

Зав. каб. 1991, 57, №6.

20
26

УДК 548.731

Рентгенодифрактометрический контроль структурного совершенства монокристаллических пластин

© Т. Г. КРЫШТАБ, В. П. КЛАДЬКО, А. В. ФОМИН
Институт по [REDACTED] УССР, Киев

Существует целый ряд рентгеновских способов контроля структурного совершенства монокристаллов (плотности дислокаций, концентрации дислокационных петель и кластеров), основанных на измерениях интегральных интенсивностей (ИИ) лауэ-дифрагированных рентгеновских лучей (РЛ) [1—3]. Среди определяемых рентгенодифракционных параметров наиболее информативным является фактор Дебая — Валлера L , характеризующий степень отклонения структуры искаженной кристаллической решетки от идеальной, усреднен-

ную по облучаемому объему. Однако все методы, используемые для определения L , обладают рядом ограничений. Например, методы, использующие приближение тонкого кристалла ($\mu t \leq 1$, где μ — нормальный коэффициент фотоэлектрического поглощения; t — толщина кристалла), ограничены узким интервалом толщин, часто непригодным для промышленных целей. Они требуют измерения толщинной зависимости ИИ, поскольку обладают малой точностью в случае измерения ИИ на одной толщине. Использование приближения толстого

кристалла ($\mu t > 10$) ограничивается степенью структурного совершенства исследуемых кристаллов (плотность дислокаций $N_D \approx 10^4 \text{ см}^{-2}$), и здесь также необходимо измерение толщинной зависимости ИИ [3]. Наиболее благоприятным толщинным интервалом для контроля структурного совершенства является $1 < \mu t < 10$. Однако и в этой области для получения характеристик структурного совершенства, в частности статического фактора Дебая — Валлера, измерение толщинной зависимости ИИ является необходимым [4].

В настоящей работе исследовалось поведение толщинных зависимостей ИИ РЛ с длинами волн вблизи K -края поглощения компонентов кристалла в области $1 < \mu t < 10$ с целью создания экспрессного метода контроля структурного совершенства монокристаллов в широкой области изменения их степени нарушенности. Исследования проводились в рамках динамической теории рассеяния РЛ кристаллами со статистически однородно распределенными дефектами. Изучалось поведение толщинных зависимостей интегральных отражательных способностей R_i , а также их отношений (скачка S) для длин волн λ_1 и λ_2 , симметрично расположенных относительно K -края поглощения компонентов кристалла в области уровней поглощения $1 < \mu t < 10$.

Известно, что в случае симметричной лауэ-дифракции ИИ I_R можно записать как сумму брэгговской (когерентной) I_0 и диффузной (некогерентной) I_d компонент [4]:

$$I_R = I_{0\lambda} R_i = I_0 + I_d = I_{0\lambda} \frac{c\pi |\chi_{rh}|}{2\sin 2\theta} \exp[-(\mu + \mu_{д.р})t] \times [J_0(\mu t c) + \frac{4\pi L}{\Lambda} t], \quad (1)$$

где c — фактор поляризации; χ_{rh} — компоненты Фурье действительной части восприимчивости среды χ ; θ — угол Брэгга; $J_0(x)$ — функция Бесселя; $e = e_0 e^{-\mu t}$ — отношение мнимых частей χ ; Λ — длина экстинкции; $I_{0\lambda}$ — интенсивность первичного пучка; $\mu_{д.р}$ — коэффициент потерь энергии за счет диффузного рассеяния.

Формула (1) с высокой точностью (параметр корреляции $\rho > 95\%$) описывает экспериментальные значения ИИ в области уровней поглощения $1 < \mu t < 10$. Из уравнения (1) видно, что величина I_R является функцией трех неизвестных $I_{0\lambda}$, $\mu_{д.р}$, L . Учитывая, что вблизи K -края поглощения $I_{0\lambda}$ и некоторые параметры рассеяния равны между собой с точностью порядка 3% для длин волн λ_1 и λ_2 ($c_1 \approx c_2$; $\chi_{rh1} \approx \chi_{rh2}$; $\theta_1 \approx \theta_2$; $\mu_{д.р1} \approx \mu_{д.р2}$), их удается исключить при использовании скачка S , который можно представить в следующем виде:

$$S = \frac{I_{R2}}{I_{R1}} = \frac{\exp(-\mu_2 t) \left[J_0(\mu_2 c t) + \frac{4\pi}{\Lambda} L t \right]}{\exp(-\mu_1 t) \left[J_0(\mu_1 c t) + \frac{4\pi}{\Lambda} L t \right]}. \quad (2)$$

Из уравнения (2) удастся однозначно определить искомый параметр L , и формулу для статического фактора Дебая — Валлера можно записать в явном виде:

$$L = \frac{S \exp[-(\mu_1 - \mu_2)t] J_{01}(\mu_1 c t) - J_{02}(\mu_2 c t)}{\frac{4\pi}{\Lambda} t \{1 - S \exp[-(\mu_1 - \mu_2)t]\}}. \quad (3)$$

Анализ уравнения (3) показал, что точность определения параметра L повышается при значениях $\mu t > 1$, что связано с величиной используемой функции Бесселя $J_0(x)$. Как известно [5], в области $\mu t < 1$ скачок ИИ является нечувствительным к дефектам структуры типа дислокаций, дислокационных петель, кластеров и т. п. и не может быть использован для контроля структурного совершенства. В области $\mu t > 10$ эффект Бормана (аномальное прохождение РЛ) в сильноискаженных монокристаллах ($N_D > 10^4 \text{ см}^{-2}$) полностью подавляется. Кроме того, при использовании ИИ в этой области необходим учет обнаруженного эффекта аномального прохождения диффузной компоненты [6], что требует изучения толщинной зависимости I_R и усложняет трактовку полученных результатов для скачка ИИ. Таким образом, из проведенного анализа следует, что только в области $1 < \mu t < 10$ возможно однозначное экспрессное определение уровня искажений монокристаллических пластин при измерении скачка ИИ на одной толщине образца. Это позволяет корректно определить также однородность распределения дефектов в промышленных пластинах с учетом всех динамических параметров, влияющих на характер рассеяния РЛ в отличие от работы [7], где ограничен толщинный интервал пластин условием $\mu t < 1$, а использование простой феноменологической модели дает лишь грубую оценку их структурного совершенства.

Для проверки работоспособности предложенного метода проводились измерения ИИ лауэ-дифрагированных РЛ на монокристаллах CdTe с помощью однокристалльного спектрометра [5] (установка ДРОН-3, рентгеновская трубка с молибденовым анодом). Коллимированный пучок рентгеновского излучения имел сечение $1 \cdot 10^{-4} \text{ см}^2$. Ширина спектрального окна $\Delta\lambda = 0,02 \text{ \AA}$. Интенсивности РЛ I_R регистрировались для длин волн, расположенных симметрично вблизи K -края поглощения атомов кадмия ($\lambda_K = 0,4641 \text{ \AA}$) с помощью детектора БДС-8-01 и радиометра 20046. Измерения проводились на длинах волн $\lambda_1 = 0,454 \text{ \AA}$ и $\lambda_2 = 0,475 \text{ \AA}$. Нормальные коэффициенты поглощения составляют соответственно для длин волн λ_1 и λ_2 $\mu_1 = 156 \text{ см}^{-1}$ и $\mu_2 = 60 \text{ см}^{-1}$. Фактор поляризации c в нашем случае определялся расчетным путем по известной формуле $(1 + \cos 2\theta)/2$ [8]. Для кристаллов CdTe ввиду малости брэгговских углов θ вблизи K -края поглощения $\cos 2\theta \approx 1$ и фактор поляризации близок к 1.

Проведенные экспериментальные исследования толщинных зависимостей ИИ для монокристаллов CdTe различной степени структурного совершенства показывают, что для всех практически важных уровней искажений решетки ($10^{-4} < L < 1$) значения I_R для обеих длин волн вблизи K -края поглощения существенно превышают интенсивность фона во всем исследуемом интервале $1 < \mu t < 10$. По экспериментально полученным значениям ИИ определялась величина скачка S , а затем по формуле (3) рассчитывалось значение фактора Дебая — Валлера L . Для сравнения параметр L определялся независимым методом [4]. Результаты экспериментов приведены в таблице. Из данной таблицы следует, что наблюдается хорошая

Значения фактора Дебая — Валлера для монокристаллов CdTe различной толщины и степени структурного совершенства, определенные предлагаемым и независимым [4] методами

Толщина t , см	μt		S	Параметр L	
	λ_1	λ_2		Предлагаемый метод	Независимый метод
0,022	3,43	1,32	4,5	0,01	0,01
0,017	2,65	1,02	2,36	0,007	0,01
0,019	2,96	1,14	3,43	0,012	0,011

корреляция значений параметра L , полученных предложенным и независимым методами.

Таким образом, проведенный анализ формул и эксперимент показали, что предлагаемый метод контроля структурного совершенства монокристаллических пластин является экспрессным, достаточно информативным и обладает высокой точностью определения параметра $\sim 5\%$, поскольку совокупность лишь двух экспериментальных значений ИИ, отвечающих двум длинам волн вблизи

K-края поглощения компонентов, позволяет однозначно с учетом всех динамических параметров рассеяния РЛ решить задачу определения относительной объемной доли искаженной решетки.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. с. 1255906 СССР. Способ контроля структурного совершенства монокристаллов. / Л. И. Даценко, А. Н. Гуреев, В. И. Хрупа и др. // Открытие. Изобретения. 1986. № 33.
2. Молодкин В. Б., Даценко Л. И., Хрупа В. И. и др. / Металлофизика. 1983. Т. 5. № 6. С. 7—15.
3. Даценко Л. И. / Украинский физический журнал. 1979. Т. 24. № 5. С. 577—590.
4. Крыштаб Т. Г., Хрупа В. И., Даценко Л. И. / Украинский физический журнал. 1986. Т. 31. № 12. С. 1845—1849.
5. Даценко Л. И., Кладько В. П., Кисловский Е. Н., Хрупа В. И. / Кристаллография. 1984. Т. 29. № 6. С. 1066—1070.
6. Ратников В. В., Сорокин Л. М. / Физика твердого тела. 1984. Т. 26. № 11. С. 3445—3447.
7. Даценко Л. И., Крыштаб Т. Г., Кисловский Е. Н., Хрупа В. И. / Заводская лаборатория. 1984. Т. 50. № 5. С. 38—39.
8. Джеймс Р. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. — М.: ИЛ. 1950. — 572 с.

ХЗ! Поступила 22.02.90.