

# О природе прямого изображения дефектов в дифракционных методах рентгеновской топографии

© Э.В. Суворов, И.А. Смирнова

Институт физики твердого тела РАН,  
Черноголовка, Московская обл., Россия

E-mail: suvorov@issp.ac.ru

(Поступила в Редакцию 11 мая 2010 г.)

Проанализированы закономерности рассеяния рентгеновского излучения в наиболее искаженной области кристалла, где локальные разориентации решетки, связанные с деформационным полем дефекта, максимальны. Высказано предположение о том, что одним из возможных механизмов образования прямого изображения является рассеяние волнового поля на псевдогранице в области локальных разориентаций, где кристалл выходит из отражающего положения вблизи оси дефекта, например ядра дислокации. На примерах численного моделирования секционных топограмм модельных дефектов продемонстрировано образование прямого изображения. В качестве модельного образца использовался совершенный монокристалл, внутри которого в определенном кристаллографическом направлении располагается тонкая трубка, заполненная тем же монокристаллическим материалом с ориентацией, отличной от основного кристалла. Следовательно, если модельный кристалл установлен в отражающее положение, то для области внутри трубки условия Брэгга не выполняются. Численные топограммы показывают, что прямое изображение образуется на границе трубки модельного кристалла.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 09-02-00731-а).

## 1. Введение

Изучение рассеяния рентгеновских лучей на неоднородностях кристаллической решетки, связанных с дефектами, представляет интерес по нескольким причинам. Во-первых, такой интерес связан с фундаментальной проблемой — развитием динамической теории рассеяния для реального кристалла. Во-вторых, знание особенностей дифракции позволяет качественно, а в ряде случаев и количественно анализировать рентгеновский дифракционный контраст дефектов кристаллической решетки [1–3].

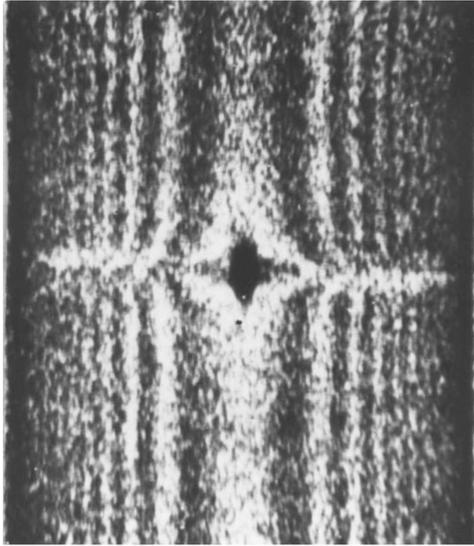
Прямая задача — получение рентгеновского изображения (численное моделирование) — решается довольно просто при помощи уравнений Такаги. В большинстве случаев они позволяют получить трехмерную карту волнового поля внутри кристалла, если известно выражение для функции поля смещений кристаллической решетки вблизи дефекта. Однако решение обратной задачи, т.е. получение поля смещений (точнее, получение функции локальных разориентаций решетки, связанных с дефектом) по экспериментальному рентгеновскому дифракционному изображению (рентгеновской топограмме), как правило, не представляется возможным.

Сложность проблемы связана с тем, что длина волны рентгеновского излучения соизмерима с величиной параметра решетки  $\lambda \sim d$  в отличие от оптики видимого света, где  $\lambda \gg d$ , и электронной микроскопии, где  $\lambda \ll d$ . Поэтому углы дифракции для рентгеновского диапазона длин волн составляют  $10^\circ$  и более. В результате в формировании каждой детали рентгеновского изображения принимают участие области кристалла, протя-

женные не только в направлении просвечивания, но и в направлении вектора дифракции — так называемого треугольника Бормана (или треугольника рассеяния, образованного направлениями падающего и дифрагированного лучей). Это приводит к тому, что каждая точка на входной поверхности кристалла всегда отображается на его выходной поверхности полоской протяженностью порядка  $2t \operatorname{tg} \theta$ , где  $t$  — толщина образца. Изображения соседних точек перекрываются. Отсюда следует, что в рентгеновской дифракционной микроскопии, например, невозможно использовать широко применяемый в электронной микроскопии метод колонкового приближения. Изображения дефектов в методах рентгеновской топографии значительно сложнее и многообразнее по сравнению с электронно-микроскопическими [4].

В представленной работе проанализированы закономерности рассеяния рентгеновского излучения в наиболее искаженной области кристалла, например вблизи ядра дислокации, т.е. при формировании прямого изображения. Прямое изображение дефекта — эта та часть дифракционного изображения, которое возникает в области пересечения пучка падающего излучения с осью дефекта. Как правило, прямое изображение — это яркое пятно на секционной топограмме, сформированное в наиболее сильно искаженной области кристалла вблизи ядра дислокации и спроектированное в направлении дифрагированного пучка. Этот термин был предложен Отье [1] для классификации деталей дифракционного изображения дефектов на секционных топограммах.

Однако до настоящего времени нет полной ясности относительно физической природы прямого изображения. С одной стороны, в области сильных разориентаций



**Рис. 1.** Экспериментальная секционная топограмма монокристалла кремния с прямолинейной винтовой дислокацией. Ось дислокации параллельна вектору дифракции  $[220]$ . Излучение  $MoK_{\alpha 1}$ , толщина кристалла  $410 \mu m$ , дислокация располагается на глубине, равной половине толщины кристалла. На топограмме наряду с ярким центральным пятном прямого изображения наблюдается множество интерференционных полос — маятниковых полос, обусловленных расщеплением листов дисперсионной поверхности в окрестности точного положения Брэгга. Изгиб этих полос вблизи оси дислокации связан с упругим полем дислокации.

решетки вблизи оси дефекта рентгеновский пучок даже при незначительной расходимости будет формировать в интеграле более яркое отражение от этой области дефекта. С другой стороны, сильно искаженная область уже не является идеальной решеткой и должна отражать по „кинематическим“ законам. Поэтому прямое изображение часто называют кинематическим.

Имеется и еще один очень важный механизм, ответственный за образование прямого изображения. Функция эффективных разориентаций вблизи ядра дислокаций очень быстро меняется при приближении к оси дислокации, выходит за пределы кривой отражения, и локальная область вблизи ядра для падающей рентгеновской волны становится просто поглощающим материалом. Таким образом, вокруг оси дислокации существует область, в которой рентгеновское волновое поле практически не взаимодействует с кристаллической решеткой. Следовательно, возникает псевдограница, на которой должно происходить рассеяние рентгеновской волны, так же как это происходит в случае ограниченного кристалла, т.е. будет возникать отражение, как на зеркальной поверхности, с той лишь разницей, что каждый раз образуются нормальная и аномальная волны. Возникновение новых волн при взаимодействии проходящей волны с границей раздела получило в литературе название межветвевое рассеяние [1–3].

На рис. 1 приведен пример экспериментальной секционной топограммы с изображением прямолинейной винтовой дислокации. Ось дислокации параллельна вектору дифракции  $[220]$  и располагается на глубине, равной половине толщины кристалла. На фоне интерференционных полос хорошо просматривается прямое изображение дислокации в виде яркого пятна в центре топограммы. На экспериментальной топограмме наблюдается изгиб интерференционных полос вблизи оси дислокации. Этот изгиб полос, как было показано ранее [5], связан с убывающим упругим полем дислокации  $\sim 1/r$ .

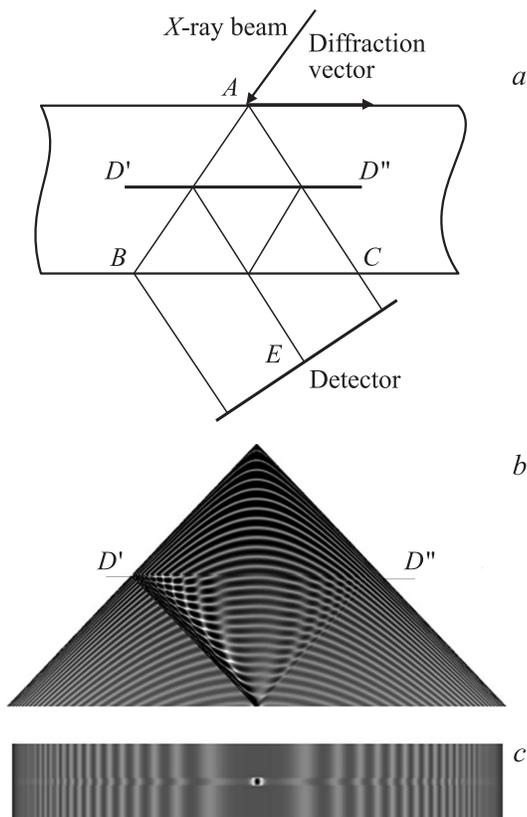
Многочисленные примеры показывают, что интерпретация и анализ дифракционных изображений существенно упрощаются для случаев, когда ось дефекта совпадает с одной из осей системы координат [1–3,5]. Соответствующие проекции получили в литературе название „особых положений дефекта“.

## 2. Численный эксперимент и его обсуждение

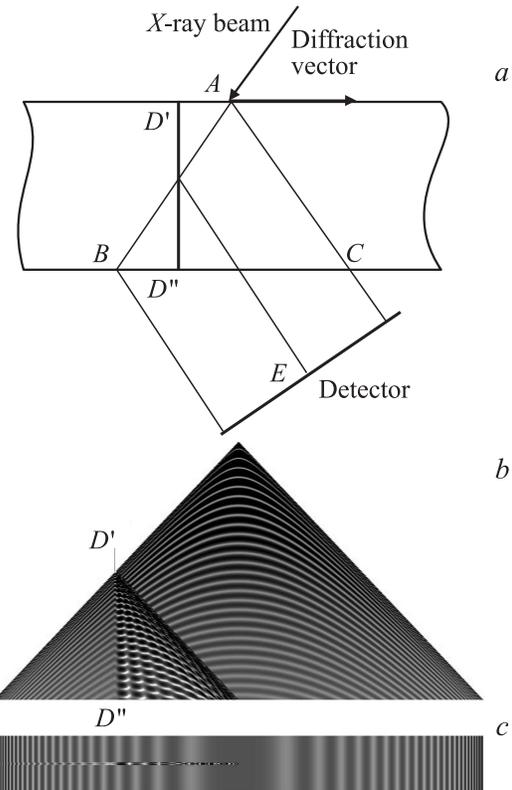
Чтобы подробнее рассмотреть соображение, приведенное выше, выполним численное моделирование рассеяния рентгеновской волны в кристаллической решетке, находящейся в отражающем положении, используя уравнения Такаги [6,7]. Пусть внутри этой решетки расположен дефект в виде тонкой прямолинейной трубочки диаметром порядка  $1 \mu m$ , материал которой полностью вышел из отражающего положения и все взаимодействие его с рентгеновской волной сводится к фотоэлектрическому поглощению. Предлагаемая модель позволяет полностью исключить влияние убывающего упругого поля дислокации  $\sim 1/r$  на формирование изображения и исследовать в чистом виде физику образования прямого изображения дефекта. Рассмотрим три особых случая геометрии такой модели, о которых говорилось ранее во Введении. На рис. 2–5 представлены схема эксперимента (а) и результаты численного моделирования: численная модель рентгеновского волнового поля в треугольнике рассеяния (b) и соответствующая численная секционная топограмма (c). Толщина кристалла составляет  $1000 \mu m$ , в расчетах использовалось отражение от кристаллографических плоскостей  $(220)$ , излучение  $MoK_{\alpha 1}$ . В отличие от экспериментальной топограммы (рис. 1) на численных топограммах (рис. 2–5) полностью отсутствуют новые интерференционные полосы и изгиб старых интерференционных полос вблизи оси дефекта, так как в рассматриваемой модели отсутствует убывающее поле локальных разориентаций кристаллической решетки, связанное с деформационным полем дефекта.

2.1. Геометрия 1. Пусть ось дефекта параллельна вектору дифракции и лежит на глубине, равной половине толщины кристалла. Анализ приведенных результатов показывает, что и треугольник рассеяния волнового

поля, и численная топограмма такой модели практически совпадают с соответствующими изображениями, полученными для случая обычной винтовой дислокации, когда ее ось совпадает с направлением вектора дифракции [8,9]. Конечно, имеются некоторые тонкие различия в изображениях, связанные с упругим полем дислокации, убывающим как  $1/r$ . Эти особенности обсуждались ранее и были описаны в работах [8,10]. Здесь мы рассмотрим лишь образование прямого изображения. Прямое изображение трубки-модели в плоскости рассеяния формируется в результате дифракционного взаимодействия новых и старых волновых полей на границе раздела. Рождение новых волновых полей происходит точно так же, как на любой границе раздела [11–13]. Таким образом, прямое изображение, формируемое в данной геометрии, есть результат суперпозиции всех волновых полей, рожденных в точках поверхности раздела трубки и кристаллической решетки. Похожее явление наблюдается, например, на дефектах упаковки или на двухкристалльном рентгеновском интерферометре. В ли-



**Рис. 2.** Схема эксперимента (а) и результаты численного моделирования: численная модель рентгеновского волнового поля в треугольнике рассеяния (b) и соответствующая численная секционная топограмма (c).  $D'D''$  — ось дефекта.  $ABC$  — треугольник рассеяния,  $E$  — прямое изображение дефекта на плоскости детектора. Толщина кристалла составляет  $1000 \mu\text{m}$ , в расчетах использовалось отражение от кристаллографических плоскостей (220), излучение  $\text{MoK}_{\alpha 1}$ . Ось дефекта  $D'D''$  располагается параллельно вектору дифракции в середине кристалла по глубине в плоскости рассеяния.



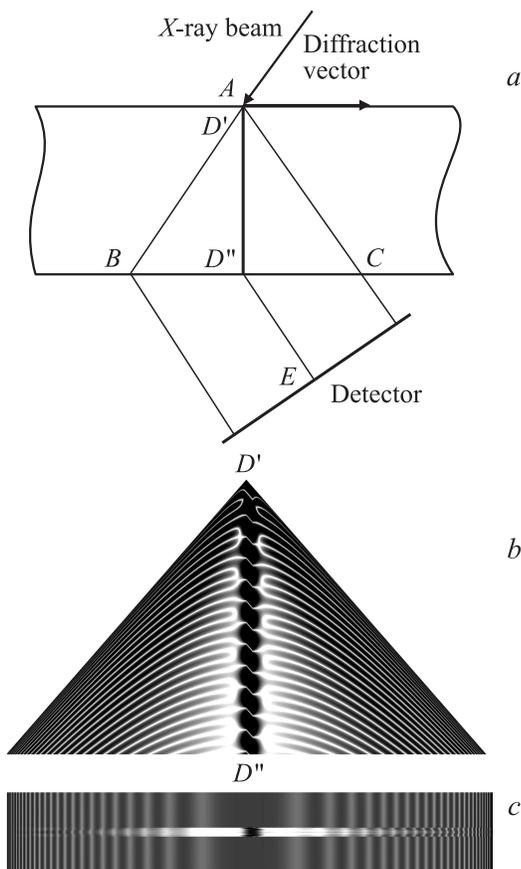
**Рис. 3.** То же, что на рис. 2, в случае, когда ось дефекта  $D'D''$  располагается в плоскости рассеяния перпендикулярно вектору дифракции и пересекает падающий пучок в середине кристалла.

тратуре этот эффект получил название дифракционной фокусировки рентгеновских лучей [14,15]. Именно этот результат мы и фиксируем в виде прямого изображения дефекта на секционной топограмме.

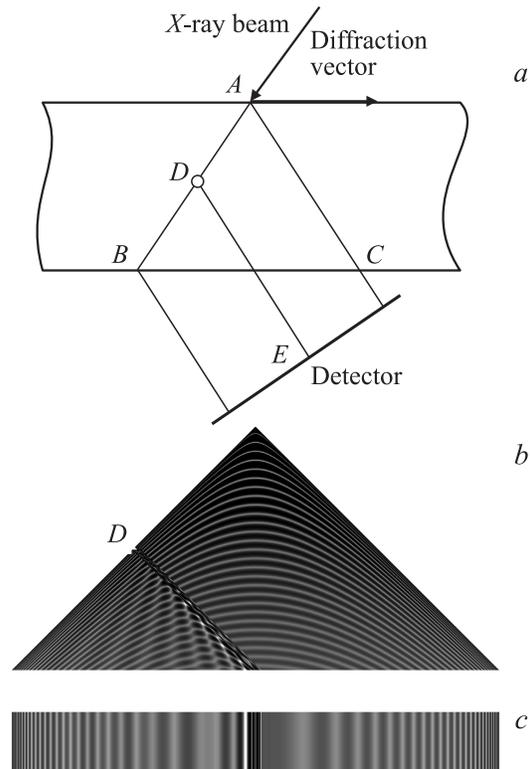
Следует подчеркнуть, что это конечно не единственный механизм образования прямого изображения. Как уже упоминалось во Введении, образование прямого изображения является, по-видимому, следствием нескольких совместно действующих причин. Оно обусловлено локальной разориентацией решетки вблизи ядра дислокации, размерами источника, некогерентностью падающего излучения. Однако это уже механизмы другой природы, и их обсуждение выходит за рамки данного рассмотрения.

**2.2. Геометрия 2.** Рассмотрим положение дефекта, когда его ось лежит в плоскости рассеяния и перпендикулярна вектору дифракции. При этом ось дефекта расположена вертикально в плоскости рассеяния. Рассмотрим два случая: когда ось дефекта пересекает направление падающего пучка примерно на середине кристалла по глубине и когда она располагается вдоль биссектрисы верхнего угла треугольника рассеяния. Результаты моделирования первого случая представлены на рис. 3. Из области пересечения с первичным пучком наблюдается яркий узкий „пржектор“ в направлении

дифрагированного луча. Он образуется в результате дифракционного отражения падающей волны от стенок трубки. Этот „пржектор“ и есть прямое изображение. Такие же отраженные волны возникают и во всех других точках дефекта. Отраженные волны интерферируют между собой и первичной волной в треугольнике рассеяния, образуя осциллирующий хвост. Однако эти рассеянные волны имеют существенно меньшие амплитуды по сравнению с „пржектором“, так как они образуются за счет отражения вторичных волн. Как видно из рисунка, амплитуды этих волн осциллируют по всей площади треугольника рассеяния. Кроме того, амплитуды вторичных волн убывают по мере удаления от оси первичного пучка к центру треугольника рассеяния. На секционной топограмме (рис. 3, *c*) отчетливо наблюдается формирование прямого изображения дефекта и динамического осциллирующего хвоста, расположенного между прямым изображением и направлением падающей волны. Таким образом, так же как и в геометрии 1, образование прямого изображения здесь связано с дифракционным отражением падающей волны от стенок трубки, материал которой локально выходит из отражающего положения.



**Рис. 4.** То же, что на рис. 2, в случае, когда ось дефекта  $D'D''$  располагается в плоскости рассеяния вдоль биссектрисы треугольника рассеяния перпендикулярно вектору дифракции.



**Рис. 5.** То же, что на рис. 2, в случае, когда ось дефекта  $D$  располагается перпендикулярно плоскости рассеяния и вектору дифракции в середине кристалла по глубине.

Во втором случае ось дефекта располагается вдоль биссектрисы верхнего угла треугольника рассеяния (рис. 4, *a*). Волновое поле в треугольнике рассеяния фактически захватывается трубкой, и образуется своеобразный волноводный канал, по которому волна распространяется, отражаясь то от одной, то от другой стенки трубки (рис. 4, *b*). Рентгеновская волна распространяется в этом канале примерно так же, как в кристаллических коллиматорах Кору–Кикуты [16–18]. По обе стороны от канала интенсивность волнового поля ослабляется за счет того, что часть поля концентрируется внутри волноводной трубки. Это хорошо иллюстрируется секционной топограммой (рис. 4, *c*). Образование изображения в центре топограммы здесь, так же как и в предыдущих случаях, обусловлено рассеянием на границах трубки и идеального кристалла. Этот случай хорошо известен в рентгеновской топографии, когда формируется изображение дислокаций, перпендикулярных поверхности кристалла, в виде многолепестковых розеток. Обсуждаемые результаты хорошо согласуются с многочисленными экспериментальными исследованиями [19–21].

2.3. Геометрия 3. Рассмотрим, наконец, третий случай, когда ось дефекта перпендикулярна плоскости дифракции (рис. 5, *a*). В отличие от рассмотренных выше двух предыдущих геометрий это наиболее простой случай, так как область взаимодействия волнового поля с кристаллом в треугольнике рассеяния локализована

и ограничивается областью сечения трубки-модели с плоскостью дифракции.

Все процессы рассеяния протекают на линии сечения трубки-модели плоскостью рассеяния. Из этой области возникает яркий прожектор в направлении дифрагированного пучка. Этот луч и является в данном случае прямым изображением нашего модельного дефекта. Он образуется за счет рассеяния на стенках трубки, точно так же как это происходит в ограниченном кристалле [11,12]. На рис. 5, *c* приведена соответствующая численная секционная топограмма. Естественно, что внутри треугольника, образованного направлением падающего пучка и лучом, формирующим прямое изображение, происходит интерференция старого волнового поля с новым, возникшим при рассеянии основного волнового поля на стенках трубки. Этот процесс хорошо виден из рис. 5, *b*, *c*.

### 3. Заключение

Таким образом, анализ описанного выше численного эксперимента позволяет утверждать, что одним из факторов, определяющих образование прямого изображения в методах рентгеновской дифракционной топографии, является рассеяние рентгеновской волны на псевдогранице в области локальных разориентаций решетки вблизи оси дислокаций, где сильно искаженная область решетки выходит из отражающего положения. Именно эта локальная переходная область, а не сама сильно искаженная часть кристалла вблизи оси дислокации является источником вторичных волн, формирующих прямое изображение.

Предложенная модель образования прямого изображения дефектов хорошо согласуется с уже существующим экспериментальным материалом. Она, во-первых, показывает, что прямое изображение будет возникать только тогда, когда какая-либо локальная область выходит из отражающего положения. Поэтому становится понятно, почему слабые дефекты не дают прямого изображения как, например, в работе [22]. Во-вторых, расходимость первичного пучка должна приводить к увеличению размеров прямого изображения в направлении вектора дифракции. Естественно, интенсивность и размеры прямого изображения должны увеличиваться при увеличении размеров источника, а также за счет монохроматичности рентгеновского излучения. Что обычно и наблюдается на экспериментальных секционных топограммах.

### Список литературы

- [1] A. Authier. *Dynamical theory of X-ray diffraction*. Science Publications, Oxford (2001). 734 p.
- [2] D.K. Bowen, B.K. Tanner. *High resolution X-ray diffractometry and topography*. Taylor & Francis Group, London (1998). 237 p.

- [3] L.V. Azaroff. *X-rays diffraction*. McGraw-Hill Book Company, N.Y. (1974). 617 p.
- [4] П. Хирш, А. Хови, Р. Николсон, Д. Пэшли, М. Уэлан. *Электронная микроскопия тонких кристаллов*. Мир, М. (1968). 574 с.
- [5] Э.В. Суворов, И.Л. Шульпина. *Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исслед.* 7, 3 (2001).
- [6] S. Takagi. *J. Phys. Soc. Jpn.* **26**, 1239 (1969).
- [7] D. Toupin. *Acta Cryst.* **23**, 25 (1967).
- [8] E.V. Suvorov, V.I. Polovinkina, V.I. Nikitenko, V.L. Indenbom. *Phys. Status Solidi A* **26**, 385 (1974).
- [9] Э.В. Суворов, И.А. Смирнова, Е.В. Шулаков. *Поверхность. Рентген., синхротр. нейтр. исслед.* 9, 1 (2007).
- [10] Э.В. Суворов, И.А. Смирнова. *ФТТ* **52**, 241 (2010).
- [11] G. Borrmann, K. Lehmann. *Z. Crystallogr.* **125**, 234 (1967).
- [12] Е.В. Шулаков, И.А. Смирнова, Э.В. Суворов. *Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исслед.* 7, 32 (1996).
- [13] Э.В. Суворов, И.А. Смирнова, Е.В. Шулаков. *Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исслед.* 8, 67 (2005).
- [14] В.Л. Инденбом, И.Ш. Слободецкий, К.Г. Труни. *ЖЭТФ* **66**, 1110 (1974).
- [15] В.Л. Инденбом, Э.В. Суворов, И.Ш. Слободецкий. *ЖЭТФ* **71**, 359 (1976).
- [16] K. Kohra. *J. Phys. Soc. Jpn.* **17**, 589 (1962).
- [17] S. Kikuta, K. Kohra. *J. Phys. Soc. Jpn.* **29**, 1322 (1970).
- [18] S. Kikuta. *J. Phys. Soc. Jpn.* **30**, 222 (1971).
- [19] Э.В. Суворов, И.А. Смирнова. *Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исслед.* 10, 7 (2008).
- [20] И.А. Смирнова, Э.В. Суворов, Е.В. Шулаков. *ФТТ* **49**, 1050 (2007).
- [21] Э.В. Суворов, И.А. Смирнова, Е.В. Шулаков. *Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исслед.* 12, 12 (2005).
- [22] М.Г. Мильвидский, Ю.А. Осипьян, И.А. Смирнова, Э.В. Суворов, Е.В. Шулаков. *Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исслед.* 6, 5 (2001).