

ЧЕРНІВЕЦЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ім. Ю. ФЕДЬКОВИЧА

На правах рукопису

КОРОВЯНКО ОЛЕГ ЖАНОВИЧ

ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ КОМБІНОВАНИХ  
ДЕФОРМАЦІЙНИХ ПОЛІВ НА ФОРМУВАННЯ РЕНТГЕНО-  
ТОПОГРАФІЧНИХ І МУАРОВИХ ЗОБРАЖЕНЬ  
МІКРОДЕФЕКТІВ В КРИСТАЛАХ

01.04.07 - фізика твердого тіла

А в т о р е ф е р а т  
дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Чернівці - 1997

248 +  
539

ЛННБ України ім.В.Стефаника



00738120 (L)

Дисертацією є рукопис

Роботу виконано на кафедрі фізики твердого тіла Чернівецького державного університету ім. Ю.Федьковича.

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук  
професор **Раранський Микола Дмитрович**

Офіційні опоненти: член-кореспондент НАН України,  
доктор фізико-математичних наук,  
професор **Молодкін Вадим Борисович**  
доктор фізико-математичних наук,  
професор **Ковалюк Захар Дмитрович**

Провідна організація: Інститут фізики напівпровідників НАН  
України, м. Київ.

Захист відбудеться 27 червня 1997 р. о 15-ій годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 07.01.06 при Чернівецькому державному університеті ім. Ю. Федьковича: 274012 м. Чернівці, вул. Кошобинського, 2, Чернівецький держуніверситет.

З дисертацією можна ознайомитися в науковій бібліотеці Чернівецького державного університету ім. Ю. Федьковича (вул. Л.Українки, 23).

Автореферат розісланий "26 травня 1997р."

Вчений секретар  
спеціалізованої Ради

М.В. Курганецький

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми досліджень. Сучасні досягнення в технології вирощування високодосконалих монокристалів германію і кремнію дозволяють позбавлятися від об'ємних, плоских і лінійних дефектів. Проте, як свідчать експериментальні дослідження, для бездислокаційних кристалів характерна велика густина мікрodefектів.

Наявність високої концентрації кисню в кристалах кремнію великого діаметру корисна, оскільки внаслідок цього закріплюються дислокації і таким чином при кристалізації виключається утворення макроскопічних напруг. В той же час, у високодосконалих кристалах кремнію в результаті термічного впливу на різних стадіях процесу до і під час виробництва приладу кисень може осаджуватись, утворюючи преципітати. Внаслідок їх пружних далекодіючих полів ці кисневі преципітати можуть спричиняти вихід приладів з ладу і, при достатніх розмірах, можуть також породжувати нові дефекти, які призводять до погіршення роботи приладів.

Таким чином, характеристика і контроль розподілу мікрodefектів по товщині кристалу мають важливе практичне значення. Крім класичних методів селективного травлення, для виявлення мікрodefектів в Si в останні роки інтенсивно використовуються інтегральні дифрактометричні і рентгенотопографічні методи. Так як мікрodefекти мають відносно мале і швидкопадаюче поле деформацій, то вони виявляються однокристальними топографічними методами у товстих кристалах тільки після спеціального декорування домішками. Тому в даний час досить широко використовуються методи моделювання дифракційних процесів в реальних кристалах, що містять дефекти кристалічної будови. Кількісні і якісні розподіли деформацій в областях локалізації дефектів визначаються з рентгеновських топограм шляхом співставлення чисельно змодельованих і експериментально отриманих зображень.

Значний інтерес останнім часом викликають дослідження дифракції рентгеновських променів в акустично збуджених кристалах. Так як резонансна акустична дія дозволяє керувати рентгеновським хвильовим полем всередині кристалу, то це значно розширює можливості методів визначення характеристик різних структурних дефектів. Сучасний рівень розвитку динамічної теорії розсіяння рентгеновських променів реальними кристалами дозволяє замінити довго-

тривали експериментальні дослідження на чисельний експеримент по встановленню фізичної природи і механізмів формування рентгенодифракційних зображень будь-яких дефектів і впливу на них різних факторів. Це суттєво доповнить можливості отримання якісної і кількісної інформації про реальний стан спотворення кристалічної ґратки, що і визначає актуальність даної теми досліджень.

Слід зауважити, що відсутність аналітичного опису рентгеноакустодифракційних ефектів в реальних монокристалах вимагає розробки і застосування нових методів математичного комп'ютерного моделювання процесів динамічного розсіювання рентгенівських променів.

Дисертація присвячена теоретичному дослідженню закономірностей впливу зовнішніх і внутрішніх факторів на формування рентгенодифракційних зображень мікрodefектів на секційних і плоскохвильових топограмах, а також на формування муарових зображень дефектів в трьохкристальному рентгенівському інтерферометрі.

**Метою даної роботи** є теоретичне дослідження закономірностей і механізмів формування дифракційних та інтерферометричних зображень дефектів в реальних кристалах та впливу на них зовнішніх і внутрішніх факторів. При цьому вирішувались такі завдання:

1. Дослідження впливу поверхневої релаксації напруг та «потужності» мікрodefектів в кремнії на роздільну здатність секційної топографії.

2. Вивчення механізмів впливу експоненційного згину вхідної і вихідної поверхонь, а також еквідистантного згину атомних площин кристалу на формування зображень мікрodefектів.

3. Визначення впливу параметрів ультразвукової хвилі на формування дифракційних зображень мікрodefектів на секційних і плоскохвильових топограмах в акустично збуджених кристалах.

4. Встановлення закономірностей і механізмів формування інтерферометричних зображень (муарових картин) в реальних кристалах і вплив на цей процес різних факторів.

**Методи дослідження:** чисельні та аналітичні методи моделювання процесів рентгенівської дифракції на основі рівнянь в частинних похідних зі змінними коефіцієнтами, що описують розповсюдження рентгенівських променів у реальних кристалах.

**Наукова новизна роботи** визначається сукупністю результатів, сформульованих у висновках до дисертації і наведених на закінчення

автореферату. Основні нові результати дисертаційної роботи:

1. Вперше досліджено в комплексі вплив різних зовнішніх і внутрішніх факторів на формування зображень мікрodefектів на секційних і плоскохвильових топограмах.

2. Встановлені закономірності і механізми формування зображень хаотично розподілених мікрodefектів в акустично збудженому кристалі при різних рівнях поглинання ( $\mu_t=0.44$  і  $\mu_t=4.32$ ). Обчислена відбиваюча здатність кристалу, що містить хаотично розподілені мікрodefекти. Знайдено, що динамічна взаємодія породжених хвильових полів приводить до неадитивності внесків в інтенсивність двох мікрodefектів, зображення яких зливаються.

3. Розроблена методика і проведене чисельне моделювання муарових картин в трьохкристальному рентгенівському інтерферометрі для дослідження механізмів і закономірностей інтерференції хвиль у випадках впливу температурного градієнту, зосередженої сили і наявності фазових об'єктів в одному з плечей інтерферометра.

**Наукова і практична значимість роботи.** Отримані в роботі нові дані суттєво розширюють фізичні уявлення про механізми формування муарових картин і рентгенодифракційних зображень мікрodefектів в кристалі і вплив на них різних факторів, тому можуть бути практично використані як для розробки нових неруйнуючих дифракційних методів дослідження монокристалів, так і для подальшого розвитку динамічної теорії розсіяння рентгенівських променів.

Зокрема, досліджено вплив пошкодження вхідної і вихідної поверхонь кристалу, а також згину атомних площин на формування секційних зображень мікрodefектів в кристалі кремнію.

Встановлені закономірності впливу ультразвукових хвиль на формування секційних і плоскохвильових зображень мікрodefектів, а також на інтегральну відбиваючу здатність кристалу з хаотично розподіленими мікрodefектами.

Проведені чисельні експерименти по моделюванню впливу зовнішніх і внутрішніх факторів на формування муарових зображень в трьохкристальному інтерферометрі. Це значно розширює уявлення про фізичні механізми інтерференції рентгенівських променів в реальних кристалах.

**Ступінь достовірності.** Достовірність одержаних результатів забезпечувалась шляхом співставлення з незалежними експериментальними і теоретичними дослідженнями інших авторів.

### Основні положення, що виносяться на захист.

1. Результати досліджень впливу релаксації напруг на поверхні кристалу і величини параметра деформації мікрodefекта на дифракційні зображення мікрodefектів на секційних топограмах і на інтегральну відбиваючу здатність кристалу для різних концентрацій хаотично і упорядковано розподілених мікрodefектів у випадку тонкого кристалу і кристалу проміжної товщини.

2. Неадитивність внеску в інтенсивність розсіяння двох мікрodefектів, зображення яких зливаються, внаслідок динамічної взаємодії породжених ними хвильових полів.

3. Механізми і закономірності формування дифракційних зображень мікрodefектів на секційних і плоскохвильових топограмах у випадку експоненційного, еквідистантного та синусоїдального згину атомних площин. Умови покращення контрастності зображень мікрodefектів під впливом слабких деформаційних полів.

4. Методика чисельного моделювання муарових картин та результати дослідження їх формування при дії на аналізатор трьохкристального інтерферометра різних зосереджених сил.

**Апробація роботи.** Результати досліджень, що покладені в основу дисертації, доповідались і обговорювались на таких конференціях, нарадах і семінарах: IV міжнародній конференції з фізики і технології тонких плівок (Івано-Франківськ, 1993р.), Ювілейній конференції Інституту електронної фізики (Ужгород, 1993р.), XI Європейському симпозиумі "Рентгенівська топографія і високороздільна дифрактометрія" (Берлін, 1994р.), I Міжнародній науково-технічній конференції "Матеріалознавство алмазоподібних і халькогенідних напівпровідників" (Чернівці, 1994р.), Міжнародній школі-конференції по фізичним проблемам матеріалознавства напівпровідників (Чернівці, 1995р.), Міжнародній конференції "Інтерференційні явища в розсіянні рентгенівських променів" (Москва, 1995р.), III Європейському симпозиумі "Рентгенівська топографія і високороздільна дифрактометрія" (Палермо, 1996р.), XII Конференції з матеріалознавства і застосувань кристалів (Закопане, 1996р.).

**Особистий внесок.** Дослідження, представлені в дисертації, є результатом самостійної роботи автора, якому належать реалізація теоретичних розрахунків, формулювання загальних висновків дисертації і основних положень, що виносяться на захист. Окремі положення експериментально перевірялись у співавторстві з співробітниками кафед-

ри ФТТ Чернівецького держуніверситету.

**Публікації.** По темі дисертації опубліковано 11 праць, наведених на закінчення автореферету.

**Структура і об'єм дисертації.** Дисертація складається з вступу, чотирьох розділів, закінчення, списку літератури з 160 джерел і додатку. Виклад зроблено на 160 сторінках друкованого тексту, що містять 43 рисунки.

### ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обґрунтовується актуальність вибраної теми досліджень, сформульовані мета і основні задачі роботи, її наукова новизна, практична значимість одержаних результатів, представлені основні положення, які виносяться на захист, а також відомості про апробацію.

В першому розділі, що є оглядом літератури по темі дисертації, викладені основні положення динамічної теорії дифракції рентгенівських променів в досконалих і спотворених кристалах. Проведений детальний аналіз публікацій, які присвячені теоретичному і експериментальному дослідженню формування рентгенодифракційних зображень в кристалі кремнію. Приведений також літературний огляд розвитку теорії і практичного використання методу трьохкристальної інтерферометрії в діагностиці різних структурних недосконалостей.

В другій розділ система рівнянь Такагі використана для проведення чисельного експерименту по дослідженню впливу різних факторів на роздільну здатність секційної топографії. Проаналізовані експериментальні результати по виявленню і ідентифікації кисневих включень в кремнії.

У високодосконалих кристалах кремнію в результаті термічного впливу на різних стадіях процесу до і під час виробництва приладу кисень може осаджуватися, утворюючи преципітати. Внаслідок їх пружних далекодіючих полів ці кисневі преципітати можуть спричинити вихід приладів з ладу і, при достатніх розмірах, можуть також породжувати нові дефекти, які призводять до погіршення роботи приладів.

В першому параграфі приведений алгоритм чисельного розрахунку по рівняннях Такагі секційних і проєкційних топограм. Розглянуті випадки декількох (до п'яти) гіпотетичних мікрорефектів, упорядковано розміщених в різних площинах розсіяння через 72 мкм по товщині і хаотично розподілених по кристалу мікрорефектів з концентрацією  $n=2.5 \cdot 10^7 \text{ см}^{-3}$ . Такий вибір кількості і розміщення

мікродфектів мав на меті створити найбільш сприятливі умови дослідження механізмів формування топографічних зображень і дифрактометричних кривих, а також інтегральних характеристик кристалу, що містить мікродфекти. Товщина кристалу 300 мкм. Орієнтація вхідної поверхні - (001), відбивання - (220) і (440),  $\text{CuK}_\alpha$  і  $\text{MoK}_\alpha$  - випромінювання відповідно. Включення моделюються сферично-симетричним пружним полем кулонівського типу. Деформаційний параметр  $C$  пропорційний об'єму когерентного сферичного включення, і його значення змінювались в межах від  $2 \cdot 10^{-17}$  до  $16 \cdot 10^{-16}$   $\text{см}^3$ . Крім того, для повного уявлення про дифракційні процеси розсіяння в кристалі, що містить мікродфекти густиною  $n=2.5 \cdot 10^7$   $\text{см}^{-3}$ , виконаний розрахунок просторових розподілів інтенсивності  $I_n(x)$  шляхом інтегрування відповідних секційних топограм по координаті  $y$ , а також коефіцієнту відбиваючої здатності кристалу  $R$  шляхом інтегрування всієї топограми.

В другому параграфі проведено дослідження впливу величини параметра деформації на роздільну здатність мікродфектів і визначені критичні відстані, при якій зображення двох преципітатів ще розділяються на топограмі. Розгляд геометрії розміщення мікродфектів в кристалі і змодельовані зображення дають чіткий критерій для розділення, отриманий шляхом вивчення преципітатів, які взаємно зміщені в площині розсіяння або в напрямку, нормальному до неї. Мінімальна відстань  $\Delta g_{\text{кр}}$ , при якій два преципітата ще окремо розділяються, визначався як функція деформаційного параметра  $C$ . Критична відстань  $\Delta g_{\text{кр}}$ , при якій преципітати були ще розділені, збільшується з ростом параметра  $C$ . Причому приріст  $\Delta g_{\text{кр}}$  відбувається пропорційно логарифму  $C$ , тобто  $\Delta g_{\text{кр}} \sim \ln C$ . Це добре узгоджується з результатами експериментальних робіт.

Як слідує з отриманих даних, збільшення «потужності» мікродфектів в тонкому кристалі з  $C=4 \cdot 10^{-17}$  до  $C=16 \cdot 10^{-16}$   $\text{см}^3$  приводить до збільшення відбиваючої здатності кристалу (майже на 25%), в той же час як в кристалі проміжної товщини до її подавлення майже на 5%.

Слід зауважити, що виконані нами моделювання секційних топограм (рис.1 і рис.2) вказують на досить високе співпадання з відповідними експериментальними зображеннями. Більш чітко

відображаються ті мікроефекти, які найближчі до вхідної та вихідної поверхонь кристалу.

Таким чином, використання чисельного моделювання дає змогу проводити теоретичний експеримент по визначенню впливу тих чи інших внутрішніх або зовнішніх факторів на механізми формування зображень мікроефектів. Це дає змогу значно підвищити ефективність і експресність як топографічних, так і дифрактометричних методів у визначенні типу, розмірів, концентрації і однорідності розподілу мікроефектів.

В третьому параграфі досліджується вплив поверхневої релаксації напруж на механізми формування дифракційних зображень мікроефектів. Досліджено взаємодію зображень мікроефектів однакової «потужності», розмішених таким чином в площині розсіяння, щоб «новоутворені» хвильові поля співпадали по напрямку розсіяння. Як слідує з аналізу розподілу інтенсивності в площинах розсіяння у випадку окремих мікроефектів і випадку їх суперпозиції, результуюча картина взаємодії не є просто їх сумою (рис.3). Внаслідок взаємодії динамічної, проміжної і кінематичної складових зображень чітко спостерігається екстинкційно-фазова взаємодія зображень в площині розсіяння ( $xz$ ). В кількісному вираженні це добре видно на просторових розподілах інтенсивності по основи палатки Бормана (рис.3д). Очевидно, що така неадитивна взаємодія динамічних і кінематичних складових зображень може приводити до певних неточностей при визначенні розмірів і концентрації мікроефектів з дифрактометричних даних. Тому, напевно, слідувало б ввести коефіцієнт, який враховував би таку взаємодію. Слід також зауважити, що чим більші за розмірами або «потужності» мікроефекти, тим більше коефіцієнт такої невідповідності.

В цілому, вплив релаксації змінює, тобто звужує, розеточні зображення як в площині розсіяння, так і перпендикулярно до неї. Для ізольованої нерелаксуючої частинки ця зміна в зображенні не залежить від положення включення всередині кристалу і є, таким чином, особливо надійним методом визначення  $S$ . Проведені нами дослідження показують, що товщина кристалу, на якій вплив поверхневої релаксації стає непомітним, зростає зі збільшенням «потужності» мікроефекту і задовільно апроксимується логарифмічною залежністю від параметра  $S$ .

Релаксація стає мало помітною при значних глибинах залягання мікроефектів, і в цьому випадку в розрахунках нею можна знехтувати.

В третьому розділі на основі чисельного рішення рівнянь Такагі аналізується вплив експоненційного, сквідистантного і синусоїдального згину атомних площин на формування дифракційного зображення мікрodefektів.

В першому параграфі ставилася задача в'яснення впливу одномірно зігнутих по експоненційному закону вихідної і вхідної поверхонь кристалу на формування динамічної, проміжної і кінематичної складових дифракційних зображень мікрodefektів. Паралельно досліджувався і вплив хаотично розподілених мікрodefektів на величину інтегральної відбиваючої здатності кристалу.

Наявність згину вхідної поверхні кристалу без МД призводить до росту інтегральної інтенсивності при збільшенні потужності порушеного шару на вхідній поверхні величиною ( $\epsilon \approx n \cdot 10^{-6}$ ) на 21%, з МД ще на 21%, при  $n=3$  на 62% і 16% відповідно. Тобто зі збільшенням «потужності» пошкодження вхідної поверхні подавляється дифракційна складова розсіяння від мікрodefektів.

Згин кристалу з мікрodefектами веде до значних змін в їх зображеннях на секційних топограмах. Для тонкого кристалу зі збільшенням «потужності» пошкодженого шару спостерігаються зміни, в основному, динамічної і проміжної складових зображення - добре видно не тільки збільшення поперечних і поздовжніх розмірів, але й подвоєння динамічного зображення. В той же час для мікрodefektів, які знаходяться біля вихідної поверхні, спостерігається зміна контрасту проміжного зображення. Деякі зміни відбуваються і в кінематичній складовій - більш чітко проявляється пряме розеточне зображення з підсиленням дифракційного зображення «темних» пелюсток тих мікрodefektів, що знаходяться поблизу вихідної поверхні кристалу.

В цілому така ж картина спостерігається і для кристалу проміжної товщини.

При експоненційному згині атомних площин вихідної поверхні спостерігається ще більш різке зменшення інтенсивності біля напрямку заломленої хвилі зі зміщенням максимуму розподілу до напрямку відбитої хвилі.

У випадку тонкого кристалу в порівнянні з попереднім випадком також має місце трансформація складових зображення. Крім уширення зображення, має місце подавлення проміжного зображення з підсиленням прямого, а також і фону. В цілому спотворення вихідної поверхні як тонкого, так «товстого» кристалу подавляє дифракційне розсіяння, а

відповідно і дифракційний контраст мікрodefektів і веде до пониження їх роздільної здатності. Зауважимо, що деформація вхідної поверхні більш сильно подавляє дифракційний контраст від мікрodefektів.

В другому параграфі досліджується вплив далекодіючих деформацій типу еквідистантного згину атомних площин на формування контрасту мікрodefektів в кристалі Si. Як слідує з аналізу отриманих даних, збільшення величини  $V_0$  приводить спочатку до приросту відбиваючої здатності кристалу з мікрodefектами  $\Delta R/R_0=7\%$ , а потім до зменшення цього відношення майже до 1%. При цьому в центральній частині падаєчки Бормана спостерігається порушення симетрії просторового розподілу.

Дифракційний контраст деяких мікрodefektів, що розміщені поблизу вхідної поверхні в області слабких деформацій спочатку незначно підсилюється, а при подальшому наростанні деформації подавляється. Збільшення параметра деформації  $V_0$  веде також до подавлення дифракційного зображення мікрodefektів, тобто значний ріст фону подавляє динамічну і проміжну області зображення. Тільки пряме зображення зберігається. Зображення окремих мікрodefektів перекриваються, значно погіршується їх роздільна здатність.

Для кристалу проміжної товщини подавлення прямого зображення супроводжується перекидом інтенсивності в центр проміжної області зображення. Для мікрodefektів, що розміщені на значних відстанях від вихідної поверхні, в проміжній області спостерігається характерний осцилюючий чорно-білий контраст. Така ж ситуація, як правило, виникає при накладанні зображень двох мікрodefektів, розміщених на різній висоті в одній площині розсіяння.

Таким чином, чисельне моделювання дифракційного експерименту дає можливість визначити переважний вплив тих чи інших спотворень атомних площин на формування дифракційного контрасту мікрodefektів. Це створює передумови для розв'язку оберненої задачі - по зміні просторового розподілу  $I_h(x)$  визначити тип і величину деформаційних полів в кристалі.

В третьому параграфі проведені дослідження по виявленню можливостей використання ультразвука для підсилення дифракційного контрасту і збільшення розмірів дифракційної області проявлення мікрodefektів, які є невидимими при звичайних умовах експерименту.

Моделювання проводились при тих самих умовах, що і в попередніх параграфах, при тій же кількості мікрodefektів. Дослідження

проводилися в трьох областях довжини ультразвукового поля - довгохвильовій ( $\lambda > \lambda_{\text{pec}}$ ), резонансній ( $\lambda_{\text{pec}} = \lambda$ ) і короткохвильовій ( $\lambda < \lambda_{\text{pec}}$ ).

Резонансна ультразвукова дія, як слід з секційних топограм на рис.4, суттєвим чином впливає не тільки на контраст (значно зростає видність), але й на розміри дифракційної області (збільшується приблизно на 10-20%) як при  $\mu T = 0.44$  (рис.4b,c), за рахунок подавлення фонові (когерентної) складової розсіяння. В цьому випадку в більш повній мірі проявляються динамічна і кінематична складові розсіяння. Збільшення амплітуди ультразвуку веде не тільки до ушпирення дифракційної області зображень окремих мікрodefектів (другого низу) перпендикулярно вектору дифракції, але й до проявлення їх тонкої структури, зображення якої буквально прошизує центральну екстинкційну смугу. Поява цієї смуги обумовлено осцилюючою залежністю періода хвильового поля від амплітуди ультразвуку. Проявлення такої структури зображення також добре видно для мікрodefекту (третього низу), який слабо проявлявся без ультразвукового резонансного збудження. Аналогічна картина має місце і для кристалу проміжної товщини, де значне подавлення інтенсивності відбувається в центрі топограми. Тут тонка структура зображення виявляються у вигляді осцилюючого по ширині проміжної області чорно-білого контрасту. Це призводить до того, що деякі мікрodefекти, що знаходяться біля вхідної поверхні кристалу і є майже непомітними у випадку хаотичного розподілу мікрodefектів, при ультразвуковому збудженні кристалу стають значно помітнішими (рис.5a,b - в центрі топограм).

Аналіз впливу довго- і короткохвильової областей ультразвукових коливань на формування дифракційного контрасту мікрodefектів не виявляє значних трансформацій зображення. В цілому спостерігається подавлення динамічної складової зображення. І тільки для мікрodefектів, які попадають в пучність рентгенівського і ультразвукового поля, спостерігається характерний смугастий контраст в проміжній області зображення. Таке зображення обумовлене накладанням екстинкційних контурів на проміжне зображення.

В четвертому параграфі з допомогою наближеного розв'язку рівнянь Такагі досліджуються закономірності впливу періодичних деформацій на механізм формування контрасту мікрodefекта на плоскохвильових топограмах. Обговорюється можливість розділення когерентної і дифузної компонент розсіяння і кількісного визначення характеристик дефектів рентгеноакустичними методами.

Оскільки припускається, що мікродфект дуже слабо спотворює ідеальну періодичність ґратки, для оцінки складової внаслідок розсіяння на ньому в дифраговану хвилю використовується теорія збурень. Збурення, що виникають у хвилях в напрямку проходження і дифракції, виходяться з кінематичного наближення, а подальше їх розповсюдження описується згортками з відповідними функціями впливу. Це відповідає звичайному борнівському наближенню в теорії розсіяння, коли нехтують самодією і взаємодією випромінювань:

$$\delta E_1 = \delta E_{\text{kin}} - i \int \frac{\partial G(s_0 - s_0'; s_1 - s_1')}{\partial s_0} \delta E_{\text{kin}} ds_0 - \frac{2\pi^3 \cos^2 \theta}{\Lambda^2} i \iint G u_d E_1 ds_0 ds_1 \quad (1)$$

де  $\mathbf{h}$ -вектор дифракції,  $\Lambda$ -довжина екстинкції,  $E_0$  і  $E_1$ -амплітуди відповідно хвиль у напрямках проходження та дифракції у кристалі без дефекта,  $s_0$  і  $s_1$ - відповідно координати вздовж напрямків проходження і відбивання,  $u_d$  - поле зміщень мікродфекта, а  $G$  є функцією Рімана телеграфного рівняння для періодичного поля зміщень.

Три доданки в (1) записані у порядку розкладу по малому параметру  $a/\Lambda$ , де  $a$ - розмір зображення мікродфекта. Основний внесок в зображення вносить перший, кінематичний, доданок. Народжена на мікродфекті хвиля  $\delta E_1$  при подальшому розповсюдженні інтерферує з опорною хвилею від матриці  $E_1^M$ , створюючи зображення дефекта. Контрастність цього зображення залежить від співвідношення амплітуд  $\delta E_1$  і  $E_1^M$ . Розглянуті сферичні  $\Lambda^1$ -мікродфекти (включення другої фази) з додатковими об'ємами  $10^{-16}\text{см}^3$  і  $-10^{-16}\text{см}^3$  типу втілення і типу вакансії відповідно. Використане відбивання (660), випромінювання  $\text{MoK}_{\alpha 1}$ . Розраховані профілі інтенсивності дифрагованої хвилі вздовж напрямку вектора дифракції при присутності і відсутності періодичних деформацій в кристалі. Встановлено, що фазове підсилення контрасту мікродфекта досягається тоді, коли ефект Бормана в кристалі подавлений, а хвиля, створена на мікродфекті, взаємодіє з хвильовим полем, яке зазнає деформаційні биття.

В п'ятому параграфі моделюється вплив коротко- і довгодіючих деформаційних полів на рентгеноакустичну взаємодію в кристалі кремнію з мікродфектами. Метою проведених в даному параграфі розрахунків є дослідження ефекту неадитивного впливу статичних та акустичних деформацій кристалічної ґратки на інтегральну відбиваючу здатність кристалу і на формування зображень окремих мікродфе-

фектів. Причому статичні деформації моделюються додатковою акустичною хвилею ( $U_{01}, \lambda_{s1}$ ) при різних частотах (коротко- і довгохвильові УЗХ) в умовах створеного першою стоячою хвилею рентгеноакустичного резонансу.

З аналізу представлених результатів слідус, що в цілому в кристалах проміжної о рівня поглинання ( $\mu \Gamma \sim 4$ ) теоретичні залежності  $I_h(U_0)$  в умовах рентгеноакустичного резонансу незалежно від профілю довжини падаючої хвилі і значень уявних частин коефіцієнтів Фур'є-поляризуємостей якісно відтворюють ріст інтенсивності зі збільшенням амплітуди ультразвуку  $U_0$  (рис.6). Вплив довгохвильових акустичних деформацій  $\lambda_{s1} = 3\lambda$ ,  $U_{01} = 0.1\text{A}$  на рентгеноакустичну взаємодію приводить до деякого підвищення контрасту мікрodefektів на секційних топограмах. При цьому в області незначних значень  $U_0$  ( $U_0 < 0.2\text{A}$ ) подавлення РАР більше, ніж в області значних  $U_0 > 0.2\text{A}$ ). З ростом амплітуди  $U_1$  збільшується подавлення  $I_h(U_0)$ . В той же час, короткохвильові деформації  $\lambda_{s1} = \lambda/2$ ,  $U_{01} = 0.1\text{A}$  не призводять до суттєвої зміни  $I_h(U_0)$ , тобто не впливають на зображення мікрodefektів. При більших значеннях  $U_{01} = 0.6\text{A}$  спостерігається незначне подавлення рентгеноакустичної взаємодії. При цьому вигляд залежності  $I_h(U_0)$  в цілому якісно такий же, як і в кристалах з хаотично розподіленими в об'ємі статичними дефектами.

В четвертому розділі на базі розробленої методики розрахунку муарових картин вивчається формування зображень в трьохкристальному LLL-інтерферометрі при умовах екстинкційно-фазової взаємодії (маятниково-муарової), дії градієнту температури і зосередженої сили на пластину-аналізатор.

В першому параграфі представлений метод розрахунку рентгенівських інтерферограм, який полягає у знаходженні комплексних амплітуд проходячої і дифрагованої хвиль у кожній точці кристалу після проходження рентгенівських променів спочатку через розчеплювач S, а потім через дзеркало M і сумуванні амплітуд інтерферуючих хвиль в аналізаторі. При цьому принципове значення має різниця фаз, з якими інтерферуючі хвилі приходять на поверхню кристалу-аналізатора. Знання її дає можливість досліджувати вплив тих чи інших факторів на формування інтерферометричних зображень йо зміні періодів муарових смуг. Враховано те, що в слабкодеформованих кристалах амплітуди хвильових полів є повільно змінними, і

формування мурової картини пов'язано, в основному, з фазовою невідповідністю інтерферуючих в аналізаторі хвильових полів. Тому при розробці методу моделювання муарових картин використано ейкональне двоххвильове наближення, в якому вектор дифракції є функцією просторових координат і відіграє роль повільно змінного показника заломлення в оптиці.

В другому параграфі на основі розробленої методики проведено моделювання муарових картин у випадку дії на аналізатор інтерферометра перпендикулярно вектору дифракції однорідного температурного градієнту. Проведення такого моделювання дало змогу більш точно оцінити відповідність теоретичних уявлень про розподіл термопружних деформацій у кристалі реальному розподілу, що спостерігається в експерименті. Найбільші неспівпаданя теоретичної і експериментальної картини спостерігались при слабких температурних градієнтах. Пов'язано це з тим, що реальні планарні локальні розорієнтації атомних площин суттєво відрізняються від розрахованих. При збільшенні однорідного температурного градієнту співпаданя стає кращим.

В третьому параграфі проведені дослідження механізмів формування дифракційного контрасту дефектів кристалічної структури при інтерференції хвильових полів в аналізаторі інтерферометра. Проаналізовано вплив далекодіючих та короткодійючих напруг на формування муарових зображень, коли плоскопаралельний і клиноподібний аналізатор інтерферометра піддається дії зосередженої сили. Співставлено теоретичні і експериментальні муарові картини і відзначено їх якісне співпаданя. Це створило передумови для рішення так званої прямої задачі - по заданому полю змішень визначено розподіл інтенсивності на виході з інтерферометра.

В четвертому параграфі розглядається екстинкційно-фазова взаємодія інтерферуючих хвильових полів в плоскопаралельному і клиноподібному аналізаторі інтерферометра. Досліджена так звана муар-маятникова взаємодія. Якщо при внесенні в одне із плечей інтерферометра фазового об'єкту в кристалі-аналізаторі формується інтерферометричне хвильове полє, яке по періоду співпадає з екстинкційною довжиною в кристалі, чітко проявляються області області резонсного підсилення і резонансного подавлення екстинкційно-фазової взаємодії.

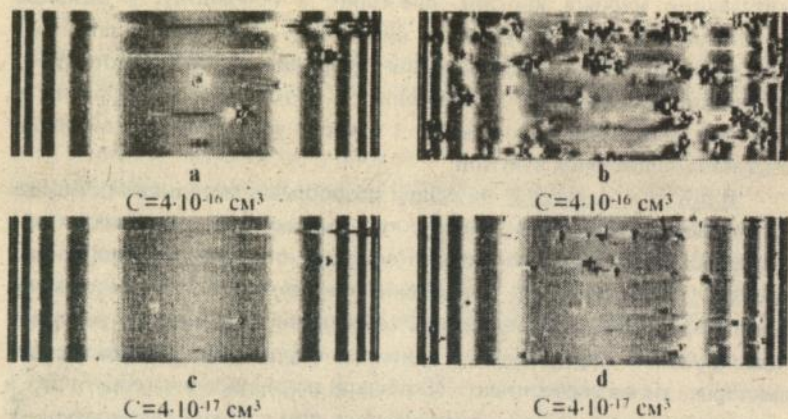


Рис.1. Розраховані по рівняннях Такагі секційні топограми кристалу кремнію з концентраціями мікродефектів  $n \sim 6.2 \cdot 10^5$  (a,c) і  $n \sim 2.5 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-3}$  (b,d) при різних параметрах деформації мікродефекта (параметр C): відбивання (440)  $\text{MoK}_\alpha$ , випромінювання,  $\mu = 0.44$ .

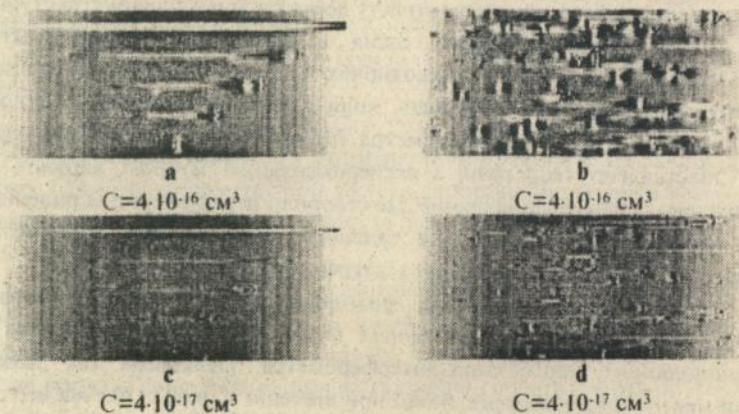


Рис.2. Те саме що на рис.1 для  $\mu = 4.32$  (відбивання (220)  $\text{CuK}_\alpha$ , випромінювання).

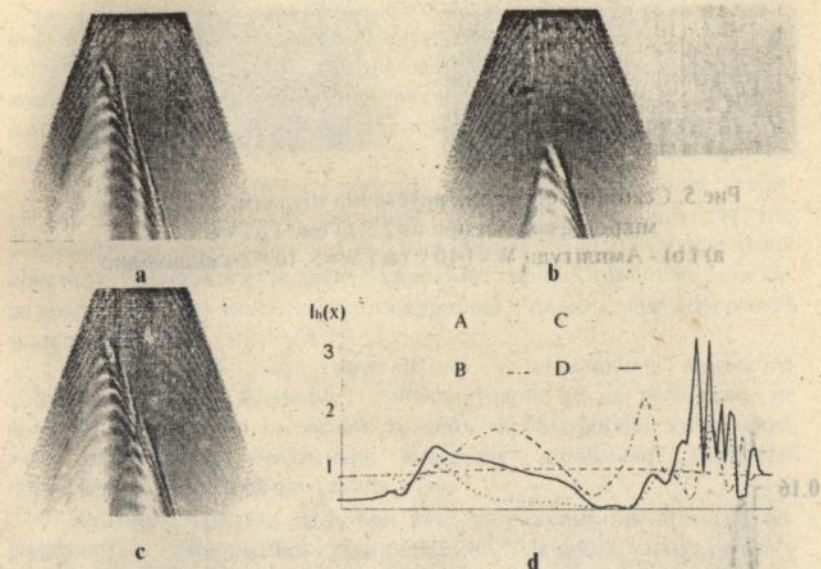


Рис.3. Формування зображень двох мікроефектів, розміщених в одній площині розсіяння (XZ).  $C=16 \cdot 10^{-16} \text{см}^3$ ,  $\mu T=4.32$ ; а і б—окремі мікроефекти (МД), с—два МД, д—просторовий розподіл: А—без МД; В, С, D—випадки а, б, с відповідно.

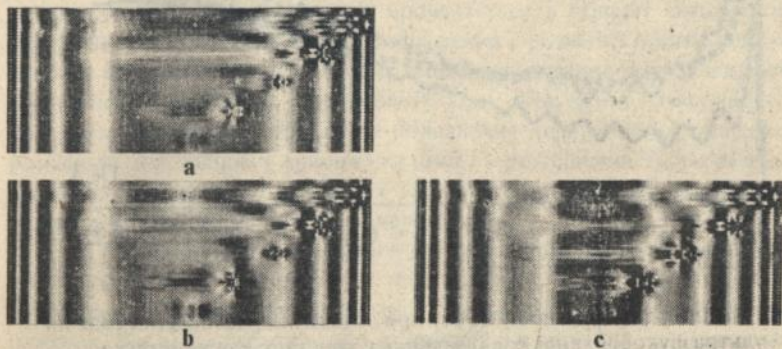


Рис.4. Секційні топограми у випадку наявності в акустично збудженому кристалі концентрації  $n=6.2 \cdot 10^5 \text{см}^{-3}$  мікроефектів при  $\mu T=0.44$ : а) Без ультразвуку; б) і с) Амплітуди  $W=1 \cdot 10^{-10} \text{см}$  і  $W=5 \cdot 10^{-10} \text{см}$  відповідно.

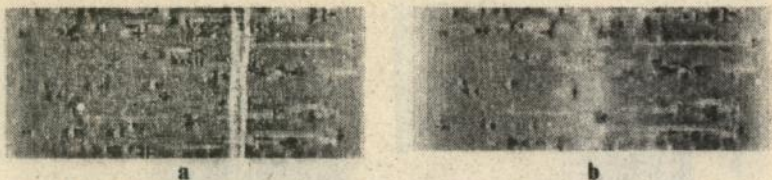


Рис.5. Секційні топографи акустично збудженого кристалу з мікродефектами при  $n=2.5 \cdot 10^7 \text{ см}^{-3}$  і  $\mu T=4.32$ :  
а) і б) - Амплітуди  $W=1 \cdot 10^{-10} \text{ см}$  і  $W=5 \cdot 10^{-10} \text{ см}$  відповідно.

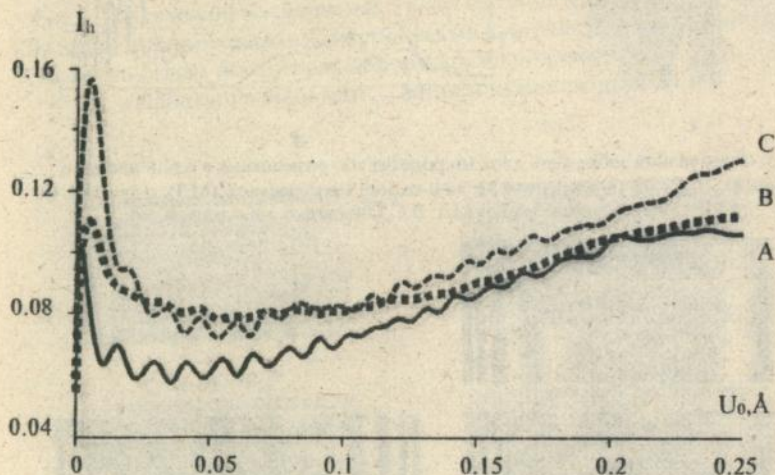


Рис.6. Амплітудні залежності  $I_h(U_0)$  при збудженні резонансної стоячої ультразвукової хвилі А-в ідеальному кристалі; В-в кристалі з мікродефектами ( $C=4 \cdot 10^{-16} \text{ см}^3$ ,  $n=2.5 \cdot 10^7 \text{ см}^{-3}$ ); С-в кристалі з додатковою акустичною хвилею ( $U_{01}=5 \cdot 10^{-10} \text{ см}$ ;  $\lambda_{\alpha}=3\tau$ ). Відбивання (440)  $\text{MoK}\alpha$ -випромінювання, товщина кристалу відповідає  $\mu t=3$ .

## ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ І ВИСНОВКИ

1. Розроблені і адаптовані алгоритми комп'ютерного моделювання впливу різних зовнішніх і внутрішніх факторів на формування зображень мікродефектів різної концентрації, розподілених як упорядковано, так і хаотично по об'єму кристалу на секційних і плоскохвильових топограмах, а також на просторові розподіли і інтегральну відбиваючу здатність кристалу.

2. Вплив поверхневої релаксації напруг на зображення преципітатів на рентгенівських секційних топограмах істотний для тих мікродефектів, які знаходяться поблизу вхідної або вихідної поверхонь кристалу. Релаксація стає досить малою на значних глибинах залягання мікродефектів і змінюється логарифмічно з параметром деформації мікродефекта ( $C$ ).

3. Роздільність пари преципітатів у відношенні взаємного зміщення в площині розсіяння і перпендикулярно до неї, досліджено як функцію  $C$ . Внески в інтенсивність двох мікродефектів, зображення яких зливаються, неадитивні внаслідок динамічної взаємодії породжених ними хвильових полів.

Критична відстань  $\Delta r_{кр}$ , при якій зображення преципітатів ще розділяються, збільшується пропорційно  $\ln C$ . Це добре узгоджується з результатами експериментальних робіт.

4. При спотворенні вхідної і вихідної поверхонь по експоненціальному закону на секційних топограмах відбувається трансформація дифракційного зображення, яка проявляється в області слабких деформацій у підсиленні прямого зображення і розмитті проміжного, а також у підсиленні або подавленні динамічної складової - в залежності від місцезорозташування мікродефекту. При збільшенні "потужності" порушених шарів спостерігається подавлення дифракційної складової розсіяння, пов'язаної з мікродефектами, і погіршення їх роздільної здатності. При цьому деформація вхідної поверхні, більш сильно подавляє дифракційний контраст мікродефектів.

5. У випадку еквідистантного згину атомних площин трансформація зображення мікродефектів проявляється у подавленні прямого зображення і перекиданні інтенсивності в центр проміжної області зображення. Від мікродефектів, що розміщені на значних відстанях від вихідної поверхні, в проміжній області спостерігається характерний осцилюючий чорно-білий контраст. Така ж ситуація, як правило, виникає при накладанні зображень двох мікродефектів, розміщених на різній висоті в одній площині розсіяння.

6. Ультразвукове деформаційне поле значно підсилює дифракційний контраст у тим, що подавляє когерентну складову розсіяння і таким

чином підсилює некогерентну. При збудженні в кристалі резонансного ультразвукового поля в околі місцерозташування мікрodefектів виникають нові хвильові поля, які, взаємодіючи із попередніми хвильовими полями обумовлюють підвищення контрастності і уширення області зображення мікрodefектів. Внаслідок цього в області проміжного зображення дефекту на секційних топограмах виявляється його тонка структура у вигляді осцилюючого чорно-білого контрасту.

7. Розв'язком рівнянь Такагі в першому наближенні теорії збурень знайдені співвідношення, які описують плоскохвильовий контраст окремого мікрodefекта у кристалі з періодичним полем зміщень. Фазове підсилення контрасту мікрodefекта досягається тоді, коли ефект Бормана в кристалі подавлений, а хвиля, створена на мікрodefекті, взаємодіє з хвильовим полем, яке знає деформаційного биття. При достатньо великих амплітудах внески дифузної та когерентної компонент повністю розділяються. Це дозволяє експериментально по розсіянню на реальному кристалі в умовах рентгеноакустичного резонансу визначати параметри дифузного розсіяння.

8. Відзначені особливості формування контрасту мікрodefектів в залежності від амплітуди періодичного поля деформації дозволяють підвищити чутливість традиційних рентгенівських методів, а також запропонувати використати стробоскопічну зйомку, коли період між імпульсами синхротронного джерела випромінювання кратний часовому періоду ультразвукових коливань, збуджених в кристалі.

9. Комбіноване ультразвукове поле, що створюється двома незалежними джерелами, подавляє рентгеноакустичну взаємодію як в довго-, так і в короткохвильовій області акустичних деформацій. При цьому вигляд залежності  $I_H(U_0)$  в цілому якісно такий же, як і в кристалах з хаотично розподіленими в об'ємі статичними дефектами.

10. Запропонований метод розрахунку рентгенівських муарових картин у трьохкристальному LLL-інтерферометрі був успішно апробований у випадках термопружного спотворення атомних площин, розміщення фазового об'єкту в одному з плечей інтерферометра та дії зосередженої сили на аналізатор. Досліджуючи зміни фази в інтерферуючих пучках, можна розв'язувати обернені задачі дифракційної оптики - визначення полів напруг по муаровій картині.

Основні результати опубліковані в таких наукових працях:

1. Раранский Н.Д., Фодчук И.М., Новиков С.Н., Коровяноко О.Ж. Влияние ультразвука на контраст дислокаций. // Металлофизика. - 1993. - 15. №2. - С.45.
2. Raransky N.D., Fodchuk I.M., Gimchinsky A.G., Nowikow S.N., Korovjanko O.J. X-ray diffraction topography of crystal defects using

- acoustic excitation. // Тези доповідей 4-ї міжнародної конференції по фізиці тонких плівок. - Івано-Франківськ. - 1993. - С.224.
3. Раранський Н.Д., Фодчук І.М., Новиков С.Н., Коров'яно О.Ж., Гімчинський А.Г. Влияние ультразвука на формирование дифракционного контраста дислокации в кремнии. // Сборник докладов юбилейной конференции ИЭФ-93. - Ужгород. - 1993. - С.51.
  4. Раранський Н.Д., Фодчук І.М., Новиков С.Н., Коров'яно О.Ж., Гімчинський А.Г. Особенности рассеяния рентгеновских лучей в акустически возбужденном кристалле, содержащем микродефекты. // Металлофизика и новейшие технологии. - 1994. - 16, №4. - С.33.
  5. Raransky M.D., Fodchuk I.M., Nowikow S.M., Korovianko O.J. X-ray diffraction distinctions in the acoustically excited crystal with microdefects // Abstracts II European Symposium "X-Ray Topography and High Resolution Diffraction. - Berlin.-1994.-P 55.
  6. Раранський М.Д., Фодчук І.М., Новіков С.М., Коров'яно О.Ж., Гімчинський О.Г. Нові можливості рентгенівської топографії акустично збуджених напівпровідникових кристалів. // Abstract the First International Conference on Material Science of Chalcogenide and Diamond-Structure Semiconductors.- Chernivtsi.- 1994.- P.10.
  7. Раранський Н.Д., Фодчук І.М., Коров'яно О.Ж., Слипченко К.В. Плосковолновые изображения микродефектов в кристаллах с периодическим полем деформации. // Металлофизика и новейшие технологии. - 1995. - 17, №6. - С.58.
  8. Raransky M.D., Struk J.M., Fodchuk I.M., Shafraniuk V.P., Korovianko O.J. The capabilities of three-crystal x-ray interferometry in research of semiconductive materials. // Abstract International School-Conference on Physical Problems in Material Science of Semiconductors.- Chernivtsi. - 1995.- P.154.
  9. Raransky M.D., Fodchuk I.M., Novikow S.M., Korovianko O.J. and Gimchinsky O.G. Enhanced Diffraction Images of Microdefects with an Acoustically Excited Crystal. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. - 1996. - V. 3-4, P.153-159.
  10. Raransky M.D., Fodchuk I.M., Novikow S.M., Korovianko O.J., Marquis P.E. Topography Images of Defects in Acoustically Excited Crystals // Abstracts III European Symposium "X-Ray Topography and High Resolution Diffraction. - Palermo.-1996.-P. 66.
  11. Korovyanko O.J. Stroboscopic Topography - a New Method of Acoustically Excited Crystals Characterization. // Abstracts XII Conference on Solid State Crystals. Materials Science and Applications. - Zakopane, Poland. -1996.-P. 45.

Korovyanko O.J. "Research of influence of combined deformation fields on X-ray topography and moire images of microdefects in crystals" (Manuscript).

The dissertation for Physics and Mathematics Candidate's degree on the speciality 01.04.07-Solid State Physics, Chernivtsi State University, 1997.

X-ray diffraction in crystals with microdefects is studied by using analytical and numerical methods of Takagi-Taupin equations solution. Both section topographs and spatial intensity distributions as well as integrated reflectivity of crystal depending on sizes, concentration and localization of precipitates are obtained. Influence of linear macrodeformations such as sinusoidally varying, exponential and equidistant bend on formation of microdefect images is theoretically investigated. In the case of crystal excited by the resonant ultrasonic field simulation reveals higher than usual sensitivity of topography and diffractometry to microdefects.

Moire patterns simulated at various kinds of strain fields in crystal-analyser of LLL-interferometer and at insertion of a phase object along the path of one interfered beam permit to reconstruct images in experimental interferograms.

Коровянюк О.Ж. "Исследование влияния комбинированных деформационных полей на формирование рентгенотопографических и муаровых изображений микродефектов в кристаллах" (Рукопись).

Диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика твёрдого тела, Черновицкий государственный университет, 1997.

Дифракция рентгеновских лучей в кристаллах с микродефектами изучается с использованием аналитических и численных методов решения уравнений Такаги-Топена. Получены секционные топограммы, пространственные распределения интенсивности и интегральная отражающая способность кристалла в зависимости от размеров, концентрации и размещения микродефектов. Выполнены расчёты с целью исследования влияния одномерных макродеформаций: синусоидального, экспоненциального и эквидистантного изгибов на формирование изображений микродефектов. В случае кристалла, возбуждённого резонансным ультразвуковым полем, численное моделирование указывает на более высокую, чем обычно, чувствительность топографических и дифрактометрических методов к микродефектам.

Смоделированные муаровые картины при различных деформациях в анализаторе трёхкристального LLL-интерферометра и наличии фазового объекта на пути одного из интерферирующих пучков позволяют расшифровать экспериментальные изображения на интерферограммах.

Ключові слова: рентгенівська дифракція, топографія, рентгеноакустичний резонанс, інтегральна відбиваюча здатність, муарова картина.

Підписано до друку 26.05.97.  
Формат 60x84/16.Папір друкарський.  
Друк офсетний. Ум.друк.арк. 1,2.  
Обл.-вид. арк. 1,3. Тираж 100 прим.  
Зам. 185.

Друкарня видавництва "Рута" Чернівецького держуніверситету  
274012, Чернівці, вул. Коцюбинського, 2

AB 38.200

**AB 38.200**