

Развитие комплексных подходов для расчета кривых дифракционного отражения рентгеновских лучей от монокристаллов в двух- и многокристальной схемах

И. И. Аткин^{1, 3}, Ф. Н. Чуховский¹, Н. В. Марченков^{1, 2}

¹Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН

²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

³Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
кафедра оптики, спектроскопии и физики наносистем

atkin.ii@physics.msu.ru

The results of experimental and theoretical analysis of the integral rocking curves in the nondispersive X-ray double-crystal diffractometer schemes are discussed. It is shown that under certain conditions the secondary peak, which relates to the $MoK_{\alpha 2}$ -line of the incident X-ray characteristic radiation, takes place at the non-dispersive rocking curves. The trapezium and Monte-Carlo numerical methods are used for evaluations of the theoretical double-crystal rocking curves. The computer program package is elaborated for the numerical calculations of the double- and multi-crystal rocking curves as the mathematical software for the X-ray diagnostics of real crystal structures by the double- and multi-crystal diffractometry methods.

Непрерывное развитие микро- и нанoeлектроники нуждается в высокоточных и неразрушающих методах исследования монокристаллических материалов, в частности, их структурного совершенства. Возрастает необходимость разработки новых и совершенствования уже существующих методов диагностики реальной структуры, что особенно важно для отработки технологических процессов выращивания кристаллов. В связи с этим возрастает роль рентгеновских методов, основанных на использовании двух- и многокристалльных схем дифракции с учетом разработки количественных методов диагностики на их основе.

В работах [1,2] была показана эффективность двухкристального рентгеновского метода диагностики для анализа кривых дифракционного отражения кристаллов Si, Ge и трехслойной реальной гетероструктуры GaAs/InAs/GaAs с квантовыми точками InAs. Экспериментальные измерения КДО проводились в бездисперсионной (или квази-бездисперсионной) схеме. Угловая зависимость интенсивности двухкристалльных КДО представляет собой свертку угловых зависимостей коэффициентов отражения кристалла-монокристалла и образца. Согласно [1,2], обязательный учет реальной аппаратной функции двухкристального дифрактометра, приводит к появлению на так называемых бездисперсионных двухкристалльных КДО,

дополнительного максимума, отвечающего соседней по отношению к основной линии $K_{\alpha 1}$ линии $K_{\alpha 2}$ спектра характеристического излучения рентгеновской трубки. В общем виде выражение для двухкристальной КДО в бездисперсионной схеме записывается в виде [2]:

$$P_{DD}(\vartheta) = \int \int d\theta d\lambda g_{\lambda}(\lambda) g_{\theta}(\theta) P_M \left(\theta - \frac{\lambda - \lambda_1}{\lambda_1} \tan \Theta_B \right) \cdot P_S \left(\vartheta + \theta - \frac{\lambda - \lambda_1}{\lambda_1} \tan \Theta_B \right),$$

где ϑ – угловая отстройка образца от точного угла Брэгга Θ_B для выбранного отражения. $P_M(\theta, \lambda)$, $P_S(\vartheta + \theta, \lambda)$ – собственные коэффициенты отражения кристалла-монокристалла и образца, соответственно. $g_{\lambda}(\lambda)$ и $g_{\theta}(\theta)$ – функции спектрального и углового распределения падающего рентгеновского пучка. В качестве кристалла-монокристалла и кристалла-образца в расчетах были взяты два монокристалла Si, ориентация входных поверхностей которых $\{110\}$, а вектор дифракции $\mathbf{h} - \langle 220 \rangle$.

При расчетах в качестве источника излучения рассматривалась рентгеновская трубка с молибденовым анодом. Падающее излучение рентгеновской трубки представляет собой суперпозицию двух характеристических линий, $K_{\alpha 1}$ и $K_{\alpha 2}$ (без учета тормозного излучения), а именно:

$$g_{\lambda}(\lambda) = \frac{2}{3\pi} \left\{ \frac{\delta\lambda_1}{(\lambda - \lambda_1)^2 + (\delta\lambda_1)^2} + \frac{1}{2} \frac{\delta\lambda_2}{(\lambda - \lambda_2)^2 + (\delta\lambda_2)^2} \right\},$$

где

$$\frac{\delta\lambda_1}{\lambda_1} \cong \frac{\delta\lambda_2}{\lambda_2} = 3 \cdot 10^{-4}, \quad \frac{\Delta\lambda}{\lambda_1} = 6 \cdot 10^{-3}.$$

Аппаратная функция углового распределения $g_{\theta}(\theta)$ интенсивности падающего излучения от рентгеновской трубки с эффективным размером источника σ_x и щелевыми коллиматорами S_1, S_2 (см. врезка на рис. 1, $S_1 < S_2$), имеет следующий вид

$$g_{\theta}(\theta) = \frac{1}{\int g_{\theta}(\theta) d\theta} \int_{x_1(\theta)}^{x_2(\theta)} e^{-x^2} dx,$$

где пределы интегрирования отличны от нуля в интервале углов $|\theta| \leq \theta_2$ и равны [1]:

$$x_1(\theta) = -\frac{S_1/2 - |\theta|l_{1x}}{\sqrt{2}\sigma_x},$$

$$x_2(\theta) = \begin{cases} \frac{S_1/2 - |\theta|l_{1x}}{\sqrt{2}\sigma_x}, & |\theta| < \theta_1 \\ \frac{S_2/2 - |\theta|l_{2x}}{\sqrt{2}\sigma_x}, & \theta_1 \leq |\theta| \leq \theta_2. \end{cases}$$

Здесь $\theta_{1,2} = \frac{S_2 \mp S_1}{2l_{12}}$; l_{12}, l_{1x}, l_{2x} – оптические расстояния между двумя щелями, а также между каждой щелью и рентгеновской трубкой соответственно. S_1 – коллиматорная щель и S_2 – щель перед детектором.

На рис. 1 показаны результаты расчета свертки $P_{DD}(\theta)$ собственных КДО кристалла-монохроматора и образца с учетом соответствующей аппаратной функцией двухкристального дифрактометра методом трапеций. Такая же КДО была рассчитана с использованием метода Монте-Карло [3]. Результаты расчетов обеими методами совпадают с точностью до 1% во всей области углов. Расчет методом Монте-Карло проводился с учетом перспективности его использования в случае многокристалльных схем дифракции, а также обобщения методов расчета на случай учета вклада диффузного рассеяния, имеющего место в рассмотренной нами двухкристальной схеме [4, 5].

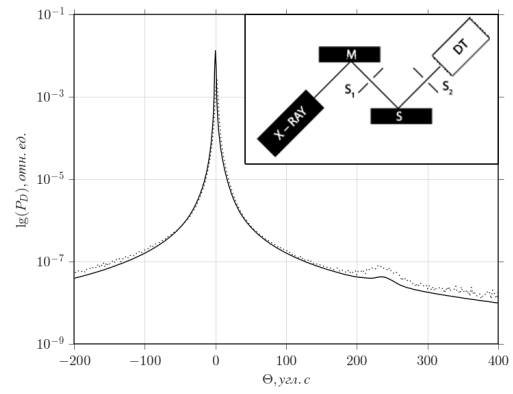


Рис. 1. Теоретическая (сплошная линия) и экспериментальная (пунктирная линия) $P_{DD}(\theta)$. Угол Брэгга $\theta_B = 10.64^\circ$ для выбранного отражения, $S_1 = S_2 = 50$ мкм, $\sigma_x = 0.5$ мм, $l_{12} = 0.45$ м, $l_{1x} = 0.54$ м, $l_{2x} = 0.99$ м.

В заключение следует отметить, что в докладе обсуждается возможность использования разработанного нами программного комплекса, начиная с расчета структурных факторов кристалла исходя из положений атомов в элементарной ячейки и заканчивая моделированием реальных КДО для конкретной рентгенооптической схемы (не обязательно бездисперсионной), в качестве математического аппарата для рентгеновской диагностики реальной структуры кристаллических материалов и гетероструктур с помощью методов двух- и многокристалльной дифрактометрии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Чуев М.А., Пашаев Э.М., Квадраков В.В., Субботин И.А. // Кристаллография. 2008. Т. 53. № 5. С. 808.
- [2] Марченков Н.В., Чуховский Ф.Н., Благов А.Е. // Кристаллография. 2015. Т. 60. № 2. С. 194.
- [3] Peter Lapage G., // Journal of Computational Physics. 1978. V.27. P. 192.
- [4] Петрашень П.В. // Металлофизика. 1986. Т. 8. №1. С. 35.
- [5] Петрашень П.В., Чуховский Ф.Н. // Металлофизика. 1986. Т. 8. №3. С. 45.