

на правах рукописи

УДК 548.4+548.734

НИКОЛАЕВ ВЛАДИМИР ВЛАДИМИРОВИЧ

**ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНЫХ ИСКАЖЕНИЙ НА
ОТРАЖАЮЩУЮ СПОСОБНОСТЬ КРИСТАЛЛА
ПРИ ДИНАМИЧЕСКОЙ ЛАУЭ-ДИФРАКЦИИ
РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ**

01.04.07 - физика твердого тела

А в т о р е ф е р а т

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

КИЕВ

1993

11820.570

Работа выполнена в Институте физики полупроводников
АН Украины

Научные руководители:

доктор физико-математических наук Л.И. Даценко,
доктор физико-математических наук В.И. Хрупа

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук Н.Н. Новиков,
доктор физико-математических наук О.Н. Григорьев

Ведущее предприятие:

Черновицкий государственный университет

Защита состоится "22" ноября 1993 г. в _____
на заседании специализированного совета по защите диссертаций Д 068.18.15. при Киевском государственном университете по адресу: 252127, Киев-127, проспект Глушкова 6, Физический факультет КГУ.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке КГУ

Автореферат разослан "21" октября 1993 г.

Ученый секретарь
специализированного совета
доктор
физико-математических наук

Б.А. Охрименко

ЛНБ України ім. В. Стефаника
00810716 (N)

ЛНБ ім. В. Ст
АН України

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Диссертация посвящена экспериментальному исследованию закономерностей влияния структурных дефектов различного типа на интегральную отражающую способность кристалла, а также проверке результатов динамической теории дифракции излучений на кристаллах с хаотически распределенными дефектами. Полученные данные использованы для разработки экспрессных неразрушающих методов структурной диагностики.

Метод исследования: одно- и двукристалльная рентгеновская дифрактометрия и рентгеновская топография, аналитические и численные расчеты на базе динамической теории дифракции рентгеновских лучей (РЛ).

Актуальность темы. Известно, что характеристики кристаллических материалов и приборов, создаваемых на их основе, в значительной мере определяются совершенством кристаллической структуры. Поэтому структурная диагностика реальных кристаллов является актуальной задачей физики твердого тела.

В настоящее время основной объем информации о дефектах кристаллической решетки получен с помощью дифракционных методов, физическую основу которых составляет рассеяние коротковолновых излучений кристаллической решеткой. Наряду с прямыми дифракционными методами наблюдения дефектов (электронная микроскопия, рентгеновская топография и др.) широкое распространение получили интегральные методы структурной диагностики. Их отличительной особенностью является возможность получения информации об усредненных по облучаемому объему характеристиках дефектных структур, в значительной мере определяющих макроскопические свойства твердых тел. Источником информации при этом служит угловое положение и форма интерференционного максимума или пространственное распределение интенсивности дифрагированного пучка. При дифракции на достаточно совершенных кристаллах важным структурно-чувствительным параметром является интегральная отражающая способность (ИОС) кристалла.

В последние годы достигнут значительный прогресс в понимании механизмов дифракционного взаимодействия излучений с неидеальной кристаллической решеткой. Однако процесс создания общей теории рассеяния на реальных кристаллах еще не завершен. В настоящее время разработан ряд подходов, позволяющих более или менее адекватно описывать процесс дифракции на кристаллах с искажениями различно-

го типа. Поэтому значительный интерес представляет проверка основных результатов имеющихся вариантов динамической теории и определения границ применимости полученных выражений.

Цель работы состояла в экспериментальном изучении закономерностей динамической дифракции РЛ на кристаллах кремния с объемными или поверхностными искажениями структуры, а также проверке выражений для ИОС реального динамически рассеивающего кристалла. Кроме того, решалась задача развития дифрактометрических методов определения интегральных характеристик дефектов.

Исследования проводились при варьировании степени структурного совершенства исследуемых кристаллов и уровня поглощения РЛ.

Научная новизна определяется совокупностью результатов, сформулированных в заключении диссертационной работы и приведенных в конце автореферата.

Основные, существенно новые результаты состоят в следующем:

1. Экспериментально показано, что в случае тонких ($h = \mu t / \gamma \ll 1$, μ - нормальный коэффициент поглощения, t - толщина кристалла, $\gamma = \cos \theta_B$, θ_B - угол Брэгга) динамически рассеивающих кристаллов величина обусловленного диффузным рассеянием РЛ на дефектах относительного прироста ИОС, по сравнению с идеальным образцом, возрастает с увеличением порядка отражения. Это обстоятельство может быть использовано для увеличения чувствительности дифрактометрических методов. В бездислокационных кристаллах кремния изучены ростовые искажения структуры, которые не выявляются топографическим методом Ланга.

2. Показано, что используя рефлексы разных порядков от систем кристаллографически неэквивалентных плоскостей, можно выборочно установить доминирующий тип деформационных полей для фиксированных кристаллографических направлений и оценить степень анизотропии искажений решетки.

3. Выявлены условия перехода от динамического к кинематическому режиму дифракции РЛ на кристаллах S_i , содержащих ростовые дислокации. Для рефлексов разных порядков найдены значения критической плотности дислокаций, при которой происходит подавление динамических эффектов рассеяния. Определены границы применимости выражений динамической теории дифракции для дислокационных кристаллов.

4. Экспериментально установлено, что эффект аномального прохождения некогерентно рассеянных волн оказывает существенное влияние

на процесс рассеяния РЛ дислокационными кристаллами в области промежуточных ($1 \leq h \leq 10$) и больших ($h \gg 10$) толщин.

5. Показано, что декорирование ростовых дислокаций примесными атомами путем диффузионного отжига может приводить как к увеличению, так и к уменьшению ИОС кристалла, что может восприниматься при расчетах как эффективное изменение плотности дислокаций.

6. Установлено существенное влияние упругих напряжений кристаллической матрицы, возникающих в процессе механической обработки поверхности кристалла, на комплекс дифракционных параметров.

Научная и практическая значимость работы. Полученные результаты развивают представления о влиянии искажений кристаллической структуры на интегральные характеристики динамической дифракции РЛ.

Значительный интерес представляют результаты экспериментальной проверки выражений для ИОС реального кристалла и определение границ их применимости.

Обоснованы критерии оптимизации условий дифрактометрического анализа, позволяющие расширить функциональные возможности методов структурной диагностики. Разработанные методы определения интегральных характеристик дефектных структур, возникающих в процессе роста кристаллов и различных физических воздействий (термообработка, механическая обработка поверхности), представляют интерес для совершенствования технологии выращивания и обработки кристаллических материалов.

Методы контроля структурного совершенства монокристаллического кремния переданы для использования в условиях производства на НПО "Кристалл" (г.Киев) и "Родон" (г.Ивано-Франковск). Полученные результаты используются в Институте физики полупроводников АН Украины и в Институте металлофизики АН Украины. Результаты диссертационной работы могут быть также использованы в Институте физики твердого тела АН России, Московском государственном университете им. М.В.Ломоносова, на НПО "Интеграл" (Беларусь).

На защиту выносятся следующие положения:

1. При лауэ-дифракции в условиях слабого поглощения РЛ величина относительного прироста интегральной отражающей способности реального кристалла, по отношению к идеальному, существенно увеличивается с ростом величины вектора дифракции, что позволяет повысить чувствительность интегральных методов структурной диагностики.

2. При дифракции РЛ в режиме эффекта Бормана существенное влияние на величину интегральной отражающей способности кристалла с распределенными в объеме ростовыми дислокациями оказывает эффект аномального прохождения некогерентно рассеянных волн.

3. В кристаллах с ростовыми дислокациями величина статического фактора Дебая-Валлера может как увеличиваться, так и уменьшаться, в зависимости от степени насыщения дислокаций примесными атомами.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы были приведены в докладах на I Республиканской конференции "Динамическое рассеяние рентгеновских лучей искаженными кристаллами" (Киев, 1984), на 5 Международной конференции "Свойства и структура дислокаций в полупроводниках" (Москва, 1986), на 2 Совещании по всесоюзной межвузовской программе "Рентген" (Черновцы, 1987), на 4 Всесоюзной конференции "Когерентное взаимодействие излучений с веществом" (Юрмала, 1988), на 12 Европейском кристаллографическом конгрессе (Москва, 1989), на 3 Совещании по всесоюзной межвузовской комплексной программе "Рентген" (Черновцы, 1989), на 3 Всесоюзной конференции по физике и технологии полупроводниковых пленок (Ивано-Франковск, 1990), на 2-й конференции по динамическому рассеянию рентгеновских лучей в кристаллах с динамическими и статическими искажениями (Кацивели, 1990), а также обсуждались на научных семинарах Института полупроводников АН Украины.

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 20 печатных работ, а также получено 4 авторских свидетельства. Список основных публикаций представлен в конце автореферата.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, шести глав, заключения, включающего основные результаты и выводы, списка литературы из 151 наименования и приложения. Общий объем диссертации - 217 страниц машинописного текста, включая 40 рисунков и 10 таблиц.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении дан краткий анализ состояния проблемы на современном этапе, сформулирована цель работы, обоснована актуальность поставленной задачи, научная новизна и практическая ценность полученных результатов, изложены положения, выносимые на защиту. Введение также содержит сведения о структуре и объеме диссертации, содержит перечень опубликованных материалов.

Первая глава содержит обзор литературных источников, касающихся вопросов теоретического и экспериментального исследования закономерностей динамической дифракции коротковолновых излучений на неидеальных кристаллах. В соответствии с поставленной задачей рассмотрен вопрос о механизмах влияния статических искажений различного типа (распределенных или локализованных) на интегральную отражающую способность кристалла. Анализ литературных данных подтверждает актуальность поставленной задачи.

Вторая глава - методическая, посвящена изложению техники измерений интегральной интенсивности лауэ-дифрагированных пучков и математической обработки полученных результатов.

Основной объем экспериментальных данных в диссертационной работе получен методами двукристалльной рентгеновской спектрометрии. Меры, предпринятые по оптимизации условий эксперимента, позволили уменьшить загрязненность характеристических линий гармониками тормозного спектра до $3 + 5\%$.

В ходе эксперимента применялась оригинальная система регистрации интенсивности РЛ, в качестве основных элементов включающая радиометры и анализаторы спектра, а также специально разработанные сканирующие устройства, позволяющие осуществлять непрерывное или пошаговое (с минимальным шагом $0,2''$) вращение исследуемого образца вокруг брэгговского максимума.

Показано, что дисперсия, обусловленная разными порядками отражения РЛ от кристалл-монокроматора и исследуемого образца, существенно изменяющая форму дифракционного максимума, не оказывала влияния на измеряемую величину ИОС. Это позволило заключить, что все наблюдаемые экспериментально закономерности поведения ИОС реальных кристаллов обусловлены влиянием структурных искажений, а не аппаратурными факторами.

При проверке формул динамической теории дифракции использовался метод сопоставления измеренных и рассчитанных толщинных зависимостей ИОС.

Рассмотрена техника измерения толщинных зависимостей путем химического утонения и наклона (поворота) исследуемого образца вокруг оси, перпендикулярной вектору дифракции, а также методы статистической обработки данных и оценки корреляции используемых теоретических моделей с экспериментом.

Рассмотрены особенности измерений ИОС в области сильного по-

лощения РЛ. Для решения этой задачи был использован метод скачков интенсивности вблизи К-края поглощения, суть которого состоит в измерении интенсивности дифрагированных пучков в коротковолновой и длинноволновой области, вблизи К-края поглощения исследуемого кристалла.

Наряду с дифрактометрическими методами в работе, с целью получения независимой информации об объемных и поверхностных искажениях кристаллической структуры, использовались также методы рентгеновской топографии и избирательного травления.

Третья глава диссертации посвящена исследованию закономерностей лауэ-дифракции РЛ на тонких кристаллах с дефектами кулоновского типа.

Экспериментальная проверка формул, описывающих ИОС тонкого кристалла с хаотически распределенными дефектами кулоновского типа, осуществлялась путем сопоставления измеренных и рассчитанных толщинных зависимостей ИОС для рефлексов разных порядков. Объектами исследования служили кристаллы Sz_2 , подвергнутые высокотемпературной обработке.

Расчет осуществлялся по следующей формуле:

$$R_i = \exp(-z/2) [R_i^p \cdot \exp(-L) \cdot \exp(-z/2) + R_D], \quad (I)$$

где первое слагаемое описывает когерентную компоненту ИОС, а второе - диффузную, $z = -M_{ds} t / \lambda$, M_{ds} - коэффициент дополнительных потерь энергии РЛ при диффузном рассеянии, $\exp(-L)$ - статический фактор Дебая-Валлера, R_i^p - ИОС идеального кристалла.

Высокие значения корреляционного параметра R_k для всех рефлексов ($R_k \geq 0,99$) позволили заключить, что в условиях слабого поглощения используемая теоретическая модель корректно описывает экспериментальные данные. Последнее обстоятельство позволило рассчитать толщинные зависимости когерентной и диффузной компонент ИОС.

Анализ этих зависимостей показал, что в кристаллах с микродефектами имеет место увеличение относительного вклада диффузной составляющей в полную ИОС кристалла с ростом порядка отражения, что может быть использовано для повышения чувствительности дифрактометрического метода (рис. I, а). Данное положение было использовано для исследования весьма слабых, в том числе не выявляемых стандартными топографическими методами, ростовых искажений структуры, а также степени однородности их распределения в объеме кри-

сталла. В частности, анализ диаграмм $R_i(H)$ (рис. I, а) позволил выявить различия в уровне структурного совершенства кристаллов Si , выращенных методами Чохральского и бестигельной зонной плавки, отчетливо проявляющиеся на рефлексах высоких порядков (рис. I, б).

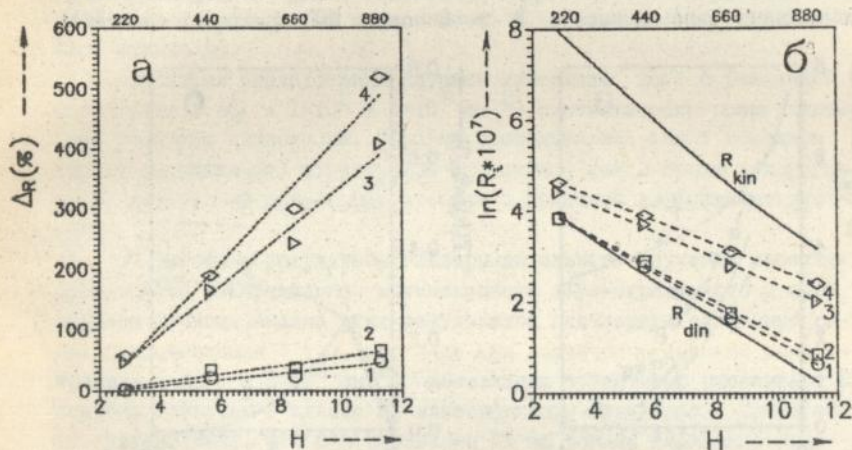


Рис. 1 Относительный прирост ИОС (а) и интегральная отражающая способность (б) рефлексов разных порядков от кристаллов Si , выращенных бестигельной зонной плавкой (обр. 2-4) и методом Чохральского (обр. 1) и 2 - исходное структурное состояние, 3 - отжиг 3 ч. при $850^{\circ}C$; 4 - то же 3 ч. при $1100^{\circ}C$, $Mo K_{\alpha 1}$ - излучение, $t = 406 \pm 5$ мкс.

В данной главе также предложена и обоснована простая методика определения интегральных характеристик дефектов по соотношению интенсивностей двух рефлексов разных порядков от заданной системы кристаллографических плоскостей. Результаты ее использования хорошо согласуются с данными независимых исследований.

Четвертая глава посвящена экспериментальному изучению ИОС для кристаллов Si и Ge с дефектами кулоновского типа или ростовыми дислокациями в области промежуточного ($I < h < 10$) и сильного ($h \gg 10$) поглощения РЛ. Измерялись толщинные зависимости ИОС с использованием характеристического $CuK_{\alpha 1}$ - или тормозного ($\lambda_1 = 1,340 \text{ \AA}$, $\lambda_2 = 1,102 \text{ \AA}$) излучения.

Установлено, что координата h_0^* точки пересечения толщинных зависимостей ИОС для совершенного и дефектного кристаллов за-

висит от уровня искажений кристаллической решетки, т.е. является структурно-чувствительным параметром.

Изучен характер толщинных зависимостей когерентной и диффузной компонент ИОС в области переходных толщин. Анализ полученных зависимостей показал, что для кристаллов с мелкими дефектами кулоновского типа начиная с $h \approx 6$ полная ИОС кристалла практиче-

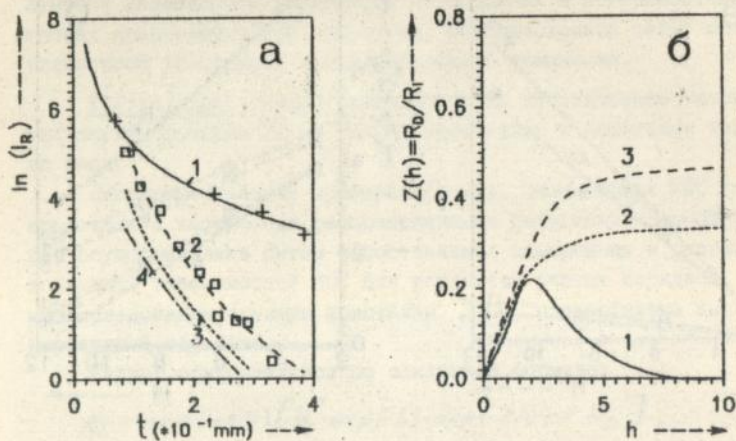


Рис. 2. Аномальное прохождение диффузно рассеянных волн при дифракции РЛ на дислокационных кристаллах.

а) - толщинные зависимости ИОС дислокационного кристалла Ge ($N_d = 2.5 \cdot 10^5 \text{ см}^{-2}$). 1- $R_c^f(h)$, 2- $R_c^i(h)$, 3- когерентная компонента $R_g(h)$, 4- диффузная компонента $R_p(h)$. Рефлексо 220, $\lambda = 1.131 \text{ \AA}$.

б) - соотношение диффузной компоненты и полной ИОС кристаллов Si. 1- 6/А Si, отжиг 1 ч. при 850°C , 2- то же, отжиг 3 ч. при 1100°C , 3- дислокационный Si ($N_d = 1.4 \cdot 10^5 \text{ см}^{-2}$)

ски полностью определяется когерентной компонентой ИОС. Принципиально иная картина наблюдается для кристаллов с крупными дефектами (кластеры и дислокационные петли), а также с ростовыми дислокациями (рис. 2). В данном случае имеет место эффект аномального прохождения диффузно-рассеянных волн, в значительной мере определяющих картину дифракции.

Совпадение (с точностью до 15%) значений L , рассчитанных для дислокационных кристаллов Ge, на основании анализа толщинных зависимостей ИОС, а также в области слабого поглощения РЛ, свидетельствует в пользу корректности использованных схем расчета.

В пятой главе диссертации рассмотрены закономерности влияния хаотически распределенных дислокаций на полную ИОС слабопоглощающих РЛ кристаллов, а также на когерентную и диффузную компоненты рассеяния. Выполнена экспериментальная проверка формул динамической теории (в случае симметричной и несимметричной лауэ-дифракции) и определены границы их применимости в асимптотическом случае тонкого кристалла.

Объектами исследования служили кристаллы Si с различной плотностью ($N_d = 1 \times 10^2 + 3 \times 10^7 \text{ см}^{-2}$) статистически распределенных ростовых дислокаций. Образцы исследовались как в исходном (после выращивания) структурном состоянии, так и после декорирования дислокаций примесными атомами в процессе диффузионного отжига.

Рассмотрены результаты экспериментального изучения характера углового распределения интенсивности лауэ-отраженного и прошедшего пучков. Анализ этих результатов подтвердил сделанные ранее предположения о том, что даже при достаточно высоких концентрациях ($N_d = 5 \times 10^5 \text{ см}^{-2}$) дислокации эффективно рассеивают РЛ подобно дефектам I класса по классификации Кривоглаза. Кроме того установлено, что при рассеянии РЛ на тонких дислокационных кристаллах необходим учет дополнительного ослабления дифрагирующих РЛ за счет диффузного рассеяния на дефектах, хотя ранее предполагалось, что при дифракции на подобных объектах этим механизмом можно пренебречь.

Совокупность полученных данных, в целом, подтверждает корректность использования формул динамической теории для описания ИОС тонкого дислокационного кристалла. С целью проведения строгих количественных оценок корреляции используемой математической модели с экспериментом были исследованы толщинные зависимости ИОС при симметричной и несимметричной лауэ-дифракции. Проверка формул осуществлялась путем сопоставления теоретических и экспериментальных толщинных зависимостей ИОС, аналогично тому, как это было сделано ранее для дефектов кулоновского типа. Показано, что для описания ИОС дислокационных кристаллов можно воспользоваться аппаратом, развитым для случая дефектов кулоновского типа. Показано, что при $N_d \geq 10^4 \text{ см}^{-2}$ величина полной ИОС в значительной мере определяется диффузной компонентой, которая в тонких кристаллах с хорошим приближением может быть описана в рамках кинематического приближения. Когерентная же компонента сильно ослаблена по сравнению с совершенным кристаллом (рис. 3,а). При этом рассчитанные значе-

ния коэффициента потерь энергии за счет диффузного рассеяния РЛ на дислокациях оказались сравнимы по величине с фотоэлектрическими потерями энергии ($M_{ds} = 0,5 + 0,7 M$).

Установлено также, что соотношение вкладов когерентной и диффузной компонент существенным образом зависит от параметров асимметрии, что может приводить к изменению чувствительности ИОС к искажениям решетки.

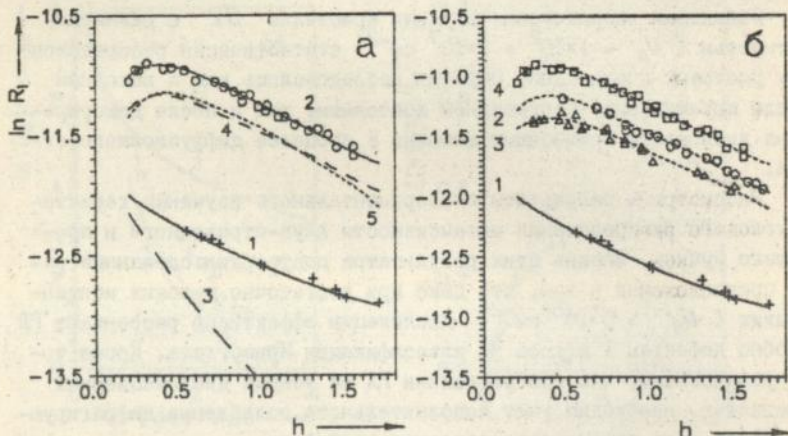


Рис. 3. Толщинные зависимости интегральной отражающей способности дислокационных кристаллов Si ($N_d = 5.0 \cdot 10^4 \text{ см}^{-2}$). Мо K_{α} -излучение. а) - толщинные зависимости полной ИОС и ее компонент. 1, 2 - ИОС совершенного $R_i(h)$ и дислокационного $R_i(h)$ кристаллов; 3, 4 - когерентная $R_B(h)$ и диффузная $R_D(h)$ компоненты ИОС дислокационного кристалла; 5 - $R_i^D(h)$ - (расчет в соответствии с кинематической теорией). Рефлекс 220. б) - Влияние диффузионного отжига на ИОС дислокационного кристалла. 1 - совершенный Si (образец сравнения), 2 - дислокационный кристалл в исходном структурном состоянии, 3 - то же отжиг 1 час при 850°C (в присутствии Cu), 4 - то же отжиг 3 часа. Рефлекс 400

Предложена и апробирована методика определения интегральных дифракционных характеристик (L , M_{ds}) и расчета плотности дислокаций N_d в образце фиксированной толщины по соотношению интенсивностей симметричного R_i^S и асимметричного R_i^{AS} рефлексов. Результаты расчета, приведенные в таблице, свидетельствуют об удовлетворительной корреляции между рассчитанными значениями N_d и данными метода избирательного травления.

Экспериментально изучены закономерности перехода от динамического к кинематическому режиму дифракции с ростом порядка от-

Ориентация поверхности (hkl)	Угол асимметрии (φ)	h	$R_i^s \cdot 10^6$	$R_i^{4s} \cdot 10^6$	$L \cdot 10^2$	$N_d \cdot 10^5 \text{ см}^{-2}$	
						расчет	избирательное травление
(III)	54°44'	0,58	8,27	8,42	0,6	0,4	0,5
(III)	54°44'	0,58	7,44	9,44	1,5	0,9	0,5
(II2)	60°	0,72	6,37	6,23	2,4	1,4	1,0

ражения и концентрации дислокаций, сопровождающегося полной потерей чувствительности ИОС к дальнейшему увеличению степени искажений решетки. Показано, что наличие дислокаций не приводит к полному подавлению динамических эффектов дифракции вплоть до некоторой критической плотности дислокаций N_{d0}^* . Установлено, что с ростом порядка рефлекса происходит резкое уменьшение N_{d0}^* . Так при увеличении порядка отражения в 4 раза (рефлексы 220 и 880) значения N_{d0}^* уменьшаются приблизительно на 2 порядка (от $\sim 10^7$ до $\sim 10^5 \text{ см}^{-2}$). Изучен характер зависимостей статического фактора от плотности дислокаций и величины вектора обратной решетки и найдены критерии оптимизации условий рентгенодифракционного эксперимента при исследовании структурного совершенства дислокационных кристаллов.

Экспериментально исследовано влияние декорирующей примеси на характеристики динамической лауэ-дифракции и показано, что ИОС кристаллов (а также величина статического фактора Дебая-Валлера) существенным образом зависит от степени насыщения дислокаций примесными атомами (рис. 3,6). При этом в процессе диффузионного отжига может наблюдаться как уменьшение ИОС и L (отжиг I ч при 900°C в присутствии меди), сопровождающееся размытием и ослаблением топографического контраста, так и увеличение их при дальнейшей термообработке (3 ч при 900°C). В данном случае наблюдалось значительное усиление контраста отдельных дислокаций на топограммах по Лангу.

Сделано предположение о том, что взаимодействие примесных атомов с атмосферой Котрелла, сформировавшейся вокруг дислокаций в процессе роста кристалла, приводит к изменению поля деформаций, создаваемых дислокациями, и может быть воспринято, как изменение

их эффективной концентрации, определяемой на основании данных рентгенодифракционного эксперимента. Поэтому металлографическое значение N_d не в полной мере характеризует степень структурного совершенства таких образцов.

В шестой главе изложены результаты экспериментального исследования приповерхностных нарушений структуры на ИОС тонкого кристалла. Объектами исследования служили кристаллы Si, структура которых в исходном (после выращивания) состоянии была достаточно совершенной. Нарушенный поверхностный слой (НПС) создавался путем идентичной двухсторонней механической обработки поверхности свободным или связанным абразивом с размером зерна от 5 до 90 мкм. Это позволяло свести к минимуму возможное влияние объемных дефектов и макроскопического изгиба образца на измеряемые параметры. В ходе исследований было установлено, что в таких объектах наблюдается значительное изменение формы дифракционных кривых отражения и прохождения, сопровождающееся существенным увеличением ИОС за счет некогерентной компоненты рассеяния, формирующейся в зоне НПС. С ростом порядка отражения происходит увеличение вклада некогерентной компоненты в ИОС кристалла, что объясняется уменьшением влияния экстинкции на рассеивающую способность нарушенного слоя и повышением чувствительности ИОС к приповерхностным искажениям структуры. В тонких кристаллах Si с сильно нарушенными поверхностями для рефлексов высоких порядков наблюдается переход от динамического к кинематическому режиму дифракции. При этом, удаление поверхностных концентраторов напряжений путем сплошного травливания НПС приводит к значительной релаксации упругих напряжений, сопровождающейся резким уменьшением ИОС и восстановлением формы кривой качания (в проходящем пучке). Это обстоятельство свидетельствует о том, что существенный вклад в некогерентную компоненту ИОС дает рассеяние в зоне упругих напряжений кристаллической матрицы.

На основании полученных данных разработана методика экспрессного определения интегральных характеристик (толщины и рассеивающей способности) нарушенного поверхностного слоя.

В заключении диссертации приведены наиболее существенные результаты и выводы.

1. При исследовании влияния структурных искажений, возникающих как в процессе роста кристаллов, так и при различных термо-

обработках, на отражающую способность рефлексов разных порядков в области слабого поглощения РЛ показано, что повышение чувствительности к дефектам для рефлексов высоких порядков обусловлено увеличением вклада диффузной составляющей в полную ИОС кристалла. Анализ интегральных характеристик (L , M_{ds}) при использовании рефлексов высоких порядков позволяет изучать весьма слабые искажения структуры ($L \approx 10^{-3}$), не выявляемые топографически (методом Ланга).

Установлено, что, используя разные порядки отражений от различных систем кристаллографических плоскостей, на основании зависимостей величины статического фактора Дебая-Валлера от порядка рефлекса можно выборочно установить характер деформационных полей для фиксированных кристаллографических направлений и оценить степень анизотропии искажений кристаллической решетки.

Обоснована методика расчета интегральных характеристик по соотношению величин ИОС лауэ-отражений разных порядков.

2. Выполнена экспериментальная проверка формул динамической теории дифракции для интегральной отражающей способности тонкого неидеального кристалла в случае симметричной и асимметричной лауэ-дифракции. Показано, что для кристаллов кремния с хаотически распределенными дислокациями или микродефектами в практически важном диапазоне $10^{-3} < L < 10^{-1}$ используемая теоретическая модель хорошо описывает экспериментальные данные, о чем свидетельствуют высокие значения корреляционного параметра R_k .

Обоснован метод определения интегральных характеристик дефектной структуры в образцах фиксированной толщины, основанный на измерении интенсивностей симметричного и асимметричного рефлексов.

3. Впервые экспериментально исследованы закономерности перехода от динамического к кинематическому режиму лауэ-дифракции РЛ на тонких кристаллах Si с хаотически распределенными ростовыми дислокациями. Для рефлексов разных порядков определены значения критической плотности дислокаций N_{d0}^* , при которых наблюдается подавление динамических эффектов; выработан критерий оптимизации условий дифрактометрической диагностики структурного совершенства дислокационных кристаллов.

4. Изучен характер толщинных зависимостей когерентной и диффузной компонент ИОС дислокационных кристаллов кремния и германия в широком диапазоне уровней поглощения РЛ. Установлено, что в области слабого поглощения ($h \leq 1$) диффузная компонента ИОС с дос-

таточно высокой точностью может быть описана в рамках кинематического приближения.

Впервые показано, что в области промежуточного ($1 < h < 10$) и сильного ($h > 10$) поглощения, при дифракции характеристического и тормозного (с длинами волн, близкими к К-краю поглощения исследуемого материала) рентгеновского излучения на кристаллах с хаотически распределенными дислокациями, наблюдается эффект аномального прохождения некогерентно рассеянных волн. При этом, в области $h \gg 10$, динамические эффекты распространения диффузного фона могут оказывать определяющее влияние на ИОС дислокационного кристалла.

Исследовано влияние диффузионного отжига на интегральную отражающую способность и интегральные характеристики структурного совершенства тонких кристаллов S_i с хаотически распределенными ростовыми дислокациями. Установлено, что в зависимости от степени насыщения дислокаций примесными атомами меди процесс декорирования может приводить как к увеличению, так и к уменьшению ИОС кристаллов, а также величины статического фактора Дебая-Валлера, что может восприниматься как эффективное изменение плотности дислокаций.

5. Выполнена экспериментальная проверка модели динамически рассеивающего кристалла с кинематически рассеивающим НДС. Показано, что такая модель позволяет корректно рассчитать интегральные характеристики нарушенного слоя только для рефлексов высоких порядков. Обоснована методика определения интегральной толщины и рассеивающей способности нарушенного слоя с использованием рефлексов низких порядков.

6. Исследовано влияние обусловленных поверхностными концентраторами напряжений, возникающих в кристаллической матрице, на комплекс дифракционных параметров. Показано, что в области слабого поглощения РЛ при механической обработке поверхности кристалла S_i возникающие в кристаллической матрице упругие напряжения могут исказить практически весь объем кристалла, что приводит практически к полному подавлению динамических эффектов рассеяния. Эти напряжения быстро релаксируют в процессе удаления концентраторов, расположенных в тонких приповерхностных слоях.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Даденко Л.И., Хрупа В.И., Кисловский Е.Н., Николаев В.В. Осо-

- бенности рассеяния рентгеновских лучей в переходной области толщин реальных кристаллов // УФЖ. - 1985. - Т.30, № 7. - С.1049-1052.
2. Даценко Л.И., Хрупа В.И., Скороход М.Я., Николаев В.В. Особенности лауэ-дифракции рентгеновских лучей в тонких кристаллах кремния, содержащих ростовые и декорированные дислокации // УФЖ. - 1987. - Т.32, № 1. - С.97-102.
 3. Даценко Л.И., Хрупа В.И., Скороход М.Я., Николаев В.В., Осиновский М.Е., Олиховский С.И. Лауэ-дифракция рентгеновских лучей в тонком кристалле с анизотропными искажениями кристаллической решетки // Металлофизика. - 1987. - Т.9, № 1. - С.65-71.
 4. Даценко Л.И., Осиновский М.Е., Хрупа В.И., Крыштаб Т.Г., Николаев В.В., Скороход М.Я. Особенности лауэ-дифракции в монокристаллах, содержащих ростовые и декорированные дислокации // Металлофизика. - 1987. - Т.9, № 2. - С.76-82.
 5. Николаев В.В., Хрупа В.И., Даценко Л.И., Скороход М.Я. Распределение интенсивности лауэ-дифрагированных пучков в тонких реальных кристаллах Si // УФЖ. - 1988. - Т.33, № 10. - С.1566-1572.
 6. Даценко Л.И., Николаев В.В., Хрупа В.И. Лауэ-дифракция рентгеновских лучей в тонких кристаллах с сильно нарушенными поверхностями // УФЖ. - 1989. - Т.34, № 3. - С.468-474.
 7. Николаев В.В., Олиховский С.И., Осиновский М.Е., Хрупа В.И. Интегральная отражательная способность тонких реальных монокристаллов // Металлофизика. - 1989. - Т.11, № 2. - С.52-56.
 8. Николаев В.В., Хрупа В.И., Скороход М.Я., Григорьев Д.О. Влияние поверхностных нарушений структуры на отражающую способность тонких кристаллов // Металлофизика. - 1989. - Т.11, № 2. - С.68-73.
 9. Осиновский М.Е., Хрупа В.И., Николаев В.В., Скороход М.Я. Рентгенодифракционный анализ структурного совершенства слабопоглощающих бездислокационных кристаллов // Металлофизика. - 1989. - Т.11, № 3. - С.62-67.
 10. Даценко Л.И., Николаев В.В., Гуреев А.Н., Скороход М.Я. Поглощение и рассеяние рентгеновских лучей при лауэ-дифракции в кристаллах с хаотически распределенными дислокациями // Металлофизика. - 1989. - Т.11, № 4. - С.70-75.
 11. Хрупа В.И., Даценко Л.И., Николаев В.В., Скороход М.Я., Григорьев Д.О. Влияние дефектов различной природы на отражатель-

ную способность слабо поглощающих кристаллов при варьировании порядка лауэ-дифракции // УДЖ. - 1989. - Т.34, № II. - С.1732-1735.

12. Khrypa V. I., Nikolaev V. V., Skorokhod M. Ya. On the transition between dynamical and kinematical X - ray diffraction in thin crystals with randomly distributed dislocations // Phys. stat. sol. A. - 1989. - 116, N.2. - P. K141-K145.
13. Influence of defects on the thickness dependences of integral reflectivity of dislocation-free silicon crystals /V. I. Khrypa, D. O. Grigor'ev, V. V. Nikolaev et al. // Ibid. - 1990. - 121, N.1. - P. 11-20.
14. Даценко Л.И., Воронцова Л.А., Николаев В.В., Григорьев Д.О., Скороход М.Я., Хрупа В.И., Школьный А.К. Рентгенодифракционная диагностика структурной однородности монокристаллов бездислокационного кремния // Оптоэлектроника и полупроводниковая техника. - 1992. - в.24. - С.28-33.

Подписано в печать 24.09.93г формат 60x84/16
Бумага писчая.Усл.печ.л. 1,0. Тираж 100 экз. Заказ № 1871
Отпечатано ЦУОН ГНПП "Плодвинконсерв" г.Киев,Саксаганского,1

1168108

AB 28.378

AB 28.378