УДК 548.732

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ВТОРИЧНЫХ ПРОЦЕССОВ В УСЛОВИЯХ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В КРИСТАЛЛАХ С НАРУШЕННЫМ ПОВЕРХНОСТНЫМ СЛОЕМ

В.А.Бушуев

Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова
Поступило в Редакцию 15 июня 1994 г.

В рамках статистической динамической теории рассмотрено влияние диффузно рассеянного излучения на возбуждение вторичных процессов в условиях дифракции рентгеновских лучей в кристаллах с однородно нарушенным поверхностным слоем произвольной толщины. На примере эпитаксиальной пленки с дефектами кластерного типа показано, что диффузная компонента рассеяния может заметно изменять угловое распределение фотоэлектронной эмиссии и флуоресценции по сравнению с расчетами в когерентном приближении. Исследована зависимость кривых выхода вторичных процессов от толщины приповерхностного слоя, статического фактора Дебая-Валлера, радиуса дефектов и величины деформации.

Взаимодействие рентгеновских лучей (РЛ) с веществом сопровождается, как известно, испусканием вторичных излучений в результате прямого или каскадного возбуждения различных вторичных процессов (ВП), к которым относятся эмиссия фотоэлектронов, рентгеновская флуоресценция, тепловое диффузное и комптоновское рассеяние. В последнее время для исследования структуры приповерхностных слоев полупроводниковых материалов, нарушенных в результате механической обработки, ионной имплантации, лазерного отжига, диффузии примесей или эпитаксиального наращивания, наряду с двух- и трехкристальной рентгеновской дифрактометрией активно используется метод стоячих рентгеновских волн [1,2]. Этот метод заключается в измерении угловой зависимости выхода вторичных излучений в условиях динамической брэгговской дифракции РЛ, при которой в результате когерентной суперпозиции падающего и отраженного излучений в кристалле формируется единое волновое поле (стоячая рентгеновская волна), промодулированное в пространстве вдоль вектора дифракции с периодом, равным или в целое число раз меньшим межплоскостных расстояний кристалла. Угловое распределение интенсивности вторичных излучений определяется зависящей от угла падения РЛ пространственной структурой поля, типом ВП, деформацией приповерхностного слоя кристалла, положением атомов примеси в решетке, особенностями глубины проникновения поля в кристалл.

Структура нарушенного поверхностного слоя (НПС) отличается от структуры подложки, и возможно появление тех или иных дефектов кристаллической структуры. Изменение профиля деформации вблизи поверхности кристалла и наличие дефектов приводят, как известно, к изменению профиля кривой дифракционного отражения (КДО) и к возникновению некогерентной (диффузной) компоненты интенсивности рассеяния. В случае двухкристальной схемы регистрации КДО измеряется суммарная интенсивность когерентно и диффузно рассеянных волн. Разделение этих компонент возможно в методе трехкристальной рентгеновской дифрактометрии [1]. При этом обнаружено, что диффузное рассеяние (ДР) может существенно влиять на профиль КДО [3].

Поскольку вероятность ВП определяется интенсивностью полного поля в кристалле, то очевидно, что диффузно рассеянное излучение в свою очередь также будет участвовать в возбуждении вторичных излучений. Влияние диффузной компоненты поля может приводить к заметному отличию угловых зависимостей ВП по сравнению с расчетами в рамках одного лишь когерентного приближения [4]. Следует отметить, что экспериментально разделить вклады когерентного и некогерентного каналов возбуждения ВП невозможно.

Статистическая динамическая теория дифракции, основы которой заложены в [5], позволяет наиболее последовательно описать когерентное и некогерентное рассеяние РЛ в кристаллах с хаотически распределенными микродефектами структуры. В настоящее время достаточно полно развита теория дифракции в кристаллах с однородным [5–10] и неоднородным [11–14] по глубине распределением дефектов в геометриях Лауэ и Брэгга для интегральных и дифференциальных интенсивностей рассеяния. Динамическая теория ВП в кристаллах с НПС рассматривалась лишь в когерентном приближении, т.е. без учета ДР [15–18]. Влияние дефектов на ВП сводилось к введению отличного от единицы статического фактора Дебая-Валлера, описывающего ослабление когерентного взаимодействия дифрагирующих волн.

В настоящей работе исследовано влияние диффузно рассеянного излучения на угловое распределение интенсивности вторичных процессов в условиях динамической брэгговской дифракции в кристаллах с однородно нарушенным поверхностным слоем произвольной толщины. Получены точные аналитические решения задачи, обсуждаются угловые распределения ВП и КДО в зависимости от величины статического фактора Дебая-Валлера, радиуса микродефектов, толщины приповерхностного слоя и степени его деформации.

1. Амплитуды когерентных волн с учетом влияния диффузного рассеяния

Рассмотрим наиболее простую для анализа модель бикристалла, представляющего собой толстую совершенную подложку, на поверхности которой находится нарушенный кристаллический слой толщины l с однородно распределенными микродефектами. Деформация решетки $\Delta d/d$, где d — межплоскостные расстояния в подложке, в НПС не зависит от координаты $z \leqslant l$. На кристалл падает плоская монохроматическая волна под углом $\vartheta = \vartheta_B + \Delta\vartheta$, где ϑ_B — угол Брэгга для подложки. Рассматривается симметричная дифракция в геометрии Брэгга.

Интенсивность ВП определяется эффективной интенсивностью суммарного поля на атомах, испускающих вторичное излучение:

$$I_{SP}(\Delta\vartheta) = \int_0^\infty \langle [|E_0|^2 + \beta_{hh}|E_h|^2 + 2\,\mathrm{Re}(\beta_{0h}\Phi E_0 E_h^*)] \rangle P(z)dz, \qquad (1)$$

где $E_g(z)$ — амплитуды проходящей ($g = 0$) и дифрагированной ($g = h$) волн; h — модуль вектора обратной решетки; $\beta_{gg'} = s_{gg'}/s_{00}$; $s_{gg'}$ — сечения возбуждения вторичных процессов; $\Phi(z) = \exp(i\mathbf{hu})$ — фазовый фактор решетки, $\mathbf{u}(z) = \langle \mathbf{u} \rangle + \delta\mathbf{u}$; $P(z)$ — функция вероятности выхода на поверхность кристалла вторичного излучения, возникшего на глубине z. Угловые скобки означают статистическое усреднение по мелкомасштабным флуктуационным смещениям атомов $\delta\mathbf{u}$.

В рамках статистической динамической теории амплитуды полей представляются в виде суммы $E_g = E_g^c + \delta E_g$ когерентной $E_g^c = \langle E_g \rangle$ и некогерентной δE_g компонент, где $\langle \delta E_g \rangle = 0$.

В случае фотоэлектронной эмиссии и флуоресценции диагональные сечения s_{gg} в (1) определяются изотропным (не зависящим от направления распространения волн) процессом фотопоглощения, поэтому $\beta_{gg} = 1$, а недиагональное (интерференционное) сечение $\beta_{0h} = \varepsilon_h$ определяется степенью локализации возбуждаемой электронной оболочки (где $\varepsilon_h = f_T \chi_{hi}/\chi_{0i}$, $\chi_g = \chi_{gr} + i\chi_{gi}$ — фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости идеального кристалла, f_T — тепловой фактор Дебая-Валлера). Поскольку сечения комптоновского и теплового диффузного рассеяния зависят от углов рассеяния по отношению к падающему и отраженному пучкам, то в общем случае $\beta_{hh} \neq 1$ и $\beta_{0h} \neq \varepsilon_h$. Обсуждение углового поведения сечений $s_{gg'}$ теплового диффузного и комптоновского рассеяния можно найти в работах [19] и [20–22] соответственно.

Нормированная на интенсивность ВП вдали от отражающего положения кристалла кривая выхода вторичных излучений также определяется суммой когерентного и некогерентного вкладов: $\varkappa = \varkappa^c + \varkappa^i$, где

$$\varkappa^c(\Delta\vartheta) = A^{-1} \int_0^\infty \left[I_0^c + \beta_{hh} I_h^c + 2f\,\mathrm{Re}\left(\beta_{0h}\Phi_c E_0^c E_h^{c*} \right) \right] P(z)dz,$$

$$\varkappa^i(\Delta\vartheta) = A^{-1} \int_0^\infty \left[I_0^i + \beta_{hh} I_h^i \right] P(z)dz, \qquad (2)$$

$$A = \int_0^\infty P(z)\exp(-\mu z/\gamma_0)dz.$$

Здесь $I_g^c(z) = |E_g^c|^2$ и $I_g^i(z) = \langle |\delta E_g|^2 \rangle$ — интенсивности когерентного и диффузного излучений на глубине z; $f = \langle \exp(i\mathbf{h}\delta\mathbf{u}) \rangle$ — статический фактор Дебая-Валлера, определяющий степень аморфизации НПС; $\Phi_c = \exp(i\mathbf{h}\langle\mathbf{u}\rangle)$; $\langle\mathbf{u}\rangle$ — когерентная позиция атомов примеси; μ — коэффициент фотоэлектрического поглощения падающего излучения; $\gamma_0 = \sin\vartheta_B$.

Соотношения (2) получены в предположении о пренебрежимо малом вкладе в возбуждение ВП за счет интенсивности $\langle\delta E_0 \delta E_h^*\rangle$ корреляции флуктуационных полей δE_0 и δE_h. Эта корреляция обусловлена тем, что часть диффузно рассеянного на дефектах структуры излучения в свою очередь также может испытывать когерентную дифракцию на средней решетке. Угловой интервал $\Delta\vartheta_c$, в котором реализуется эта дифракция, лежит в пределах от $\Delta\vartheta_c \simeq \lambda f/\Lambda$ до $\Delta\vartheta_c \simeq \lambda/l$ для толстого и тонкого НПС соответственно, где λ — длина волны, $\Lambda = \lambda\gamma_0/\pi|\chi_h|$ — глубина экстинкции для идеального кристалла. С другой стороны, угловая ширина «диаграммы направленности» ДР составляет $\Delta\vartheta_d \simeq \lambda/r$, где r — характерный радиус дефектов. Поскольку статистическая динамическая теория справедлива для микродефектов с $r \ll \Lambda$ и естественно считается, что $r < l$, то угловой интервал области когерентной дифракции $\Delta\vartheta_c \ll \Delta\vartheta_d$. Поэтому дополнительным вкладом во ВП вследствие корреляции полей ДР δE_0 и δE_h можно пренебречь. Однако учет отмеченной выше корреляции становится существенным при анализе тонкой структуры кикучи-линий в дифференциальном по углу выхода распределении интенсивности ДР [8].

Амплитуды когерентных волн описываются следующей системой модифицированных уравнений Такаги [8,9,12]:

$$\begin{cases} dE_0^c/dz = i(a_0 + i\rho\tau)E_0^c + ia_{-h}fE_h^c, \\ -dE_h^c/dz = i(a_0 + \eta + i\rho\tau)E_h^c + ia_hfE_0^c, \end{cases} \tag{3}$$

где

$$a_g = \pi\chi_gC/\lambda\gamma_0, \quad \rho = a_ha_{-h}(1-f^2),$$

$$\eta = 4\pi(\Delta\vartheta - \Delta\vartheta_0)\cos\vartheta_B/\lambda, \quad \Delta\vartheta_0 = -(\Delta d/d)\,\mathrm{tg}\,\vartheta_B,$$

$$\tau(\Delta\vartheta) = \int_0^\infty g(\xi)\exp[i(2a_0+\eta)\xi]d\xi.$$

Здесь C — фактор поляризации, $\tau(\Delta\vartheta)$ — зависящая от угла комплексная длина корреляции, представляющая собой фурье-компоненту собственной парной корреляционной функции Като $g(\xi)$ [5] мелкомасштабных флуктуаций $\delta\Phi = \Phi - f$ совершенства кристаллической структуры. Члены $\rho\tau$ в (3) описывают дополнительное к фотоэлектрическому поглощению затухание когерентных волн за счет оттока части излучения в некогерентные компоненты с коэффициентом диффузного поглощения $\mu_d(\Delta\vartheta) \approx 2(1-f^2)\,\mathrm{Re}\,\tau/\Lambda^2$.

Решение системы (3) с учетом граничного условия $E_0^c(0) = 1$ и непрерывности полей на границе $z = l$ пленка-подложка имеет следующий вид

$$E_g^c(z) = A_g^{(1)}e^{i\varepsilon_1 z} + A_g^{(2)}e^{i\varepsilon_2 z}, \quad o \leqslant z \leqslant l; \tag{4a}$$

$$E_0^c(z) = Be^{i\varepsilon_0 z}, \quad E_h^c(z) = R_0Be^{i\varepsilon_0 z}, \quad l < z, \tag{4b}$$

где

$$\varepsilon_\nu = (-\eta \pm q)/2, \quad q = (\psi^2 - 4f^2 a_h a_{-h})^{1/2}, \quad \psi = 2a_0 + \eta + 2i\rho\tau,$$

$$A_0^{(1)} = 1/(1-Q), \quad A_0^{(2)} = -Q/(1-Q), \quad A_h^{(\nu)} = R_\nu A_0^{(\nu)}, \tag{5}$$

$$Q = \frac{R_1 - R_0}{R_2 - R_0} \exp[i(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)l], \quad R_\nu = \frac{-\psi \pm q}{2fa_{-h}},$$

$$B = \frac{1}{1-Q}\left(e^{i\varepsilon_1 l} - Qe^{i\varepsilon_2 l}\right) e^{-i\varepsilon_0 l}.$$

Выражения для ε_0 и R_0 в (4b) получаются из ε_ν и R_ν в (5), если в них положить $f = 1$ и $\Delta d/d = 0$. При этом выбор знака перед q определяется необходимостью выполнения условия $\operatorname{Im}\varepsilon_0 > 0$.

Амплитудный коэффициент когерентного отражения от бикристалла с нарушенным поверхностным слоем равен

$$R_a^c(\Delta\vartheta) = (R_1 - R_2 Q)/(1-Q). \tag{6}$$

Таким образом, соотношения (4), (5) задают явный вид амплитуд когерентных полей на произвольной глубине z. Наличие дефектов структуры приводит к появлению статического фактора f, а также к зависящему от угла диффузному поглощению $\mu_d(\Delta\vartheta)$ в интерференционных коэффициентах поглощения $\mu_\nu = 2\operatorname{Im}\varepsilon_\nu$.

2. Интенсивности ДР

Интенсивности диффузно рассеянного излучения удовлетворяют следующей системе неоднородных уравнений с распределенными источниками ДР, пропорциональными когерентным интенсивностям I_g^c [8]

$$\begin{cases} dI_0^i/dz = -\mu_s I_0^i + \sigma I_h^i + \sigma I_h^c, \\ -dI_h^i/dz = -\mu_s I_h^i + \sigma I_0^i + \sigma I_0^c, \end{cases} \tag{7}$$

где

$$\mu_s = (\mu/\gamma_0) + \sigma_s, \quad \sigma_s = 2\operatorname{Re}(\rho\tau), \quad \sigma = 2|\rho|\operatorname{Re}\tau.$$

Сечения σ и $\sigma_s \simeq \sigma$ описывают явление вторичной экстинкции, т.е. многократное некогерентное перерассеяние интенсивностей I_g^i на дефектах структуры. Это явление становится существенным, если $\sigma \simeq \mu/\gamma_0$ и $\sigma l > 1$. Угловая зависимость сечений ДР и экстинкции σ и σ_s определяется явным видом функции $\tau(\Delta\vartheta)$, т.е. типом дефектов. Учет вторичной экстинкции приводит к тому, что в отличие от кинематического приближения интенсивность ДР $I_h^i(0) < 1$ даже в случае сильно нарушенного и толстого слоя с $\sigma l \gg 1$.

Граничные условия для системы (7) имеют вид $I_0^i(0) = I_h^i(l) = 0$.

Здесь мы пренебрегаем дифракцией некогерентных волн на средней решетке в НПС и в объеме подложки. В противном случае следовало бы учитывать, что диффузно рассеянное излучение с интенсивностью I_0^i, «родившись» в дефектном слое, проходит в подложку и частично дифракционно отражается от нее в направлении узла h. В этом случае граничное условие для $I_h^i(z)$ при $z = l$ будет уже не нулевым. Будем, однако, учитывать, что некогерентное излучение I_0^i, прошедшее в подложку, может возбуждать ВП в ее объеме.

Решение системы (7) с учетом явного вида интенсивностей когерентных полей (4) в НПС и в подложке имеет вид

$$I_g^i(z \leqslant l) = \sum_\nu \left(B_g^{(\nu)} e^{-s_\nu z} + C_g^{(\nu)} e^{-\mu_\nu z} \right) + \mathrm{Re} \left(C_g e^{i\varepsilon_{12} z} \right), \tag{8a}$$

$$I_0^i(z > l) = I_0^i(l) e^{-\mu(z-l)/\gamma_0}, \quad I_h^i(z > l) = 0, \tag{8b}$$

где

$$s_\nu = \pm \left(\mu_s^2 - \sigma^2 \right)^{1/2}, \quad \mu_\nu = 2 \,\mathrm{Im}\, \varepsilon_\nu, \quad \varepsilon_{12} = \varepsilon_1 - \varepsilon_2,$$

$$B_h^{(\nu)} = R_s^{(\nu)} B_0^{(\nu)}, \quad R_s^{(\nu)} = \sigma/(\mu_s + s_\nu), \quad (\nu = 1, 2).$$

Амплитуды неоднородного решения находятся непосредственно из (7):

$$C_g^{(\nu)} = F_g^{(\nu)} / \left(\mu_\nu^2 - s_\nu^2 \right), \quad C_g = F_g / \left(\mu_{12}^2 - s_\nu^2 \right), \tag{9}$$

где

$$\mu_{12} = i(\varepsilon_1 - \varepsilon_2^*), \quad F_g^{(\nu)} = -\sigma \left[\sigma \left| A_g^{(\nu)} \right|^2 + (\mu_s + b_g \mu_\nu) \left| A_{g'}^{(\nu)} \right|^2 \right],$$

$$F_g = -2\sigma \left[\sigma A_g^{(1)} A_g^{(2)*} + (\mu_s - b_g \mu_{12}) A_{g'}^{(1)} A_{g'}^{(2)*} \right].$$

Здесь $b_0 = 1$, $b_h = -1$; $g, g' = 0, h$; $g \neq g'$. Амплитуды однородного решения следуют из граничных условий:

$$B_0^{(1)} = (D_1 - D_2)/D, \quad B_0^{(2)} = -\left(B_0^{(1)} + C_0^{(1)} + C_0^{(2)} + \mathrm{Re}\, C_0 \right), \tag{10}$$

где

$$D_1 = R_s^{(2)} \left(C_0^{(1)} + C_0^{(2)} + \mathrm{Re}\, C_0 \right) e^{s_1 l},$$

$$D_2 = C_h^{(1)} e^{-\mu_1 l} + C_h^{(2)} e^{-\mu_2 l} + \mathrm{Re} \left(C_h e^{i\varepsilon_{12} l} \right),$$

$$D = R_s^{(1)} e^{-s_1 l} - R_s^{(2)} e^{-s_2 l}.$$

Угловое распределение КДО представляет собой сумму когерентной и диффузной компонент: $R(\Delta\vartheta) = R^c + R^i$, где $R^c = |R_a^c|^2$ (см. (6)), $R^i = I_h^i(z = 0)$ ((см. 8a)).

Явный вид выражений для кривых выхода ВП получается в результате подстановки интенсивностей и полей когерентного (4) и диффузного (8) рáссеяния в интегралы (2). В случаях флуоресценции и неупругого рассеяния соответствующие интегрирования проводятся тривиально, так как функция выхода $P(z) = \exp(-\mu' l/\gamma')$ и все подинтегральные выражения имеют простой экспоненциальный вид (здесь μ' — коэффициент поглощения вторичного излучения, γ' — косинус угла между нормалью к поверхности и направлением регистрации ВП). В

[17] показано, что и в случае фотоэлектронной эмиссии можно пользоваться приближенным выражением $P(z) \simeq \exp(-az/l')$, где l' — эффективная глубина выхода фотоэлектронов, а величина коэффициента $a \simeq 1$ определяется энергией фотоэлектронов и материалом кристалла. Окончательные формулы для $\varkappa(\Delta\vartheta)$ имеют довольно громоздкий вид, поэтому ограничимся здесь лишь общим указанием процедуры получения точных аналитических выражений для кривых выхода ВП. Если пренебречь влиянием ДР, т.е. считать $I_g^i = 0$ и $\mu_d = 0$, то результаты настоящей работы сведутся к [17].

Отметим также, что задача о влиянии диффузно рассеянного излучения на ВП в определенной степени близка к вопросу об учете непрямого возбуждения фотоэмиссии и флуоресценции в [23,24]. Действительно, как и в случае непрямого возбуждения, вызванное диффузным рассеянием вторичное излучение несет информацию не только о структуре стоячего поля на некоторой глубине, но и определяется уровнем структурных нарушений во всем объеме НПС.

3. Обсуждение результатов численных расчетов

Перейдем к обсуждению результатов влияния интенсивности диффузно рассеянных волн на КДО и ВП в зависимости от толщины нарушенного слоя, фактора аморфизации и радиуса дефектов. Рассмотрим нарушенный слой с дефектами в виде хаотически распределенных аморфных сферических кластеров с радиусом r. В этом случае $\langle\exp(i\mathbf{hu})\rangle = 0$ внутри кластера и $\langle\exp(i\mathbf{hu})\rangle = 1$ вне его [7]. Такие дефекты могут образовываться, например, в выращенных по методу Чохральского кристаллах кремния в результате их термообработки при температуре $\approx 1000\,^\circ$C (кластеры SiO_2). Для действительной и мнимой частей длины корреляции $\tau(\Delta\vartheta)$ получим [8,12]

$$\mathrm{Re}\,\tau = (6r/x^4)[0.5x^2 - x\sin x - \cos x + 1],$$

$$\mathrm{Im}\,\tau = (2r/x^4)[x^3 + 3(x\cos x - \sin x)], \qquad (11)$$

где $x = 2\eta r$, $\mathrm{Re}\,\tau(0) = 3r/4$. Функции $\mathrm{Re}\,\tau$ и $\mathrm{Im}\,\tau$ являются соответственно симметричной и антисимметричной по отношению к знаку η. Статический фактор $f = \exp(-L)$, где $L = c(4\pi r^3/3)$ — объемная доля дефектов, c — концентрация кластеров [7].

В ряде случаев можно пользоваться простой моделью дефектов с корреляционной функцией вида $g(\xi) = \exp(-\xi/r)$, для которой

$$\mathrm{Re}\,\tau = r/(1+y^2), \quad \mathrm{Im}\,\tau = ry/(1+y^2), \qquad (12)$$

где $y = \eta r$. Функция $\mathrm{Re}\,\tau$ (11), определяющая угловые распределения сечений ДР, вторичной экстинкции и коэффициента диффузного поглощения, шире лоренцевской кривой (12) в 1.74 раза.

В случае достаточно большой концентрации примесей упругие напряжения в слое могут сниматься за счет образования дислокаций, формирующих в НПС мозаичную структуру. При этом $f \ll 1$ и

$$\mathrm{Re}\,\tau(\Delta\vartheta) \approx (3/4)r\cos\vartheta_B(\Delta\vartheta_r/\Delta_e)\exp\left[-\pi(\Delta\vartheta/\Delta_e)^2\right], \qquad (13)$$

где $\Delta\vartheta_r = 2\lambda/3r\sin 2\vartheta_B$ — ширина рефлекса отдельного блока мозаики с радиусом r, $\Delta_e = \left(\Delta\vartheta_r^2 + \Delta^2\right)^{1/2}$, Δ — ширина функции углового распределения разориентации блоков [9].

Следует отметить, что независимо от конкретного вида корреляционной функции $g(\xi)$ выполняется соотношение

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \operatorname{Re}\tau d\Delta\vartheta = 2\pi \int\limits_{0}^{\infty} g(\xi)\delta(h\operatorname{ctg}\vartheta_B)d\xi = \lambda/4\cos\vartheta_B.$$

Отсюда для интегрального сечения ДР $\sigma_{\rm int}$ следует, что $\sigma_{\rm int} = Q(1 - f^2)/\gamma_0$, где $Q = \pi^2|\chi_h|^2/\lambda\sin 2\vartheta_B$ — интегральная отражательная способность единицы объема кристалла.

Расчеты проводились для случая отражения (220) σ-поляризованного $\mathrm{Cu}K_\alpha$-излучения от кристаллов кремния ($\Lambda = 2.15\,\mu$m) с различными параметрами НПС. Глубина выхода фотоэлектронов $l' = 0.35\,\mu$m, $a = 2.3$; для $\mathrm{Si}K_\alpha$-флуоресценции $l' = 1/\mu' = 13.4\,\mu$m.

На рис. 1 представлены угловые зависимости когерентных и некогерентных компонент интенсивностей отражения и фотоэлектронной эмиссии для НПС с $\Delta d/d = 0$ и $f = 0.5$. Для сравнения приведены также соответствующие кривые R_{id} и $\varkappa_{id}$ для идеального кристалла ($f = 1$, $\Delta d/d = 0$). На практике сведение величины $\Delta d/d$ к минимуму в легированных эпитаксиальных структурах достигается путем добавления примесных атомов с такими ковалентным радиусом и концентрацией, которые компенсируют первоначальную деформацию $\Delta d/d$ [17]. В случае ионно-имплантированных кристаллов возможно получение практически однородного ступенчатого распределения $\Delta d(z)$ с достаточно резкой границей в результате импульсного лазерного отжига [25].

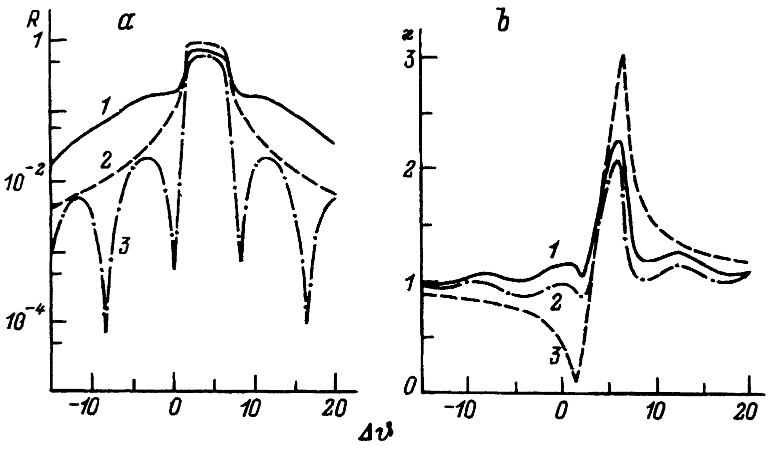

Рис. 1. Влияние диффузного рассеяния на угловые распределения КДО (a) и фотоэмиссии (b) в случае НПС с $l = \Lambda$, $\Delta d/d = 0$, $f = 0.5$, $r = 0.4\,\mu$m.

1 — полные интенсивности, *2* — когерентные компоненты, *3* — кривые R и $\varkappa$ для идеального кристалла.

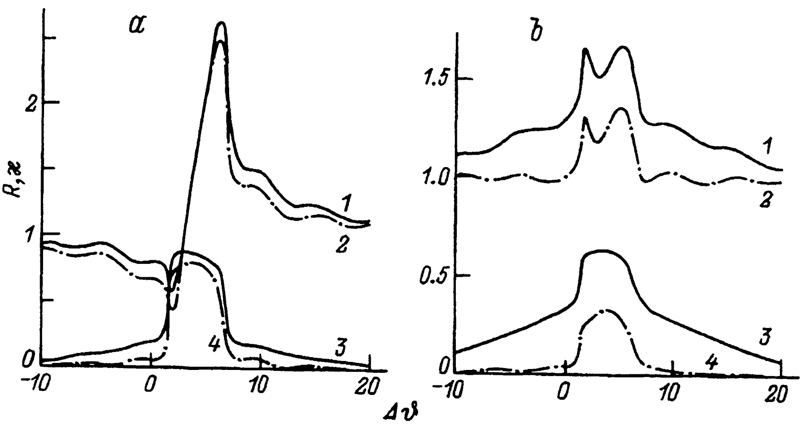

Рис. 2. Зависимость кривых отражения и фотоэмиссии от величины статического фактора в НПС при $l = 1.5\Lambda$, $\Delta d/d = 0$ и $r = 0.4\,\mu$m; $f = 0.8$ (*a*) и 0.1 (*b*). *1* — $\varkappa$, *2* — $\varkappa^c$, *3* — R, *4* — R^c.

Из рис. 1 видно, что диффузно рассеянное излучение приводит к поднятию кривых R и $\varkappa$ (в основном на их хвостах) по сравнению с R^c и $\varkappa^c$ в когерентном приближении. Осцилляции кривых обусловлены отличием длин экстинкции Λ и Λ/f для подложки и НПС, причем эти осцилляции более четко выражены на кривых фотоэмиссии в силу их чувствительности к фазе отраженной волны [1,2]. Диффузная составляющая сглаживает осцилляции. Заметим, что в отличие от рассмотренного выше случая с $\Delta d/d = 0$ более известен эффект толщинных осцилляций вследствие интерференции волн, отраженных от подложки и от деформированного слоя с $\Delta d/d \neq 0$.

Размер дефектов влияет на ширину хвостов кривых R и $\varkappa$. Чем меньше радиус дефектов, тем в более широком угловом интервале проявляется влияние диффузно рассеянных волн.

Интенсивность и соответственно влияние ДР возрастают с увеличением толщины нарушенного слоя и с уменьшением величины статического фактора (рис. 2). Уменьшение f при постоянном радиусе дефектов r означает увеличение их концентрации. Из рис. 2,*b* следует, что при достаточно малых значениях f кривые КДО и ВП обусловлены в основном интенсивностью диффузного рассеяния, причем в силу малой глубины выхода фотоэлектронов кривая $\varkappa$ приближается к кривой вида $\varkappa \approx 1 + R$. Это видно и непосредственно из (2), так как при $z \ll l'$ интенсивность ДР $I_0^i \approx 0$, а $R \approx I_h^c(0) + I_h^i(0)$.

В результате ДР глубина провала на кривой выхода флуоресценции, который близок по форме к обращенной кривой отражения $1 - R$, уменьшается по сравнению как со случаем идеального кристалла, так и со случаем когерентного приближения (рис. 3). Ширина провала в случае сильно нарушенного слоя увеличивается и определяется в основном шириной углового распределения ДР, т.е. размерами дефектов. Поскольку глубина выхода флуоресценции $l' \gg \Lambda$, то влияние ДР на $\varkappa$ в случае тонких слоев слабее, чем для фотоэмиссии. Вклад диффузной компоненты ослабляется также и при использовании отра-

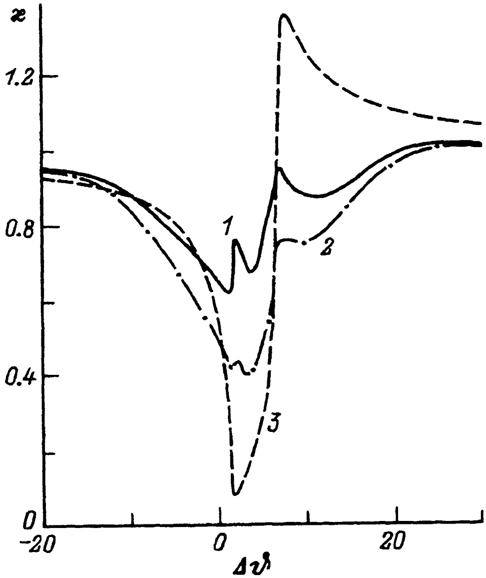

Рис. 3. Влияние диффузного рассеяния на SiK_α-флуоресценцию из НПС с $l = 1.5\Lambda$, $\Delta d/d = 0$, $f = 0.1$, $r = 0.5\,\mu$m. *1* — $\varkappa$, *2* — $\varkappa^c$, *3* — $\varkappa_{id}$.

жений более высоких порядков, так как при этом уменьшается параметр l/Λ.

В случае НПС с $\Delta d/d \neq 0$ (например при внедрении легких атомов в узлы решетки деформация отрицательна) диффузная составляющая уменьшает контраст толщины осцилляций (рис. 4). При достаточно большой концентрации дефектов пик дополнительного отражения и максимум кривой $\varkappa$ в области углов $\Delta\vartheta \approx \Delta\vartheta_0 > 0$ могут быть почти полностью обусловлены диффузным рассеянием (рис. 4,*b*). Если не учитывать это обстоятельство, то по виду КДО на рис. 4,*b* можно

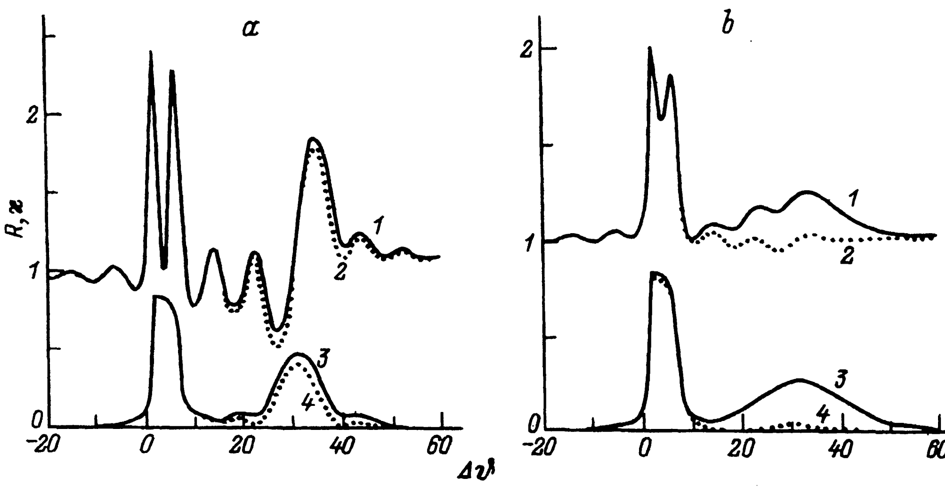

Рис. 4. Кривые отражения и фотоэлектронной эмиссии при дифракции в эпитаксиальной структуре с параметрами $l = \Lambda$, $\Delta d/d = -3 \cdot 10^{-4}$, $r = 0.4\,\mu$m. Статический фактор $f = 0.8$ (*a*) и 0.2 (*b*). *1* — $\varkappa$, *2* — $\varkappa^c$, *3* — R, *4* — R^c.

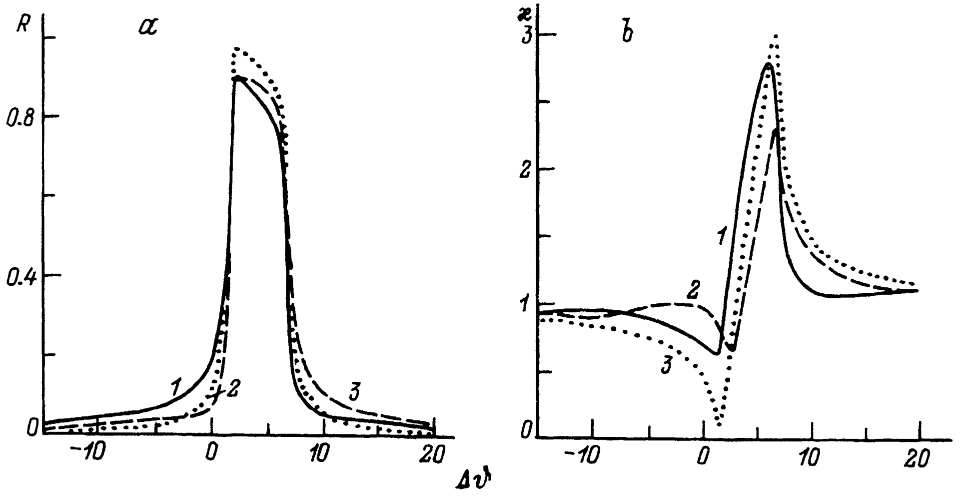

Рис. 5. Кривые отражения (*a*) и фотоэмиссии (*b*) в случае НПС с деформацией $\Delta d/d = 2 \cdot 10^{-5}$ (кривые *1*) и $\Delta d/d = -2 \cdot 10^{-5}$ (кривые *2*); $l = 0.5\Lambda$, $f = 0.7$, $r = 0.3\,\mu$m.
3 — расчет для идеального кристалла.

сделать вывод о наличии деформированного кристаллического слоя и оценить его толщину по ширине дополнительного пика. Однако такая оценка на основании анализа одной лишь КДО будет ошибочной, поскольку ширина этого пика в данном случае определяется размером дефектов. Вместе с тем резкое ослабление амплитуд осцилляций на кривой выхода фотоэлектронов свидетельствует о высокой степени аморфизации НПС, что в сочетании с анализом КДО позволяет дать более корректную интерпретацию характеристик НПС.

На рис. 5 представлены результаты расчета кривых отражения и фотоэлектронной эмиссии в случае НПС с очень малыми деформациями решетки $\Delta d/d = \pm 2 \cdot 10^{-5}$, при которых максимум отражения от слоя смещен от КДО подложки на величину $\Delta\vartheta_0$, примерно в 3 раза меньшую ширины КДО. Видно, что кривые отражения практически совпадают с КДО от идеального кристалла, тогда как угловые зависимости фотоэмиссии заметно отличаются. Диффузное рассеяние приводит к их сглаживанию и некоторому уширению по сравнению с расчетом в когерентном приближении. В связи с этим отметим, что в [17] при анализе экспериментальных и теоретических кривых выхода фотоэлектронов из кристалла кремния с автоэпитаксиальной пленкой на поверхности не удалось получить удовлетворительного согласия. Исследуемые в [17] пленки оказались достаточно дефектными — статический фактор менялся в интервале от $f = 0.45$ до $f = 0.78$. Возможно, что одной из причин обнаруженного в [17] расхождения является влияние диффузно рассеянной интенсивности на возбуждение фотоэлектронов.

Таким образом, в настоящей работе показано, что диффузная компонента рассеяния может заметным образом влиять на форму и интенсивность кривых выхода вторичных излучений. Это необходимо учитывать при интерпретации результатов измерений, поскольку прямые экспериментальные методы разделения когерентной и некогерентной составляющих интенсивности выхода ВП отсутствуют. В случае идеальной подложки и тонкого НПС с $l \ll \Lambda$ этим эффектом можно пренебречь. Однако, если подложка не совсем идеальна, влияние диффузной компоненты возрастает, так как она формируется в относительно толстом слое с толщиной $\approx \gamma_0/2\mu \gg \Lambda$.

Список литературы

[1] Афанасьев А.М., Александров П.А., Имамов Р.М. Рентгенодифракционная диагностика субмикронных слоев. М.: Наука, 1989. 152 с.
[2] Бушуев В.А., Кузьмин Р.Н. Вторичные процессы в рентгеновской оптике. М.: Изд-во МГУ, 1990. 112 с.
[3] Zaumseil P. // Phys. Stat. Sol. (a). 1985. V. 91. N 1. P. K31–K33.
[4] Бушуев В.А. Тез. докл. Всес. научн. семинара «Математическое моделирование и применение явлений дифракции». М.: МГУ, 1990. С. 85.
[5] Kato N. // Acta Cryst. A. 1980. V. 36. N 5. P. 763–778.
[6] Holy V., Gabrielyan K.T. // Phys. Stat. Sol. (b). 1987. V. 140. N 1. P. 39–50.
[7] Holy V., Kubena J. // Phys. Stat. Sol. (b). 1987. V. 141. N 1. P. 35–45.
[8] Бушуев В.А. // Деп. в ВИНИТИ, рег. № 486-В88. М., 1988. 51 с.
[9] Бушуев В.А. // Кристаллография. 1989. Т. 34. № 2. С. 279–287.
[10] Поляков А.М., Чуховский Ф.Н., Пискунов Д.И. // ЖЭТФ. 1991. Т. 99. № 2. С. 589–609.
[11] Петрашень П.В. // Металлофизика. 1986. Т. 8. № 1. С. 35–43.
[12] Бушуев В.А. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 11. С. 70–78.
[13] Пунегов В.И. // Кристаллография. 1990. Т. 35. № 3. С. 576–583.
[14] Пунегов В.И. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 1. С. 234–242.
[15] Афанасьев А.М., Кон В.Г. // ЖЭТФ. 1978. Т. 74. № 1. С. 300–313.
[16] Kohn V.G., Kovalchuk M.V. // Phys. Stat. Sol. (a). 1981. V. 64. N 1. P. 359–366.
[17] Ковальчук М.В., Кон В.Г., Лобанович Э.Ф. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 11. С. 3379–3387.
[18] Бушуев В.А., Чен Т. // Вестн. Моск. ун-та, Физ. Астрон. 1988. Т. 29. № 6. С. 58–63.
[19] Afanas'ev A.M., Azizian S.L. // Acta Cryst. A. 1981. V. 37. N 1. P. 125–130.
[20] Schulke W., Mourikis S. // Acta Cryst. A. 1986. V. 42. N 1. P. 86–98.
[21] Бушуев В.А. // ЖТФ. 1988. Т. 58. № 4. С. 800–810.
[22] Bushuev V.A., Kazimirov A.Yu., Kovalchuk M.V. // Phys. Stat. Sol. (b). 1988. V. 150. N 1. P. 9–18.
[23] Афанасьев А.М., Имамов Р.М., Маслов А.В. и др. // Кристаллография. 1991. Т. 36. № 2. С. 513–530.
[24] Маслов А.В., Мухамеджанов Э.Х., Бжеумихов А.А. // ФТТ. 1992. Т. 34. № 8. С. 2319–2325.
[25] Бушуев В.А., Петраков А.А. // ФТТ. 1993. Т. 35. № 2. С. 355–364.