

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО  
ОБРАЗОВАНИЯ  
“МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени  
М.В. ЛОМОНОСОВА”

Физический факультет  
Кафедра оптики, спектроскопии и физики наносистем

Аткнин Иван Иванович

ОТЧЕТ О ПРАКТИКЕ

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

atknin.ii@physics.msu.ru  
группа 141М

Научный руководитель  
\_\_\_\_\_ С. Ю. Стремоухов

Научный руководитель  
\_\_\_\_\_ Н. В. Марченков

Москва, 2016 г.

---

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  $\omega$ -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.

---

## Введение

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 квазидисперсионной) схеме. Угловая зависимость интенсивности двухкристалльных КДО представляет собой свертку угловых зависимостей коэффициентов отражения кристалла-монокроматора 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.

# 1. Справка

Как известно (см., например, [6-8]), бездисперсионная схема двухкристального дифрактометра в своей классической трактовке предполагает, что двухкристальная кривая дифракционного отражения представляет собой одну узкую (порядка нескольких угловых секунд) линию с полушириной, несколько превышающей величину полуширины так называемой «собственной» кривой дифракционного отражения, на которое настроены кристалл-монокроматор и образец. С другой стороны, в [2] показано, что учет аппаратной функции двухкристального дифрактометра, включающей в себя спектральное распределение падающего характеристического излучения рентгеновской трубки, а также учитывающей влияние щелевых коллиматоров, используемых для выделения основной характеристической линии, приводит к появлению на кривой дифракционного отражения (КДО) дополнительного вклада соседней линии характеристического излучения.

В настоящее время метод измерения и анализа кривых дифракционного отражения (КДО) (см. [6-10]) является одним из основных высокочувствительных инструментов неразрушающей диагностики совершенства кристаллических материалов, в частности, объемных и поверхностных дефектов в 104 монокристаллах, тонких пленках, а также многослойных кристаллических структурах. Высокая эффективность метода достигается в результате прецизионного измерения КДО с помощью двухкристального дифрактометра в квазибездисперсионной (m,-n)-схеме, когда расположенные плоскопараллельно друг другу пластины кристалла-монокроматора и подложки исследуемого образца подбираются таким образом, чтобы значения межплоскостных расстояний выбранных для них дифракционных отражений были равны или очень близки друг другу. При этом снимаются жесткие ограничения на угловую расходимость падающего пучка рентгеновского излучения, что в свою очередь позволяет использовать интенсивность падающего пучка, пропускаемого системой коллимирующих щелей двухкристального дифрактометра, в пределах всей его спектральной ширины [6,8].

## 2. РАСЧЕТ АППАРАТНОЙ ФУНКЦИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ДИФРАКТОМЕТРА И ЕЕ УЧЕТ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ДВУХКРИСТАЛЬНЫХ КРИВЫХ ДИФРАКЦИОННОГО ОТРАЖЕНИЯ

Действительно, в общем случае бездисперсионные КДО описываются как свертка собственных коэффициентов дифракционного отражения образца и кристалла-монокроматора,  $P_M(\theta, \lambda)$  и  $P_S(\vartheta + \theta, \lambda)$ , с «весовыми» функциями  $(\theta)$ -углового и  $(\lambda)$ -спектрального распределений падающего рентгеновского излучения (соответственно, функции  $g_\lambda(\lambda)$  и  $g_\theta(\theta)$ ). В общем виде выражение для двухкристальной КДО в бездисперсионной схеме записывается в виде [2]:

$$P_{DD}(\vartheta) = \iint d\theta d\lambda g_\lambda(\lambda) g_\theta(\theta) P_M \left( \theta - \frac{\lambda - \lambda_1}{\lambda_1} \tan \Theta_B \right) \cdot P_S \left( \vartheta + \theta - \frac{\lambda - \lambda_1}{\lambda_1} \tan \Theta_B \right), \quad (1)$$

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

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:

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

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

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

$$g_{\theta}(\theta) = \frac{1}{\int g_{\theta}(\theta) d\theta} \int_{x_1(\theta)}^{x_2(\theta)} e^{-x^2} dx \quad (3)$$

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

$$x_1(\theta) = -\frac{S_1/2 - |\theta|l_{1x}}{\sqrt{2}\sigma_x} \quad (4)$$

$$x_2(\theta) = \begin{cases} \frac{S_1/2 - |\theta|l_{1x}}{\sqrt{2}\sigma_x}, & |\theta| < \theta_1 \\ \frac{S_2/2 - |\theta|l_{2x}}{\sqrt{2}\sigma_x}, & \theta_1 \leq |\theta| \leq \theta_2 \end{cases} \quad (5)$$

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.

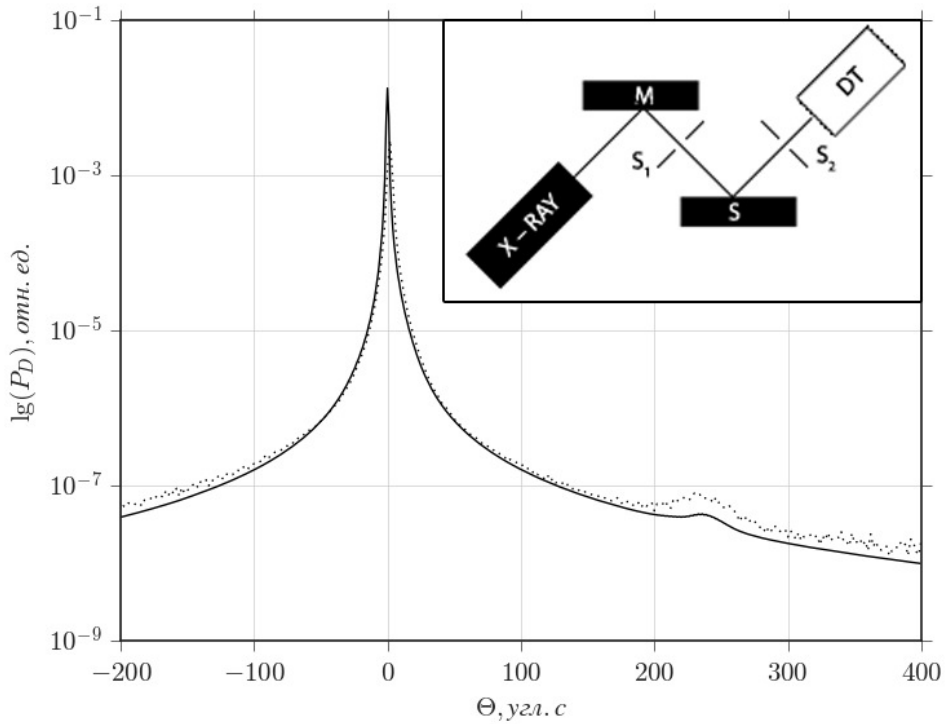


Рис. 1. Теоретическая (сплошная линия) и экспериментальная (пунктирная линия)  $P_{DD}(\vartheta)$ . Угол Брэгга  $\Theta_B$  для выбранного отражения,  $S_1 = S_2 = 50$  мкм,  $\sigma_x = 0.5$  мм,  $l_{12} = 0.45$  мм,  $l_{1x} = 0.54$  мм,  $l_{2x} = 0.99$  мм

На рис. 1 показаны результаты расчета свертки  $P_{DD}(\vartheta)$  собственных КДО кристалла-монокроматора 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 многокристальных схем дифракции, а также обобщения методов расчета на случай учета вклада диффузного рассеяния, имеющего место в рассмотренной нами двухкристальной схеме [4, 5].

## Заключение

В заключение следует отметить, что в отчете 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 рентгено-оптической схемы (не обязательно бездисперсионной), в качестве математического аппарата для рентгеновской диагностики реальной структуры кристаллических материалов и гетероструктур с помощью методов двух- и многокристальной 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., Благоев 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.
- [6] Hart M. // Lecture Notes in Physics. Imaging Processes and Coherence in Physics. 1980. V. 112. P. 325-335.
- [7] Matsushita T., Ishikawa T., Oyanagi H. // Nucl. Instrum. Methods. 1986. V. A246. P. 377.
- [8] A. Erko, M. Idir, Th. Krist, G. Michette // Modern Developments in X-Ray and Neutron Optics, Eds.: Springer. 2008. 541 p.
- [9] А.Г. Сутырин, Д.Ю. Прохоров // Кристаллография. 2006. Т. 51. № 5. С.570.
- [10] F.N. Chukhovskii // Acta Cryst. 2009. V. A65. P. 39.