

К теории рентгеновской Лауэ дифракции в термомиграционном кристаллическом канале с легирующей примесью

Д. В. Казаков, А. В. Карпов, С. И. Колосов,
Д. М. Мальков, В. И. Пунегов

Физико-математический институт ФИЦ Коми НЦ УрО РАН,
г. Сыктывкар

kazakov@ipm.komisc.ru,
karpov@ipm.komisc.ru,
kolos@ipm.komisc.ru,
dimamalkov93@mail.ru,
vpunegov@ipm.komisc.ru

Аннотация

Теоретически рассмотрена рентгеновская Лауэ дифракция в кристалле кремния с термомиграционными каналами $Si(Al)$. На основе модели упругих полей атомных смещений в канале получены выражения распределения деформаций для описания дифракции в геометрии Лауэ. Выполнен численный расчет распределения интенсивности рентгеновского рассеяния вблизи узла обратной решетки. Показано отличие дифракции в совершенном и деформированном кристалле.

Ключевые слова:

рентгеновская дифракция в геометрии Лауэ, термомиграционный канал, двумерные рекуррентные соотношения, уравнения Такаги-Топена, поле упругих деформаций

Введение

Высокоразрешающая рентгеновская дифракция широко используется для диагностики различных функциональных материалов [1]. Трехосевая рентгеновская дифрактометрия [2] является чувствительным методом, позволяющим измерять рентгеновские карты интенсивности рассеяния вблизи узла обратной решетки различных кристаллических систем.

Вместо плоских эпитаксиальных слоев при создании солнечных батарей, биосенсоров, микроэлектромеханических систем и приборов силовой электроники, можно использовать полупроводниковые кристаллы с вертикальными термомиграционными каналами [3]. Неразрушающие исследования структуры кремния с термомиграционными каналами $Si(Al)$ возможны с применением высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии. Измерения кривых качания и сопутствующее численное моделирование рентгеновской дифракции в геометрии Лауэ позволили получить только качественные оценки деформаций на границе термомиграционного канала и кремниевой матрицы

On the theory of X-ray Laue diffraction in a thermomigration crystalline channel with a doping impurity

D. V. Kazakov, A. V. Karpov, S. I. Kolosov,
D. M. Malkov, V. I. Punegov

Institute of Physics and Mathematics,
Federal Research Centre Komi Science Centre, Ural Branch, RAS,
Syktvykar

kazakov@ipm.komisc.ru,
karpov@ipm.komisc.ru,
kolos@ipm.komisc.ru,
dimamalkov93@mail.ru,
vpunegov@ipm.komisc.ru

Abstract

X-ray Laue diffraction in a silicon crystal with $Si(Al)$ thermomigration channels has been theoretically considered. Based on the model of elastic fields of atomic displacements in the channel, expressions for the distribution of strains have been obtained to describe diffraction in the Laue geometry. A numerical calculation of the X-ray scattering intensity distribution near a reciprocal lattice point has been performed. The difference between diffraction in a perfect and strained crystal has been shown.

Keywords:

X-ray diffraction in Laue geometry, thermomigration channel, two-dimensional recurrence relations, Takagi-Taupin equations, elastic strain field

[3]. Более информативной является трехосевая дифрактометрия в режиме измерений распределения интенсивности рентгеновского рассеяния вблизи узла обратной решетки. Для этой цели в геометрии Брэгга была предложена модель распределения деформаций внутри канала и на его границе [4]. Моделирование рентгеновской дифракции проводилось с помощью уравнений Такаги-Топена (Т-Т) [5, 6] в координатной системе координат и алгоритма «полушаговой производной» [7].

В Лауэ геометрии такие вычисления интенсивности рентгеновского рассеяния вблизи узла обратной решетки не проводились. В этом случае рентгеновский пучок проходит и дифрагирует на большом расстоянии внутри канала, поэтому следует использовать более жесткое рентгеновское излучение, чтобы уменьшить поглощение рентгеновских лучей. Недавно была показана аналогия двумерных рекуррентных соотношений и уравнений Такаги-Топена в случае дифракции в совершенном кристалле [8]. Цель этой работы — разработка вычислений интенсивности ко-

герентного рентгеновского рассеяния вблизи узла обратной решетки в структурах со сложным распределением деформаций в геометрии Лауэ.

1. Двумерные рекуррентные соотношения и уравнения Такаги-Топена для деформированных кристаллов

На рис. 1 показана схема рентгеновской Лауэ дифракции в кристалле с термомиграционными каналами.

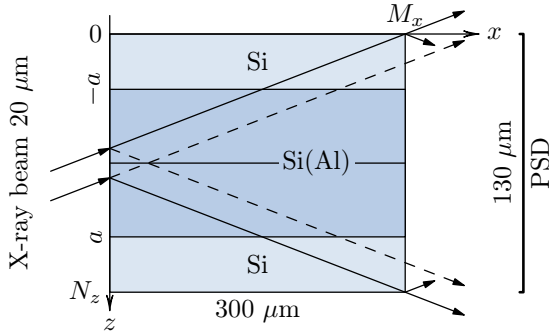


Рисунок 1. Схема Лауэ дифракции в кристалле с термомиграционными каналами. Ширина падающего в центр канала рентгеновского пучка 20 мкм. PSD — позиционно чувствительный детектор.

Figure 1. Scheme of Laue diffraction in a crystal with thermomigration channels. The width of the incident X-ray beam at the centre of the channel is 20 mkm. PSD stands for position-sensitive detector.

Одним из методов вычисления углового распределения дифракционной интенсивности в симметричной геометрии Лауэ является численное решение уравнений Такаги-Топена [5, 6] в косоугольной системе координат:

$$\begin{cases} \frac{\partial E_0(\eta; s_0, s_h)}{\partial s_0} = ia_{-h} E_h(\eta; s_0, s_h), \\ \frac{\partial E_h(\eta; s_0, s_h)}{\partial s_h} = i(\eta + \frac{\partial(\mathbf{h}\mathbf{u}(s_0, s_h))}{\partial s_h}) E_h(\eta; s_0, s_h) + \\ + ia_h E_0(\eta; s_0, s_h), \end{cases} \quad (1)$$

где $E_{0,h}(\eta; s_0, s_h)$ — амплитуды проходящей E_0 и дифракционной E_h рентгеновских волн, $a_0 = \chi_0/\lambda$, $a_h = C\chi_h/\lambda$, λ — длина волны рентгеновского излучения в вакууме, C — поляризационный фактор, $\chi_g = -r_0\lambda^2 F_g/(\pi V_c)$ — Фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости, $g = 0, h, \bar{h}$. Здесь V_c — объем элементарной ячейки, $r_0 = e^2/(mc^2)$ — классический радиус электрона, e , m — заряд и масса электрона, F_g — структурный фактор, $h = 2\pi/d$ — величина вектора обратной решетки, d — межплоскостное расстояние основной кристаллической матрицы. В уравнениях (1) $\eta = 2\pi \sin(2\theta_B) \omega/\lambda$ — угловой параметр, ω — отклонение рентгеновского пучка от угла Брэгга θ_B , $\mathbf{u}(s_0, s_h)$ — поле атомных смещений, вызванное наличием примеси в кристаллической решетке.

Угловой параметр η в случае трехкристальной дифрактометрии может быть записан через проекции q_x, q_z вектора смещения $\mathbf{q} = \mathbf{Q} - \mathbf{h}$ как $\eta = q_x \cos \theta_B - q_z \sin \theta_B$, где $\mathbf{Q} = \mathbf{k}_h - \mathbf{k}_0$ — вектор дифракции, \mathbf{h} — вектор обратной решетки, \mathbf{k}_h и \mathbf{k}_0 — волновые векторы дифракционной и падающей рентгеновской волны соответственно.

Вторым методом расчетов углового распределения интенсивности рентгеновского рассеяния в обратном пространстве является использование двумерных рекуррентных соотношений (ДРС) [8]. В случае дифракции в деформированном кристалле ДРС запишутся как

$$\begin{cases} T_{n+1}^{m+1} = (a T_n^m + b_1 S_n^m) \exp(i\varphi_0), \\ S_{n-1}^{m+1} = (a S_n^m + b_2 T_n^m) \exp(i\varphi_h), \end{cases} \quad (2)$$

где T и S — амплитуды проходящей и дифрагированной волн, $a = (1 - iq_0)$, $b_1 = -i\bar{q}$, $b_2 = -iq$, $q_0 = -\pi\chi_0 d/(\lambda\gamma_0)$, $q = C\pi\chi_h d/(\lambda\gamma_0)$, $\bar{q} = C\pi\chi_{\bar{h}} d/(\lambda\gamma_0)$, d — период отражающих атомных плоскостей. $\phi_0 = \phi + \mathbf{k}_0(\mathbf{u}_{m+1,n+1} - \mathbf{u}_{m,n})$, $\phi_h = \phi + \mathbf{k}_h(\mathbf{u}_{m+1,n-1} - \mathbf{u}_{m,n})$, $\mathbf{k}_{0,h}$ — волновые векторы падающей и отраженной рентгеновской волн, $\mathbf{u}_{m,n}$ — вектор смещения узлов в модели двумерной решетки Дарвина. Коэффициент $\phi = 2\pi d/(\lambda \sin \theta_B)$ в соотношениях (2) учитывает разность фаз, возникающую при распространении рентгеновской волны в совершенном кристалле от одного узла до другого на сетке для численных расчетов.

2. Поле упругих деформаций в кристалле с термомиграционными каналами

Для рентгеновской дифракции в геометрии Лауэ поле атомных смещений $u_x(x, z)$ параллельно вектору обратной решетки \mathbf{h}_{220} , выражение для которого получено в статье [4]. Используя это выражение, для случая Лауэ распределение упругих деформаций $\varepsilon_{xx} = \frac{\partial u_x(x, z)}{\partial x}$ в кристалле с термомиграционными каналами запишется в виде:

$$\varepsilon_{xx}(x, z) = K_\nu \left(\Omega(x, z) + \frac{(x-a)z}{r_1^2} - \frac{(x+a)z}{r_2^2} \right), \quad (3)$$

где $\Omega(x, z) = \pi + (2\nu - 1)(\alpha_1 - \alpha_2)$ при $|x| \leq a$ и $\Omega(x, z) = (2\nu - 1)(\alpha_1 - \alpha_2)$, если $|x| > a$. В решении (3) $K_\nu = \frac{e^0}{\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu}$, e^0 — собственная деформация, ν — коэффициент Пуассона, $2a$ — ширина термомиграционного канала, $r_1^2 = (x-a)^2 + z^2$, $r_2^2 = (x+a)^2 + z^2$, $\alpha_{1,2} = \arctan(z/(x \pm a))$.

Для вычисления углового распределения интенсивности рентгеновского рассеяния вблизи узла обратной решетки необходимо использовать значения атомных смещений $u_x(x, z)$ [4] и распределение упругих деформаций $\varepsilon_{xx}(x, z)$ (3).

Деформации в косоугольной и прямоугольной системах координат в уравнениях (1) связаны между собой соотношением:

$$\frac{\partial u_z(s_0, s_h)}{\partial s_h} = \varepsilon_{zx}(x, z) \cos \theta_B + \varepsilon_{zz}(x, z) \sin \theta_B. \quad (4)$$

3. Моделирование рентгеновской Лауэ дифракции в термомиграционном канале кремния с легирующими атомами алюминия

Численные расчеты рентгеновской Лауэ дифракции в кристалле кремния с термомиграционными каналами

$Si(Al)$ выполнены для $(2\bar{2}0)$ отражения $MoK_{\alpha 1}$ излучения с использованием уравнений Т-Т и ДРС. Все расчеты интенсивности рентгеновского рассеяния вблизи узла обратной решетки представлены в логарифмическом масштабе с нормировкой на единицу.

На рис. 2 изображена расчетная карта дифракционной интенсивности в обратном пространстве и ее q_x - и q_z -сечения совершенного кристалла кремния толщиной $L_x = 300$ мкм.

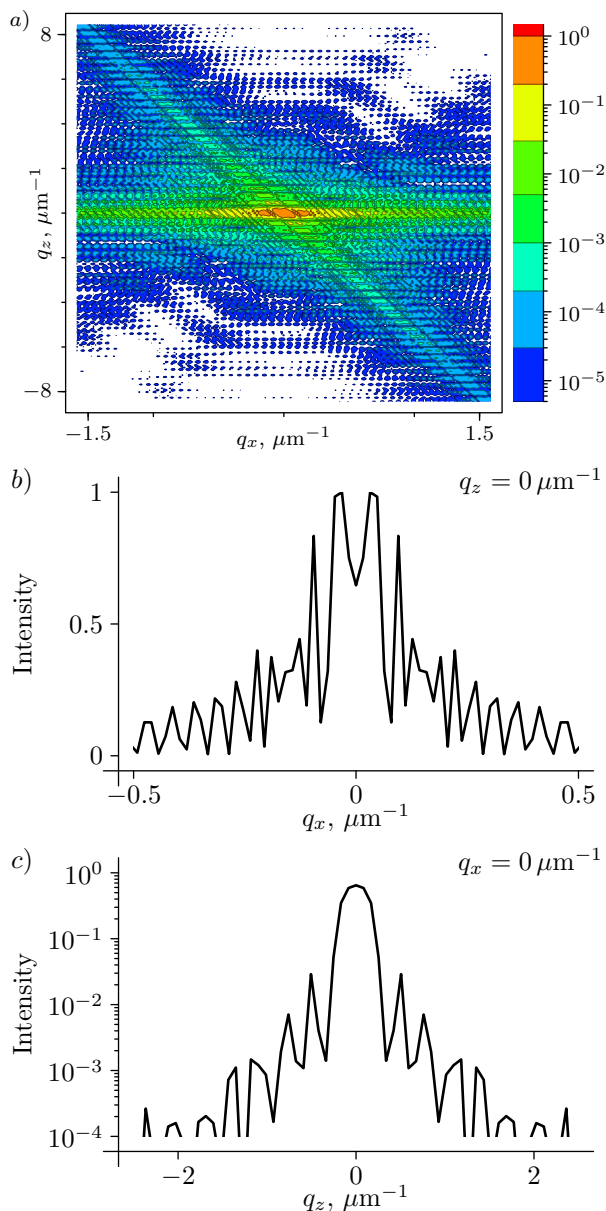


Рисунок 2. а) Расчетная карта распределения интенсивности Лауэ дифракции от совершенного кристалла кремния; б) и в) q_x - и q_z -сечения данной карты для кристалла толщиной 300 мкм.

Figure 2. a) Calculated reciprocal space map of the Laue diffraction from a perfect silicon crystal with a thickness of 300 μm ; b) and c) are correspondent cross-sections of the reciprocal space map along q_x and q_z .

Результаты вычислений рентгеновской дифракции в термомиграционном канале показаны на рис. 3. Из-за упругих деформаций в канале на карте интенсивности рентгеновского рассеяния вблизи узла обратной решетки появляются два сильных дифракци-

онных максимума, сдвинутых в положительном направлении вдоль оси q_x . Для собственной деформации $e^0 = 3.0 \cdot 10^{-5}$, эти максимумы расположены на значения $\Delta q_x = 1.18$ мкм $^{-1}$, $\Delta q_z = -0.08$ мкм $^{-1}$ и $\Delta q_x = 1.09$ мкм $^{-1}$, $\Delta q_z = -1.60$ мкм $^{-1}$. Это соответствует средней максимальной деформации в латеральном $\varepsilon_{220}^{\Delta q_x} = 3.51 \cdot 10^{-5}$ и вертикальном $\varepsilon_{220}^{\Delta q_z} = 2.63 \cdot 10^{-5}$ направлениях.

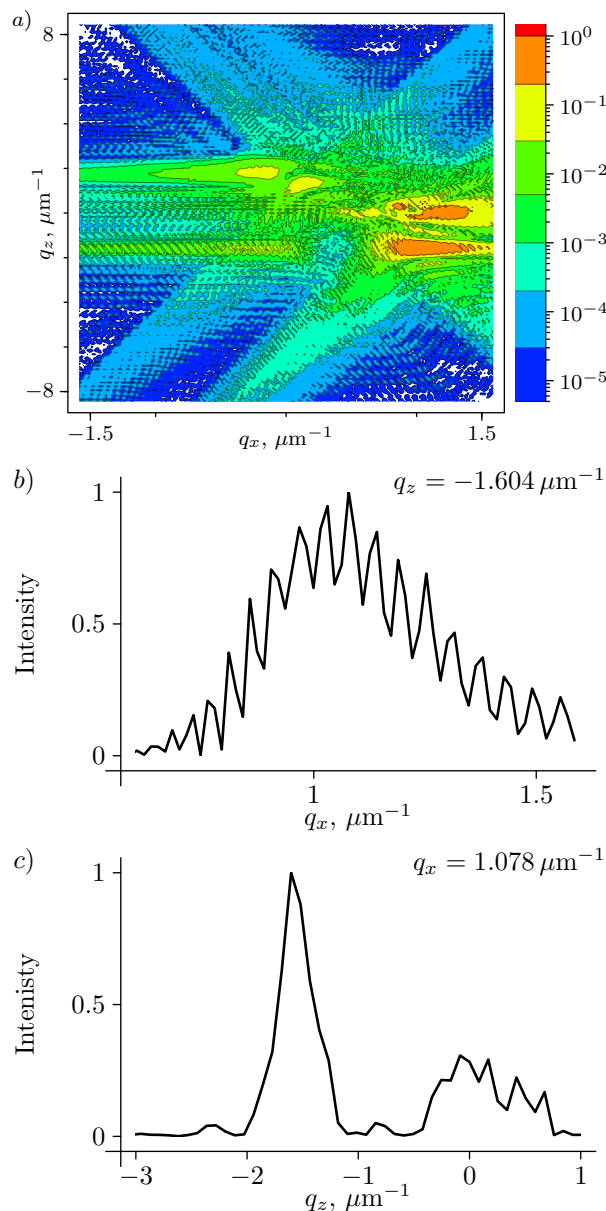


Рисунок 3. а) Расчетная карта распределения интенсивности Лауэ дифракции от термомиграционного канала $Si(Al)$; б) и в) q_x - и q_z -сечения данной карты для канала $Si(Al)$ толщиной 300 мкм. Собственная деформация $e^0 = 3.0 \cdot 10^{-5}$.

Figure 3. a) Calculated reciprocal space map of the Laue diffraction from a $Si(Al)$ thermomigration channel with a thickness of 300 μm ; b) and c) are correspondent cross-sections along q_x and q_z . The intrinsic strain is $e^0 = 3.0 \cdot 10^{-5}$.

Максимальная деформация возникает у входной и выходной поверхности канала, средняя деформация вдоль канала равна $\varepsilon_{220}^{\Delta q_z} = 2.01 \cdot 10^{-5}$.

Заключение

Таким образом, численное моделирование и анализ карт интенсивности рентгеновского рассеяния вблизи узла обратной решетки позволяют определить деформации в кристалле с термомиграционными каналами.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

References

1. Holý, V. High-Resolution X-ray Scattering from Thin Films and Multilayers / V. Holý, U. Pietch, T. Baumbach // Springer-Verlag Berlin Heidelberg. – 1999.
2. Iida, A. Separate measurements of dynamical and kinematical x-ray diffractions from silicon crystals with a triple crystal diffractometer / A. Iida, K. Kohra // Phys. Stat. Sol. (a) – 1979. – Vol. 51. – P. 533–542.
3. Lomov, A. Laue X-ray diffraction studies of the structural perfection of Al-doped thermomigration channels in silicon / A. A. Lomov, V. I. Punegov, B. M. Seredin // J. Appl. Cryst. – 2021. – Vol. 54. – P. 588–596.
4. Lomov, A. High-resolution X-ray Bragg diffraction in Al thermomigrated Si channels / A. A. Lomov, V. I. Punegov, A. Yu. Belov, B. M. Seredin // J. Appl. Cryst. – 2022. – Vol. 55. – P. 558–568.
5. Takagi, S. A Dynamical theory of diffraction applicable to crystals with any kind of small distortion / S. Takagi // Acta Cryst. – 1962. – Vol. 15, № 12. – P. 1311–1312.
6. Taupin, D. Theorie dynamique de la diffraction des rayons x par les cristaux deformes. / D. Taupin // Bull. Soc. Franc. Mineral. Crist. – 1964. – Vol. 87. – P. 469–511.
7. Epelboin, Y. Simulation of X-ray topographs. / Y. Epelboin // Mater. Sci. Eng. – 1985. – Vol. 73. – P. 1–43.
8. Punegov, V. Two-dimensional recurrence relations and Takagi-Taupin equations. I. Dynamical X-ray diffraction by a perfect crystal / V. I. Punegov, S. I. Kolosov // J. Appl. Cryst. – 2022. – Vol. 55. – P. 320–328.

Благодарность (госзадание)

Работа выполнена в рамках государственного задания ФМИ ФИЦ Коми НЦ УрО РАН по теме НИР № 122040400069-8.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда, № 23-22-00062, <https://rscf.ru/project/23-22-00062/>.

Acknowledgement (state task)

The work was done in frames of the State task of the Institute of Physics and Mathematics FRC Komi SC UB RAS on the research topic № 122040400069-8.

The research was financially supported by the grant of the Russian Science Foundation, № 23-22-00062, <https://rscf.ru/project/23-22-00062/>.

Для цитирования:

Казаков, Д. В. К теории рентгеновской Лауэ дифракции в термомиграционном кристаллическом канале с легирующей примесью / Д. В. Казаков, А. В. Карпов, С. И. Колосов, Д. М. Мальков, В. И. Пунегов // Известия Коми научного центра Уральского отделения Российской академии наук. Серия «Физико-математические науки». – 2024. – № 5 (71). – С. 64–67.

For citation:

Kazakov, D. V. On the theory of X-ray Laue diffraction in a thermomigration crystalline channel with a doping impurity / D. V. Kazakov, A. V. Karpov, S. I. Kolosov, D. M. Malkov, V. I. Punegov // Proceedings of the Komi Science Centre of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences. Series “Physical and Mathematical Sciences”. – 2024. – № 5 (71). – P. 64–67.

Дата поступления рукописи: 17.05.2024

Received: 17.05.2024