913 (1967).
28. S. M. Hu, Appl. Phys. Lett. **32**, 5 (1978).
29. S. M. Hu, J. Appl. Phys. **50**, 4661 (1979).
30. S. Isomae, J. Appl. Phys. **52**, 2782 (1981).
31. E. Suhir, J. Appl. Mech. **53**, 657 (1986).
32. A. Atkinson, T. Johnson, A. H. Harker et al., Thin Solid Films **274**, 106 (1996).
33. I. De Wolf, M. Ignat, G. Pozza et al., J. Appl. Phys. **85**, 6477 (1999).

- 34.** C.-H. Hsueh, J. Appl. Phys. **88**, 3022 (2000).
- 35.** S. P. Wong, H. J. Peng, and S. Zhao, Appl. Phys. Lett. **79**, 1628 (2001).
- 36.** S. C. Jain, A. H. Haker, A. Atkinson et al., J. Appl. Phys. **78**, 1630 (1995).
- 37.** A. Loubens, R. Fortunier, R. Fillit et al., Microelectr. Engin. **70**, 455 (2003).
- 38.** J. Vanhellefont, S. Amelinckx, and C. Claeys, J. Appl. Phys. **61**, 2170 (1987).
- 39.** S. Stepanov and R. Forrest, J. Appl. Cryst. **41**, 958 (2008).
- 40.** D. R. França and A. Blouin, Meas. Sci. Technol. **15**, 859 (2004).
- 41.** Y.-L. Shen, S. Suresh, and I. A. Blech, J. Appl. Phys. **80**, 1388 (1996).
- 42.** В. И. Пунегов, А. А. Ломов, ЖЭТФ **154**, 278 (2018).
- 43.** В. И. Пунегов, УФН **185**, 449 (2015).