ЖЭТФ, 2019, том 156, вып. 2 (8), стр. 239–253 

# ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В КРИСТАЛЛЕ С ПОВЕРХНОСТНОЙ РЕШЕТКОЙ ДРУГОГО МАТЕРИАЛА

***В. И. Пунегов****

*Физико-математический институт*
*Федерального исследовательского центра «Коми научный центр»*
*Уральского отделения Российской академии наук*
*167982, Сыктывкар, Россия*

Поступила в редакцию 1 февраля 2019 г.,
после переработки 1 февраля 2019 г.
Принята к публикации 12 марта 2019 г.

Разработана общая теория динамической рентгеновской дифракции в кристалле, на поверхности которого сформирована латеральная периодическая структура из тонкопленочных линий (полос) другого материала. На основе модели краевых сил вычислены поля упругих решеточных смещений в подложке, возникающих в результате создания латеральной поверхностной решетки. Используя формализм дифракции пространственно-ограниченных рентгеновских пучков, мы получили решения для амплитуд отраженных рентгеновских волн от кристалла с поверхностной решеткой, химический состав которой отличается от состава подложки. Выполнено численное моделирование рентгеновской дифракции в подложке кремния с поверхностными решетками вольфрама и оксида $SiO_2$. Показано, что угловые распределения интенсивностей рассеяния от кристалла кремния с одинаковыми по размеру вольфрамовыми и оксидными линиями существенно различаются, установлена физическая природа такого различия.

**DOI:** 10.1134/S0044451019080030

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Первые эксперименты трехосевой рентгеновской дифрактометрии [1] на кристаллах кремния с прямоугольным поверхностным рельефом [2, 3] и на структурах, промодулированных поверхностной акустической волной [4, 5], показали, что наряду с основным дифракционным пиком возникают побочные дифракционные порядки (сателлиты). Латеральные порядки появляются и в случае рентгеновского рассеяния на кристаллах кремния с периодически повторяющимися тонкопленочными линиями (полосами) $SiO_2$ [6, 7]. Оксидные пленочные линии создаются термическим окислением поверхности или осаждением оксида $SiO_2$ из паровой фазы, при этом часть оксидной пленки удаляется методом литографии с последующим химическим травлением так, что поверхность подложки Si становится покрытой поверхностной решеткой (ПР) оксидного материала [6, 7].

В работах [8, 9] исследована дифракция рентгеновских лучей в кристаллах кремния, на поверхности которых методом литографии была сформирована решетка в виде периодически расположенных линий золота и вольфрама. При этом в отличие от известных латеральных решеток [2–7], сателлиты на картах распределения интенсивности рассеяния (Reciprocal Space Maps (RSM)) возникали не только в горизонтальном направлении обратного пространства, но и вдоль линий псевдопиков монохроматора и анализатора. Отметим, что ранее была получена двумерная карта распределения интенсивности рентгеновского рассеяния на системе Au/Si(111), ПР которой имела период 2 мкм из чередующихся золотых линий [10]. Из-за плохого углового разрешения и относительно большого периода в расположении металлических полос, дифракционные порядки были размыты и результаты детально не анализировались.

Для объяснения необычного появления диагональных сателлитов вдоль направлений псевдопи-

* E-mail: vpunegov@dm.komisc.ru

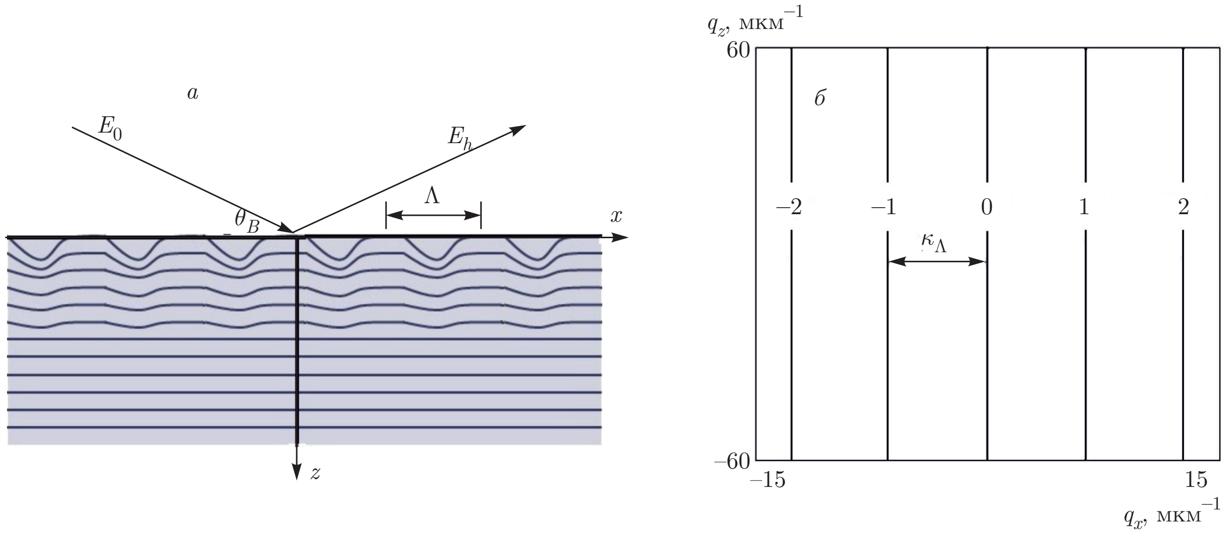


**Рис. 1.** Схематическое изображение дифракции плоской рентгеновской волны на кристалле с периодической латеральной деформацией решетки ($a$) и соответствующая карта распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве ($б$)

ков монохроматора и анализатора в работе [9] предложена феноменологическая модель, на основе которой выполнено численное моделирование углового распределения интенсивности рассеяния и проведено сопоставление теоретических результатов с экспериментальными данными. Однако формирование сегментальной структуры рентгеновских полей в объеме кристалла в рамках феноменологической модели [9] являлось лишь предположением. Строгая модель динамической дифракции на кристалле с периодически расположенными на его поверхности металлическими линиями без учета деформаций в приповерхностном слое кремния предложена в работе [11]. Численные расчеты в рамках этой модели позволили получить ромбоидальную структуру дифракционного поля внутри кристалла, предсказанную в работе [9]. С другой стороны, на расчетной карте углового распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве отсутствовали некоторые дифракционные порядки, которые были зарегистрированы на экспериментальных картах RSM. Следовательно, результаты [11] также полностью не отвечают физическому явлению рентгеновской дифракции на кристалле с вольфрамовой поверхностной решеткой. Кроме того, не выяснена причина разного углового распределения интенсивности рассеяния на кристалле с металлической и оксидной поверхностной решеткой [7, 9]. Таким образом, данная работа посвящена более глубокому, последовательному и полному изучению рентгеновской дифракции на кристаллах с поверхностной решеткой из другого материала.

## 2. ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ НА КРИСТАЛЛЕ С ПЕРИОДИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТНОЙ ДЕФОРМАЦИЕЙ. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим динамическую дифракцию рентгеновских лучей в кристалле, который имеет периодическую деформацию вдоль поверхности. Такие деформации могут возникать в кристалле танталата лития с периодически расположенными доменами противоположной полярности [12] в структурах, промодулированных поверхностной акустической волной [5] или при латеральной периодической ионной имплантации поверхности кристалла [13]. Кроме того, периодические упругие напряжения в кристаллической решетке подложки появляются в результате нанесения на поверхность кремния периодических тонкопленочных линий $SiO_2$ [6, 7, 14], $Si_4N_3$ [15], Au [10] и W [9], а также при создании на поверхности кристалла канавок, заполненных оксидным материалом [16].

Пусть на кристалл с периодической поверхностной деформацией под углом $\theta = \theta_B + \omega$ падает плоская рентгеновская волна, где $\omega = \theta - \theta_B$ — отклонение рентгеновского пучка от угла Брэгга $\theta_B$ подложки (рис. 1$a$). Динамическая дифракция рентгеновских лучей в деформированных кристаллах традиционно описывается уравнениями Такаги [17], которые в декартовой системе координат имеют вид:

$$\left(\operatorname{ctg}\theta_B\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial z}\right)E_0(\eta;x,z)=ia_0E_0(\eta;x,z)+ \\ +ia_{\bar h}\phi(x,z)E_h(\eta;x,z), \\ \left(\operatorname{ctg}\theta_B\frac{\partial}{\partial x}-\frac{\partial}{\partial z}\right)E_h(\eta;x,z)= \\ =i(a_0+\eta)E_h(\eta;x,z)+ia_h\phi^*(x,z)E_0(\eta;x,z), \tag{1}$$

где $a_0 = \pi\chi_0/(\lambda\gamma_0)$; $a_{h,\bar h} = C\pi\chi_{h,\bar h}/(\lambda\gamma_{h,0})$; $\eta = 4\pi\cos(\theta_B)\omega/\lambda$ — угловой параметр, используемый в двухкристальной дифрактометрии в режиме $\theta$–$2\theta$-сканирования; $\lambda$ — длина волны рентгеновского излучения в вакууме; $C$ — поляризационный фактор; $\chi_g = -r_0\lambda^2F_g/(\pi V_c)$ — фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости для $g = 0, h, \bar h$; $V_c$ — объем элементарной ячейки; $r_0 = e^2/(mc^2)$ — классический радиус электрона; $e, m$ — соответственно заряд и масса электрона; $F_g$ — структурный фактор. В уравнениях (1) фазовый фактор $\phi(x,z) = \exp(ihu_z(x,z))$, при этом «звездочка» означает комплексное сопряжение, $h$ — величина вектора обратной решетки ($h = 2\pi/d_{hkl}$), где $d_{hkl}$ — межплоскостное расстояние кристаллической подложки, $u_z(x,z)$ — проекция вектора упругих решеточных смещений на направление вектора обратной решетки отражающих атомных плоскостей.

В уравнениях (1) выполним фурье-преобразование для амплитуд рентгеновских полей [18, 19]:

$$E_{0,h}(\eta;x,z)=\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}d\kappa\exp(i\kappa x)\hat E_{0,h}(\kappa,\eta;z), \tag{2}$$

где амплитуды в фурье-пространстве имеют вид

$$\hat E_{0,h}(\kappa,\eta;z)=\int\limits_{-\infty}^{\infty}dx\exp(-i\kappa x)E_{0,h}(\eta;x,z). \tag{3}$$

Проведем также фурье-преобразование для фазового множителя $\phi(x,z)$:

$$\phi(x,z)=\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}d\kappa'\exp(i\kappa' x)\hat\phi(\kappa',z), \tag{4}$$

$$\hat\phi(\kappa',z)=\int\limits_{-\infty}^{\infty}dx\exp(-i\kappa' x)\phi(x,z). \tag{5}$$

Подставляя (2), (4) в (1), получаем одномерные интегродифференциальные уравнения

$$\frac{\partial\hat E_0(\kappa,\eta;z)}{\partial z}=i(a_0-\kappa\operatorname{ctg}\theta_B)\hat E_0(\kappa,\eta;z)+ \\ +ia_{\bar h}\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}d\kappa'\hat\phi(\kappa',z)\hat E_h(\kappa-\kappa',\eta;z), \\ -\frac{\partial\hat E_h(\kappa,\eta;z)}{\partial z}=i(a_0+\eta-\kappa\operatorname{ctg}\theta_B)\hat E_h(\kappa,\eta;z)+ \\ +ia_h\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}d\kappa'\hat\phi^*(\kappa',z)\hat E_0(\kappa-\kappa',\eta;z). \tag{6}$$

Отметим, что уравнения (6) имеют аналитическое решение в отсутствие деформаций кристаллической решетки, т. е. когда $\phi(x,z) = 1$ и $\hat\phi(\kappa',z) = 2\pi\delta(\kappa')$ [18].

В кристалле с чередующейся латеральной деформацией поле упругих решеточных смещений $u_z(x,z)$ является периодической функцией вдоль направления $x$, при этом $u_z(x+\Lambda,z) = u_z(x,z)$, где $\Lambda$ — период латеральной модуляции (рис. 1*a*). Следовательно, присутствующий в уравнениях дифракции фазовый фактор (4) также будет периодической функцией, т. е. $\phi(x+\Lambda,z) = \phi(x,z)$. Считая фронт падающей рентгеновской волны неограниченным (ширина пятна засветки поверхности кристалла много больше периода модуляции), фазовая функция $\phi(x,z)$ представима в виде ряда Фурье:

$$\phi(x,z)=\sum_{m=-\infty}^{\infty}B_m(z)\exp(-im\kappa_\Lambda x), \tag{7}$$

где $\kappa_\Lambda = 2\pi/\Lambda$ — волновое число латеральной модуляции кристаллической решетки. Фурье-коэффициенты в (7) зависят от координаты $z$, направленной в глубь кристалла и запишутся как

$$B_m(z)=\frac{1}{\Lambda}\int\limits_{-\Lambda/2}^{\Lambda/2}\exp\left[i(hu_z(x,z)+\kappa_\Lambda mx)\right]dx= \\ =(2\pi)^{-1}\int\limits_{0}^{2\pi}\exp\left[i(hu_z(\varphi/\kappa_\Lambda,z)+m\varphi)\right]d\varphi. \tag{8}$$

Фазовую функцию в фурье-пространстве $\hat\phi(\kappa',z)$ запишем с учетом ее периодичности:

$$\hat\phi(\kappa',z)=\sum_{m=-\infty}^{\infty}B_m(z)\times \\ \times\int\limits_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-i(\kappa'+m\kappa_\Lambda)x\right)dx \tag{9}$$

и подставим в (6). Поскольку

$$\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-i(\kappa'+m\kappa_\Lambda)x\right)\,dx=\delta(\kappa'+m\kappa_\Lambda)$$

— дельта-функция Дирака, уравнения дифракции для рентгеновских амплитуд в результате простых преобразований примут вид

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial\hat{E}_0(\kappa,\eta;z)}{\partial z}=i(a_0-\kappa\operatorname{ctg}\theta_B)\hat{E}_0(\kappa,\eta;z)+\\
&\qquad+ia_{\bar{h}}\sum_{m=-\infty}^{\infty}B_m(z)\hat{E}_h(\kappa+m\kappa_\Lambda,\eta;z),\\
&-\frac{\partial\hat{E}_h(\kappa,\eta;z)}{\partial z}=i(a_0+\eta-\kappa\operatorname{ctg}\theta_B)\hat{E}_h(\kappa,\eta;z)+\\
&\qquad+ia_h\sum_{m=-\infty}^{\infty}B_m^*(z)\hat{E}_0(\kappa+m\kappa_\Lambda,\eta;z).
\end{aligned}\tag{10}$$

Система связанных дифференциальных уравнений (10) соответствует описанию многоволновой дифракции рентгеновских лучей в кристаллах [20], включая структуры с периодической упруго деформированной кристаллической решеткой вдоль поверхности [5,21], при этом отличную от нуля амплитуду $\hat{E}_{0,h}(\kappa,\eta;z)$ получаем при значениях $\kappa$, кратных волновому числу латеральной модуляции $\kappa_\Lambda$, т. е. при $\kappa=n\kappa_\Lambda$, где $n=0,\pm1,\pm2,\ldots$ Следовательно, система уравнений (10) может быть представлена в виде отдельных уравнений для разных дифракционных порядков. Например, для произвольного порядка с номером $n$ можно записать

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial\hat{E}_{0,n}(\kappa,\eta;z)}{\partial z}=i[a_0-(\kappa-n\kappa_\Lambda)\operatorname{ctg}\theta_B]\times\\
&\quad\times\hat{E}_{0,n}(\kappa,\eta;z)+\\
&\qquad+ia_{\bar{h}}\sum_{m=-\infty}^{\infty}B_m(z)\hat{E}_{h,n-m}(\kappa,\eta;z),\\
&-\frac{\partial\hat{E}_{h,n}(\kappa,\eta;z)}{\partial z}=i[a_0+\eta-(\kappa-n\kappa_\Lambda)\operatorname{ctg}\theta_B]\times\\
&\quad\times\hat{E}_{h,n}(\kappa,\eta;z)+\\
&\qquad+ia_h\sum_{m=-\infty}^{\infty}B_m^*(z)\hat{E}_{0,n-m}(\kappa,\eta;z).
\end{aligned}\tag{11}$$

Наличие суммы в правой части (11) указывает на то, что для углового положения основного максимума ($n=0$) или сателлита с номером $n$ имеет место не только динамическое взаимодействие отраженной $\hat{E}_{0,n}(\kappa,\eta;z)$ и дифракционной $\hat{E}_{h,n}(\kappa,\eta;z)$ волны данного порядка, но и взаимодействие с волнами других дифракционных сателлитов.

Без учета взаимодействия волн соседних дифракционных порядков (одномодовый режим) имеем

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial\hat{E}_{0,n}(\kappa,\eta;z)}{\partial z}=i[a_0-(\kappa-n\kappa_\Lambda)\operatorname{ctg}\theta_B]\times\\
&\quad\times\hat{E}_{0,n}(\kappa,\eta;z)+ia_{-h}B_n(z)\hat{E}_{h,n}(\kappa,\eta;z),\\
&-\frac{\partial\hat{E}_{h,n}(\kappa,\eta;z)}{\partial z}=i[a_0+\eta-(\kappa-n\kappa_\Lambda)\operatorname{ctg}\theta_B]\times\\
&\quad\times\hat{E}_{h,n}(\kappa,\eta;z)+ia_hB_n^*(z)\hat{E}_{0,n}(\kappa,\eta;z).
\end{aligned}\tag{12}$$

Как правило, система уравнений (11) используется для описания дифракции в кристаллах с большим периодом модуляции ($\Lambda>10$ мкм) [21]. Поскольку в рассматриваемом случае период продольной упругой деформации $\Lambda\propto1$ мкм, достаточно исходить из более простых уравнений (12).

## 3. ДИФРАКЦИЯ ПЛОСКОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ВОЛНЫ

Сначала рассмотрим общеизвестную трактовку рентгеновской дифракции, согласно которой фронт рентгеновской волны неограничен в латеральном направлении вдоль оси $x$ (рис. 1*a*). В этом случае справедливы следующие граничные условия в прямом пространстве: для амплитуды рентгеновской волны, падающей на поверхность кристалла, примем $E_{0,n}(\eta;x,z=0)=1$. Пусть толщина кристалла $l_z$, тогда для дифракционной волны $E_{h,n}(\eta;x,z=l_z)=0$. В фурье-пространстве, в котором представлены уравнения (12), граничные условия запишутся как $\hat{E}_{0,n}(\kappa,\eta;z=0)=2\pi\delta(\kappa)$ и $\hat{E}_{h,n}(\kappa,\eta;z=l_z)=0$. Здесь $\delta(\kappa)$ — дельта-функция Дирака.

В уравнениях (12) присутствуют фурье-коэффициенты $B_n(z)$, зависящие от координаты $z$ в глубь кристалла. Эта система уравнений в общем случае не имеет аналитического решения, поэтому, как правило, применяются численные методы [5]. С другой стороны, если коэффициенты $B_n(z)$ для всех дифракционных порядков не зависят от $z$, т. е. $B_n(z)=B_n$, то система (12) решается аналитически. Таким образом, если разбить кристалл на отдельные элементарные слои толщиной $z^p-z^{p-1}=l_z^p$, в пределах которых коэффициенты $B_n^p=B_n(z^p-z^{p-1}=l_z^p)$ можно считать постоянными величинами, то решение находится в виде рекуррентных соотношений. Здесь $z^p$, $z^{p-1}$ — координаты верхней и нижней границы слоя с номером $p$, при этом нумерация слоев выполнена снизу вверх ($p=0,1,2,\ldots,P$). В рамках данной модели рассмотрим неоднородную по глубине кристаллическую систему, состоящую из $P$

слоев. Для произвольного элементарного слоя, например, с номером $p$, находящегося внутри многослойной структуры решение уравнений (12) представим в виде

$$\hat{E}^p_{0,n}(\kappa,\eta;z) = \left(\hat{M}^p_1 \exp\left(i\hat{\xi}^p_n z\right) + \hat{M}^p_2\right) \times \\ \times \exp\left(i\left[\hat{\sigma}^p_0 + \hat{\xi}^p_{n,2}\right] z\right), \quad (13)$$

$$\hat{E}^p_{h,n}(\kappa,\eta;z) = \left(\hat{b}^p_1 \hat{M}^p_1 \exp\left(i\hat{\xi}^p_n z\right) + \hat{b}^p_2 \hat{M}^p_2\right) \times \\ \times \exp\left(i\left[\hat{\sigma}^p_0 + \hat{\xi}^p_{n,2}\right] z\right), \quad (14)$$

где

$$\hat{\psi}_n = 2a_0 + \eta - 2(\kappa - n\kappa_\Lambda)\operatorname{ctg}\theta_B,$$

$$\hat{\xi}^p_n = \sqrt{(\hat{\psi}_n)^2 - 4B^p_n B^{p^*}_n a_h a_{\bar{h}}},$$

$$\hat{\xi}^p_{n,1,2} = (-\hat{\psi}^p_n \pm \hat{\xi}^p_n)/2, \quad \hat{Q}^p_n = \hat{\xi}^p_{n,1}\exp(i\hat{\xi}^p_n l^p_z) - \hat{\xi}^p_{n,2},$$

$$\hat{\sigma}_0 = a_0 - (\kappa - n\kappa_\Lambda)\operatorname{ctg}\theta_B, \quad \hat{b}^p_{1,2} = \hat{\xi}^p_{1,2}/[B^p_n a_{-h}].$$

Коэффициенты $\hat{M}^p_{1,2}$ находятся из граничных условий на интерфейсах, где амплитуда рентгеновской волны, падающей на элементарный слой с номером $p$, задается сверху этого слоя $\hat{\mathrm{E}}^p_{0,n}(\kappa,\eta;z_p)$ и амплитуда дифракционной волны фиксируется на нижней границе $\hat{\mathrm{E}}^p_{h,n}(\kappa,\eta;z_{p-1})$:

$$\hat{M}^p_1 = -\hat{\mathrm{E}}^p_{0,n}(\kappa,\eta;z_p)\frac{\hat{S}^p_2 \exp\left(-i\left[\hat{\sigma}^p_0 + \hat{\xi}^p_{n,1}\right] z_p\right)}{\hat{S}^p_1 - \hat{S}^p_2}, \quad (15)$$

$$\hat{M}^p_2 = \hat{\mathrm{E}}^p_{0,n}(\kappa,\eta;z_p)\frac{\hat{S}^p_1 \exp\left(-i\left[\hat{\sigma}^p_0 + \hat{\xi}^p_{n,2}\right] z_p\right)}{\hat{S}^p_1 - \hat{S}^p_2}. \quad (16)$$

Здесь $\hat{S}^p_1 = (\hat{R}^{p-1}_n - \hat{b}^p_1)\exp(i\hat{\xi}^p_n l^p_z)$, $\hat{S}^p_2 = \hat{R}^{p-1}_n - \hat{b}^p_2$;

$$\hat{R}^{p-1}_n = \hat{\mathrm{E}}^{p-1}_{h,n}(\kappa,\eta;z_{p-1})/\hat{\mathrm{E}}^{p-1}_{0,n}(\kappa,\eta;z_{p-1})$$

— амплитудный коэффициент отражения от $(p-1)$ нижних слоев многослойной структуры. Решения для дифракционного порядка с номером $n$ в прямом пространстве находится обратным преобразованием Фурье выражений (13) и (14) и запишутся как

$$E^p_{0,n}(\eta;z) = (M^p_1 \exp(i\xi^p_n z) + M^p_2) \times \\ \times \exp\left(i[\sigma_0 + \xi^p_{n,2}]z\right), \quad (17)$$

$$E^p_{h,n}(\eta;z) = (b^p_1 M^p_1 \exp(i\xi^p_n z) + b^p_2 M^p_2) \times \\ \times \exp\left(i[\sigma_0 + \xi^p_{n,2}]z\right), \quad (18)$$

где коэффициенты $M^p_{1,2}$, $\psi_n$, $\xi^p_n$, $\xi^p_{n,1,2}$, $Q^p_n$, $\sigma_0$ следуют из соответствующих параметров, присутствующих в решениях (13) и (14) при $\kappa = 0$. Отметим, что в случае падающей на кристалл плоской, пространственно-неограниченной волны, амплитуды проходящего (17) и отраженного (18) рентгеновского полей не зависят о продольной координаты $x$.

Трехосевая регистрация рентгеновских полей в обратном пространстве определяется параметрами $\omega$ и $\varepsilon$, фиксирующими угловое положение образца и анализатора [1]. В симметричной брэгговской геометрии эти параметры связаны с проекциями отклонения вектора дифракции от узла обратной решетки соотношениями [18]

$$q_x = k\sin\theta_B(2\omega - \varepsilon),$$

$$q_z = -k\cos\theta_B\varepsilon.$$

Переход к трехосевой дифракционной схеме выполняется фурье-преобразованием (17) и (18):

$$\hat{E}^p_{0,h,n}(q_x + n\kappa_\Lambda, q_z; z) = \\ = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-i[q_x + n\kappa_\Lambda]x\right) E^p_{0,h,n}(\eta;z). \quad (19)$$

Таким образом, в случае падающей плоской волны получаем математические решения для амплитуд рентгеновских полей в обратном пространстве:

$$\hat{E}^p_{0,h,n}(q_x + n\kappa_\Lambda, \eta; z) = \\ = 2\pi\delta(q_x + n\kappa_\Lambda)E^p_{0,h,n}(\eta;z), \quad (20)$$

где $E^p_{0,h,n}(\eta;z)$ — амплитуды полей в прямом пространстве (17) и (18). Угловая переменная $\eta$, используемая в двухкристальной дифракционной схеме, теперь представима в виде $\eta = (q_x + n\kappa_\Lambda)\operatorname{ctg}\theta_B - q_z$, параметр $\psi_n = 2a_0 + (q_x + n\kappa_\Lambda)\operatorname{ctg}\theta_B - q_z$. Соотношение (20) имеет совершенно прозрачную физическую интерпретацию. В рамках трехосевой дифракционной схемы угловое распределение интенсивности рассеяния в обратном пространстве представимо в виде чередующихся бесконечно узких полос (дельта-функций) соответствующих дифракционных порядков в латеральном направлении (рис. 1*б*). Распределение интенсивностей в вертикальном направлении определяется соотношениями (17), (18) и зависит от угловой переменной $\eta = -q_z$ при $q_x = -n\kappa_\Lambda$, что соответствует $(\omega - 2\theta)$-сканированию в трехосевой дифрактометрии [18]. Амплитуда отраженной волны на входной поверхности кристалла ($z = z_P = 0$) вычисляется на последнем этапе рекуррентной процедуры:

$$\hat{E}^P_{h,n}(q_x,q_z) = 2\pi\delta(q_x+n\kappa_\Lambda)\left(\frac{b_2^P S_1^P - b_1^P S_2^P}{S_1^P - S_2^P}\right). \quad (21)$$

Если многослойная структура — конечной толщины, то при $p = 0$ амплитуда дифракционной волны на ее нижней границе $E^0_{h,n}(q_z; z = z_0) = 0$. В случае, когда многослойная структура лежит на полубесконечной подложке, начальная амплитуда имеет вид

$$\begin{aligned} E^0_{h,n}(q_z; z = z_0) &= \frac{a_h}{\xi^0_{n,1}}; \quad \mathrm{Im}(\xi^0_n) < 0, \\ E^0_{h,n}(q_z; z = z_0) &= \frac{a_h}{\xi^0_{n,2}}; \quad \mathrm{Im}(\xi^0_n) > 0, \end{aligned} \quad (22)$$

где коэффициенты $\xi^0_n$ и $\xi^0_{n,1,2}$ такие же, что и в соотношениях (13), (14), и зависят от характеристик рентгеновского излучения и материала подложки. Полная амплитуда рентгеновской волны, отраженной от кристалла с периодической латеральной деформацией, находится суммированием по всем дифракционным порядкам:

$$\hat{E}^P_h(q_x,q_z) = \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} \hat{E}^P_{h,n}(q_x,q_z). \quad (23)$$

## 4. ДИФРАКЦИЯ ПРОСТРАНСТВЕННО-ОГРАНИЧЕННОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ПУЧКА НА КРИСТАЛЛЕ С ПЕРИОДИЧЕСКОЙ ЛАТЕРАЛЬНОЙ ДЕФОРМАЦИЕЙ

Устоявшийся формализм плосковолновой динамической теории дифракции [22] не отвечает описанию реальных экспериментальных условий. Более того, как показано выше, становится затруднительным анализ карт распределения интенсивности рассеяния вблизи узла обратной решетки (рис. 1*б*), поэтому следующим шагом является переход к рассмотрению дифракции пространственно-ограниченных рентгеновских пучков на кристалле с периодической латеральной деформацией.

Пусть на кристалл с периодической латеральной деформацией решетки падает рентгеновский пучок шириной $w$, ограниченный щелью $S_1$ (рис. 2). Линейный размер засветки этим пучком поверхности кристалла в направлении оси $x$ равен $l_x^{(in)} = w/\sin(\theta_B)$. Наличие щели $S_2$ в дифракционном направлении задает ширину отраженного пучка на входной поверхности кристалла (рис. 2). Дифракцией рентгеновских лучей на краях щелей падающего $S_1$ и отраженного $S_2$ пучков пренебрегаем (приближение геометрической оптики).

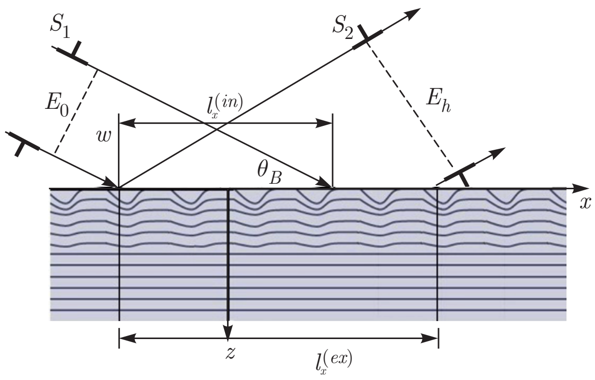


**Рис. 2.** Схематическое изображение дифракции ограниченного рентгеновского пучка на кристалле с периодической латеральной деформацией решетки; $w = l_x^{(in)}\sin(\theta_B)$ — ширина падающего пучка, ограниченного щелью $S_1$

Уравнения дифракции (12) для пространственно-ограниченных пучков должны быть дополнены новыми граничными условиями. Наличие щели $S_1$ позволяет записать в прямом пространстве следующее выражение для амплитуды рентгеновского пучка, падающего на поверхность кристалла: $E_{0,n}(\eta; x, z = 0) = Y(x, l_x^{(in)})$, где

$$Y(x, l_x^{(in)}) = \begin{cases} 1, & x \in \pm l_x^{(in)}/2, \\ 0, & x \notin \pm l_x^{(in)}/2. \end{cases} \quad (24)$$

Это граничное условие в фурье-пространстве задается равенством $\hat{E}^p_{0,n}(\kappa,\eta; z = 0) = \hat{Y}(\kappa, l_x^{(in)})$, при этом фурье-образ функции (24) имеет вид

$$\hat{Y}\left(\kappa, l_x^{(in)}\right) = \frac{\sin\left(\kappa l_x^{(in)}/2\right)}{\kappa/2}. \quad (25)$$

Второе граничное условие для кристалла толщиной $l_z$:

$$E_{h,n}(\eta; x, l_z) = \hat{E}_{h,n}(\kappa,\eta; l_z) = 0.$$

Полагая, что периодическая латеральная деформация кристаллической решетки изменяется с глубиной $z$, в рамках рекуррентной процедуры получаем соотношения, по структуре аналогичные (13), (14). Отличие заключается в том, что для плоской волны граничные коэффициенты $\hat{M}^p_{1,2} \propto \delta(\kappa)$, для ограниченного падающего пучка $\hat{M}^p_{1,2} \propto \hat{Y}(\kappa, l_x^{(in)})$.

Переход к решениям, описывающим трехосевую регистрацию рентгеновских полей, требует выполнить фурье-преобразования (19). Для амплитуды отраженного рентгеновского пучка $n$-го дифракционного порядка на поверхности кристалла ($z = z_P =$

$= 0$) в трехосевой геометрии с щелями $S_1$ и $S_2$ получаем

$$\hat{E}^P_{h,n}(q_x,q_z) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\kappa \left(\frac{\hat{b}^P_2\hat{S}^P_1 - \hat{b}^P_1\hat{S}^P_2}{\hat{S}^P_1 - \hat{S}^P_2}\right) \times \\ \times \hat{Y}\left(\kappa, l_x^{(in)}\right)\hat{Y}\left(\kappa - n\kappa_\Lambda - q_x, l_x^{(ex)}\right), \quad (26)$$

где

$$\hat{Y}\left(\kappa - n\kappa_\Lambda - q_x, l_x^{(in)}\right) = \\ = \frac{\sin\left([\kappa - n\kappa_\Lambda - q_x] l_x^{(ex)}/2\right)}{[\kappa - n\kappa_\Lambda - q_x]/2}. \quad (27)$$

Коэффициенты в (26) зависят от угловой переменной $\hat{\psi}^p_n = 2a_0 + (q_x + n\kappa_\Lambda - 2\kappa)\operatorname{ctg}\theta_B - q_z$. Амплитудный коэффициент отражения запишется как

$$R_{h,n}(q_x,q_z) = \frac{1}{2\pi l_{norm}}\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\kappa \left(\frac{\hat{b}^P_2\hat{S}^P_1 - \hat{b}^P_1\hat{S}^P_2}{\hat{S}^P_1 - \hat{S}^P_2}\right) \times \\ \times \hat{Y}\left(\kappa, l_x^{(in)}\right)\hat{Y}\left(\kappa - n\kappa_\Lambda - q_x, l_x^{(ex)}\right). \quad (28)$$

Величина $l_{norn}$ равна наименьшему из значений $l_x^{(in)}$ и $l_x^{(ex)}$.

## 5. ДИФРАКЦИЯ ПРОСТРАНСТВЕННО-ОГРАНИЧЕННОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ПУЧКА НА КРИСТАЛЛЕ С ПОВЕРХНОСТНОЙ РЕШЕТКОЙ ДРУГОГО МАТЕРИАЛА

Рассмотрим симметричную брэгговскую дифракцию ограниченных рентгеновских пучков в кристалле, на поверхности которого, например, методом литографии сформирована поверхностная решетка из другого материала в виде периодически расположенных латерально-ограниченных тонкопленочных линий одинаковой высоты $h_f$ и ширины $l_f$. Эти линии могут быть кристаллическими, аморфными или поликристаллическими и, в отличии от кристалла, на котором они размещены, находятся вне дифракционного условия. Из-за различия в коэффициентах термического расширения при комнатной температуре, в тонкопленочных линиях и в подложке возникают упругие напряжения, приводящие к возникновению деформаций кристаллической решетки подложки. Период в расположении линий другого материала $\Lambda$ совпадает с периодом деформаций в подложке, $(\Lambda - l_f)$ — расстояние между соседними линиями (рис. 3).

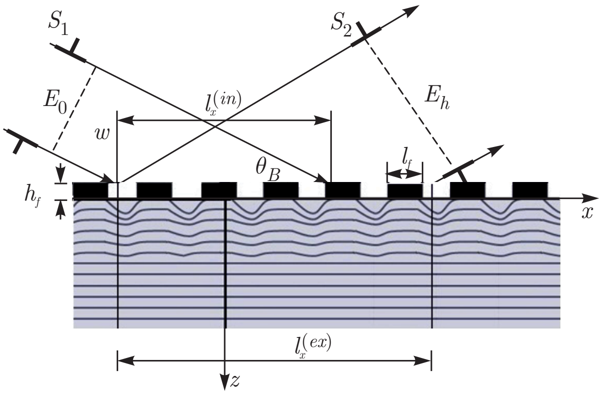


**Рис. 3.** Схема дифракции ограниченных рентгеновских пучков на кристалле с поверхностной решеткой другого материала

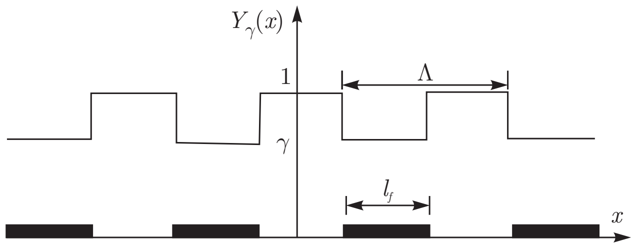


**Рис. 4.** Функция модуляции интенсивности падающего рентгеновского излучения: $\gamma$ — доля пропускаемого излучения через периодически расположенные поглотители, $l_f$ — ширина поглощающей тонкопленочной линии, $\Lambda$ — период модуляции

Если на поверхности кристалла находится система тонкопленочных линий другого материала, то в общем случае падающий рентгеновский пучок, прежде чем он достигнет поверхности подложки, будет испытывать поглощение на участках, где эти линии присутствуют. Кроме того, наличие линий приводит к периодической деформации приповерхностной области кристалла, поэтому динамическая дифракция для произвольного сателлита будет описываться системой уравнений (12). На участках между линиями поглощение отсутствует, тем самым возникает периодическая модуляция интенсивности падающего излучения в латеральном направлении. Для описания динамической дифракции на кристалле с такой модуляцией падающего излучения примем следующую модель граничных условий в прямом пространстве: $E_{0,n}(\eta; x, z = 0) = Y_\gamma(x, M)$, где модуляция падающего рентгеновского излучения задается функцией вида (рис. 4):

$$Y_\gamma(x,M)=1,\ x\in\pm\frac{\Lambda-l_f}{2},\ -\frac{M\Lambda}{2}\le x\le\frac{M\Lambda}{2},$$
$$Y_\gamma(x,M)=\gamma,\ x\notin\pm\frac{\Lambda-l_f}{2},\ -\frac{M\Lambda}{2}\le x\le M\Lambda,\quad (29)$$
$$Y_\gamma(x,M)=0,\ x<-\frac{M\Lambda}{2},\quad x>\frac{M\Lambda}{2}.$$

Здесь $\gamma$ — доля излучения, пропускаемого через поглотитель (тонкопленочную линию), $M$ — число периодов модуляции, $l_x^{(in)}=M\Lambda$ — ширина засветки поверхности кристалла с ПР падающим рентгеновским пучком. Для кристалла толщиной $l_z$ справедливо второе граничное условие: $E_{h,n}(\eta;x,z=l_z)=0$. Поскольку система уравнений (12) представлена в фурье-пространстве, граничные условия имеют вид $\hat{E}_{0,n}(\kappa,\eta;z=0)=\hat{Y}_\gamma(\kappa,M)$ и $\hat{E}_{h,n}(\eta;x,z=l_z)=0$, где

$$\hat{Y}_\gamma(\kappa,M)=\frac{\sin(\kappa M\Lambda/2)}{\sin(\kappa\Lambda/2)}\times\left[(1-\gamma)\frac{\sin\left(\kappa(\Lambda-l_f)/2\right)}{\kappa/2}+\gamma\frac{\sin(\kappa\Lambda/2)}{\kappa/2}\right].\quad (30)$$

Отметим, что при $\gamma=1$, т. е. когда материал ПР является непоглощающим, выражение (30) сводится к (25):

$$\hat{Y}_\gamma(\kappa,M)=\sin(\kappa M\Lambda/2)/(\kappa/2).$$

Пусть отраженный рентгеновский пучок, выходящий с нижней границы поверхности подложки, засвечивает $L$ полос ПР. В режиме трехосевой регистрации амплитудный коэффициент отражения $n$-го дифракционного порядка от кристалла с поверхностной решеткой другого материала запишется как

$$R_{h,n}(q_x,q_z)=\frac{1}{2\pi l_{norm}}\int\limits_{-\infty}^{\infty}d\kappa\left(\frac{\hat{b}_2^P\hat{S}_1^P-\hat{b}_1^P\hat{S}_2^P}{\hat{S}_1^P-\hat{S}_2^P}\right)\times\hat{Y}_\gamma(\kappa,M)\,\hat{Y}_\gamma(\kappa-n\kappa_\Lambda-q_x,L),\quad (31)$$

где

$$\hat{Y}_\gamma(\kappa-n\kappa_\Lambda-q_x,L)=\frac{\sin\left([\kappa-n\kappa_\Lambda-q_x]\Lambda L/2\right)}{\sin\left([\kappa-n\kappa_\Lambda-q_x]\Lambda/2\right)}\times\left[(1-\gamma)\frac{\sin\left([\kappa-n\kappa_\Lambda-q_x](\Lambda-l_f)/2\right)}{[\kappa-n\kappa_\Lambda-q_x]/2}+\gamma\frac{\sin\left([\kappa-n\kappa_\Lambda-q_x]\Lambda/2\right)}{[\kappa-n\kappa_\Lambda-q_x]/2}\right].\quad (32)$$

При $\gamma=1$, т. е. в отсутствие модуляции падающего рентгеновского пучка, соотношение (32) непосредственно сводится к формуле (28), при этом $l_x^{(ex)}=L\Lambda$.

## 6. ПОЛЕ УПРУГИХ ДЕФОРМАЦИЙ

Тонкопленочные линии одного материала на поверхности кристаллической подложки другого материала имеют широкое применение в приборах микро- и наноэлектроники, например, в технологии интегральных схем [23]. Известно, что пленки, осажденные на подложке, находятся в напряженном состоянии. Эти напряжения являются результатом различий коэффициентов теплового расширения пленки и подложки [24]. Когда тонкая пленка покрывает всю поверхность толстой подложки, то упругие напряжения в основном присутствуют в пленке. Если при этом система пленка–подложка испытывает упругий изгиб, эти напряжения могут быть вычислены с использованием классической формулы Стони [25]. В случае, когда пленка, например, методом литографии трансформируется в систему из периодически расположенных линий, напряженное состояние накапливается в подложке и усиливается преимущественно у краев тонкопленочных линий. Такое усиление упругих напряжений в ряде случаев приводит к генерации дислокаций в подложке [26].

Анализ упругих деформаций кристаллической решетки на краях пленки впервые выполнен в работе [27]. Позже предложено несколько различных моделей для изучения упругих напряжений в системе пленка–подложка [28–31]. На основе этих моделей [32–35], а также расчетов с использованием метода конечных элементов [36, 37] спрогнозированы краевые эффекты в системе тонкопленочная линия–подложка.

Для простоты будем исходить из первой, наиболее простой модели краевых сил [28]. Согласно этой модели, на краю пленки, лежащей на полубесконечной подложке из другого материала, концентрируется сила в направлении, параллельном интерфейсу между пленкой и подложкой. Величина этой силы равна $F_f=\sigma_{fxx}h_f$, где $\sigma_{fxx}$ — компонента напряжения, присутствующая у края пленки, $h_f$ — толщина пленки. В результате действия этой силы в подложке возникают упругие напряжения, компоненты которых в плоскости дифракции $xz$ имеют вид [28]

$$\sigma_{xx}=-\frac{2F_f}{\pi}\left(\frac{x^3}{(x^2+z^2)^2}\right),\qquad \sigma_{zz}=-\frac{2F_f}{\pi}\left(\frac{xz^2}{(x^2+z^2)^2}\right).\quad (33)$$

Строго говоря, величина $\sigma_{fxx}$ зависит от ширины тонкопленочной линии $l_f$, — чем уже линия, тем меньше ее значение. Имеются теоретические модели и эксперименты по нахождению величины $\sigma_{fxx}$ [33, 37]. Так, в работе [37] получена универсальная кривая среднего напряжения в пленке, латеральный размер которой существенно меньше поверхности подложки:

$$\sigma_{fxx} = \sigma_0 \frac{X}{X+a}, \tag{34}$$

где $X = K_{hu} l_f / h_f$, $K_{hu} = E_s(1-\nu_f^2)/E_f(1-\nu_s^2)$, $a = 5.545$, $\sigma_0$ — однородное напряжение в пленке больших латеральных размеров, $E_{f,s}$, $\nu_{f,s}$ — модули Юнга и коэффициенты Пуассона пленочной линии (индекс «$f$») и подложки (индекс «$s$»).

Фурье-коэффициенты $B_n(z)$, присутствующие в решениях для амплитуд полей рентгеновских пучков, определяются упругими смещениями атомов из узлов кристаллической решетки (см. Приложение, формула (A.4))

$$u_z(x,z) = u_0 \left( \frac{zx}{x^2+z^2} - \frac{1-\nu_s}{1+\nu_s} \operatorname{arctg} \frac{z}{x} \right), \tag{35}$$

где максимальное значение решеточных смещений $u_0 = F_f(1+\nu_s)/(\pi E_s)$ зависит от характеристик тонкопленочной линии (краевой силы $F_f$), а также от коэффициента Пуассона и модуля Юнга подложки. Для численных расчетов поле решеточных смещений вдоль вектора обратной решетки удобно представить в виде

$$u_z\left(\frac{\varphi}{\kappa_\Lambda}, z\right) = u_0 \left( \frac{z(\varphi/\kappa_\Lambda)}{(\varphi/\kappa_\Lambda)^2 + z^2} - \frac{1-\nu_s}{1+\nu_s} \operatorname{arctg} \frac{z}{\varphi/\kappa_\Lambda} \right). \tag{36}$$

Выражения (35), (36) записаны для одного края пленки, латеральный размер которой меньше поверхности подложки, поэтому для одной линии упругие решеточные смещения запишутся как

$$u_{z,line}(x,z) = u_z(x - l_f/2, z) - u_z(x + l_f/2, z). \tag{37}$$

Аналогичная запись справедлива и для упругих решеточных напряжений, а также деформаций кристаллической решетки [38]. В случае периодического расположения $M$ линий общее поле упругих решеточных смещений в подложке запишется как суперпозиция смещений для одной изолированной тонкопленочной линии:

$$u_{z,gr}(x,z) = \sum_{m=-M/2}^{M/2} u_{z,line}(x + m\Lambda, z). \tag{38}$$

Следующим шагом в рассмотрении является вычисление фурье-коэффициентов $B_n(z)$. Формула (8) дает связь этих коэффициентов с полем решеточных смещений $u_{z,line}(\varphi/\kappa_\Lambda, z_p)$ для отдельной линии:

$$B_n^p = (2\pi)^{-1} \times \int_0^{2\pi} \exp\left[i\left(h u_{z,st}(\varphi/\kappa_\Lambda, z_p) + n\varphi\right)\right] d\varphi, \tag{39}$$

где $u_{z,line}(\varphi/\kappa_\Lambda, z_p)$ задается соотношением (37) заменой $x \to \varphi/\kappa_\Lambda$ и при значении координаты $z = z_p$.

## 7. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Численное моделирование углового распределения интенсивности рентгеновского рассеяния выполнено для кристалла кремния с поверхностными решетками из вольфрама и оксида $SiO_2$. В обоих случаях период ПР составлял 1 мкм, ширины металлической и оксидной линий 0.5 мкм, их толщины равны 100 нм.

Использованы табличные данные для симметричного (111) отражения $\sigma$-поляризованного рентгеновского $K_{\alpha 1}$-излучения Cu с длиной волны $\lambda = 1.54$ Å (см. ссылку [39] и указанный в ней адрес сайта “X-Ray Server”). Длина первичной экстинкции составляет $l_{ext} = 1.51$ мкм. Угол Брэгга для выбранного отражения равен 14.221°, межплоскостное расстояние $d_{111} = 3.1355$ Å.

В численных расчетах значения модулей Юнга и коэффициентов Пуассона для кремния, вольфрама и оксида $SiO_2$ взяты из работ [33,40,41]. Несмотря на то что однородные напряжения в пленках больших латеральных размеров для вольфрама (1300 МПа) и оксида $SiO_2$ (400 МПа) сильно разнятся, компоненты напряжений, присутствующие у краев пленок вольфрама (360 МПа) и $SiO_2$ (300 МПа) различаются незначительно. Это связано с тем, что коэффициенты $K_{hu}$ в (34) для вольфрама (0.427) и оксида кремния (2.608) имеют заметное различие. Максимальные решеточные смещения на краю пленки $u_0$ в (35) и (36) имеют значения 0.064 нм для вольфрама и 0.051 нм для $SiO_2$. Для периодически расположенных тонкопленочных линий максимальные значения смещений равны 0.053 нм для W и 0.042 нм для $SiO_2$. Карты равнозначных контуров упругих решеточных смещений для вольфрама и оксида $SiO_2$ вычислены на основе формул (36)–(38) и показаны на рис. 5.

На рис. 6 представлены профили (горизонтальные сечения на картах рис. 5) упругих решеточных

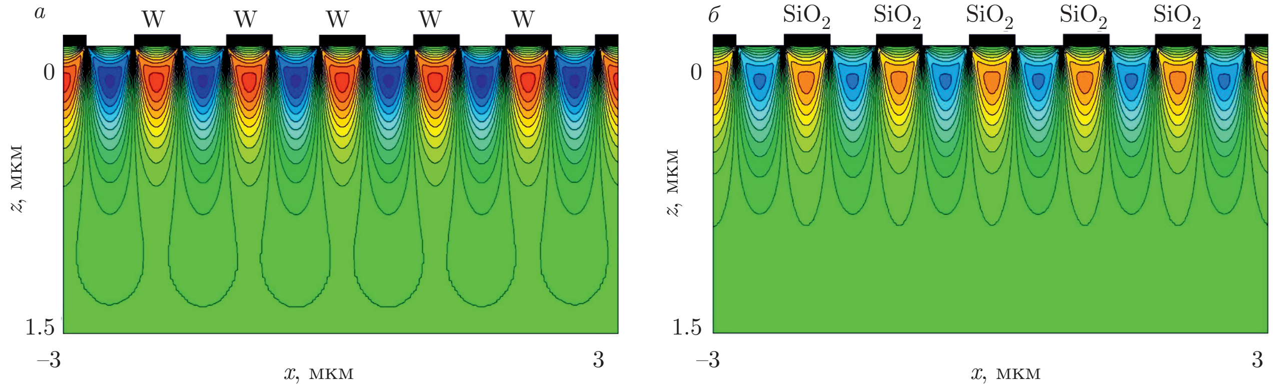


**Рис. 5.** (В цвете онлайн) Поля упругих решеточных смещений в кристалле кремния $u_{z,gr}(x,z)$, вызванные поверхностными решетками вольфрама ($a$) и $SiO_2$ ($б$). Ширина каждой тонкопленочной линии обоих материалов 0.5 мкм, толщина 0.1 мкм. Период решетки 1.0 мкм. Контуры равных смещений представлены в линейном масштабе, максимальное значение $u_z^{(max)} = 0.06$ нм (красный цвет), минимальное значение $u_z^{(min)} = -0.06$ нм (синий цвет). Разность между соседними контурными линиями 0.005 нм

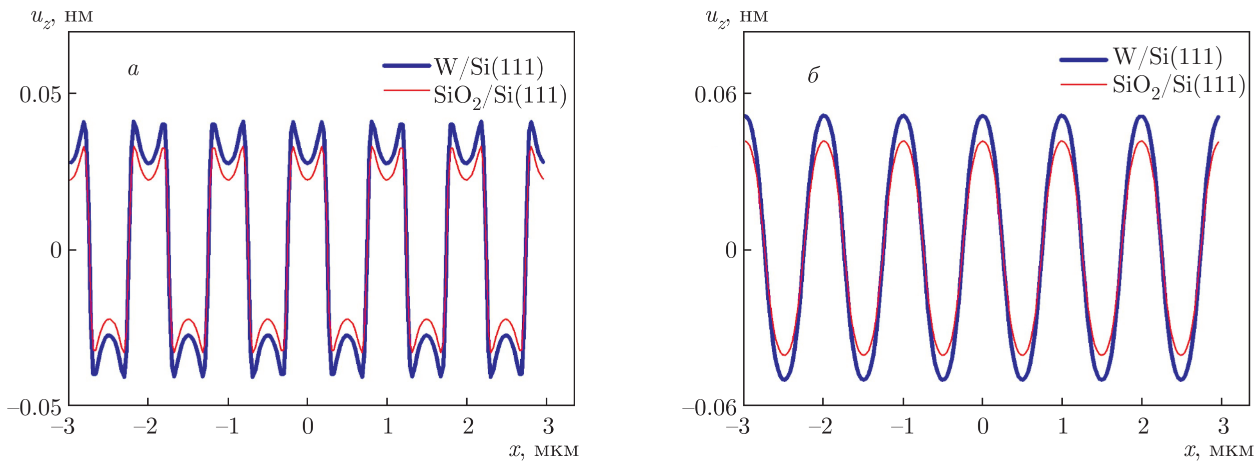


**Рис. 6.** (В цвете онлайн) Профили упругих решеточных смещений $u_{z,gr}(x)$ кристалла кремния вдоль латеральной оси $x$ на глубине $z = 0.06$ мкм ($a$) и $z = 0.23$ мкм ($б$) для поверхностных решеток вольфрама (жирная синяя линия) и $SiO_2$ (красная тонкая линия)

смещений $u_{z,gr}(x)$ подложки кремния вдоль латеральной оси на разной глубине кристалла. Нетрудно видеть, что максимальные значения упругих смещений локализуются не на поверхности подложки, а на глубине 0.23 мкм. При этом вблизи интерфейса (рис. 5, 6$a$) смещения максимальны у краев тонкопленочных линий, с увеличением глубины максимумы упругих деформаций концентрируются под центром линии (рис. 5, 6$б$). Более наглядно распределения упругих смещений по глубине подложки для ПР разных материалов показаны на рис. 7. Вычисления углового распределения интенсивности рентгеновского рассеяния вблизи узла обратной решетки на кристалле кремния с поверхностными решетками вольфрама и $SiO_2$ выполнялись на основе соотношения

$$I_h(q_x,q_z) = \left| \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} R_{h,n}(q_x,q_z) \right|^2, \qquad (40)$$

где $R_{h,n}(q_x,q_z)$ — амплитудный коэффициент отражения (31). Результаты вычислений представлены в виде карт распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве (RSM). Поскольку в эксперименте, как правило, ширина падающего пучка, ограниченного щелью $S_1$, составляет порядка $w = 100$ мкм, получаем $l_x^{(in)} = M\Lambda = 400$ мкм. Это значение для $l_x^{(in)}$, а также $l_x^{(ex)} = L\Lambda = 400$ мкм

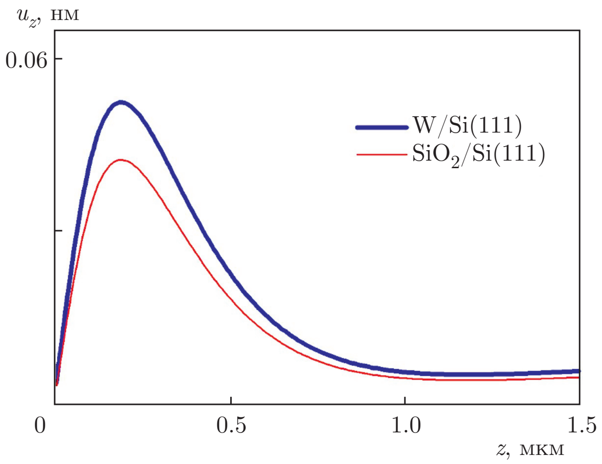


**Рис. 7.** (В цвете онлайн) Профили упругих решеточных смещений $u_{z,gr}(z)$ кристалла кремния вдоль вертикальной оси $z$ для поверхностных решеток вольфрама (жирная синяя линия) и $SiO_2$ (красная тонкая линия) при $x = 0$

($M = L = 400$), было использовано в численном моделировании рентгеновской дифракции на кристалле кремния с ПР обоих материалов. Вычисления карт RSM проводились непосредственно с применением формулы (40). Чтобы полученные теоретические результаты визуально были похожи на результаты экспериментальных измерений, выполнено численное моделирование с учетом инструментальной функции [18, 42] для дифракционной схемы с четырехкратно отражающим монохроматором Ge(022) и двукратно отражающим анализатором Ge(022).

На рис. 8 показаны карты RSM от кристалла кремния с вольфрамовой (*а*) и оксидной (*б*) поверхностной решеткой, а на рис. 9 то же самое, но с учетом инструментальной функции. Нетрудно видеть, что угловые распределения интенсивностей рассеяния вблизи узла обратной решетки для систем W/Si(111) и $SiO_2$/Si(111) существенно различаются. В случае вольфрамовой ПР на картах RSM, помимо традиционных латеральных дифракционных порядков, возникают диагональные сателлиты. Причина такого различия в дифракционных картинах сводится к следующему. Мнимые части фурье-коэффициентов рентгеновской поляризуемости вольфрама $\chi_{0,\mathrm{W}}^{im} = i0.684 \cdot 10^{-5}$ и $SiO_2$ $\chi_{0,\mathrm{SiO_2}}^{im} = i0.0116 \cdot 10^{-5}$ [39] различаются в 41 раз, на эту же величину различаются линейные коэффициенты поглощения. Таким образом, параметр $\gamma$ в (29) и (30), определяющий долю пропускаемого излучения через периодически расположенные тонкопленочные линии, для вольфрама $\gamma = 0.87$, для оксида кремния $\gamma = 0.99$. Из этого следует, что вольфрамовая поверхностная решетка периодически модулирует падающее на кристалл кремния рентгеновское излучение, в то время как оксидная ПР пропускает падающее излучение к поверхности подложки практически без поглощения. Таким образом, периодическая модуляция падающего на кристалл излучения с ПР сильно поглощающего материала приводит к возникновению дополнительных диагональных дифракционных порядков, которые могут быть более интенсивными по сравнению с сателлитами, вызванными периодической деформацией приповерхностной области подложки (рис. 8*а*, 9*а*). Латеральные дифракционные порядки на всех расчетных RSM обозначены нулем, положительными и отрицательными целыми числами. Диагональные сателлиты имеют два цифровых значения, первое число указывает на латеральное положение, второе — на вертикальную координату на картах RSM.

Ранее была рассмотрена модель рентгеновской дифракции от системы W/Si(111) без учета периодических упругих деформаций в приповерхностной области подложки [11]. Теоретические расчеты RSM показали наличие диагональных дифракционных порядков, однако отсутствовали некоторые латеральные сателлиты, наблюдаемые на экспериментальных картах интенсивности рассеяния [9]. Здесь в рамках этой модели с целью сравнения результатов выполнено численное моделирование для кристалла кремния с ПР вольфрама и оксида $SiO_2$. Расчетные карты RSM представлены на рис. 10 и 11. В отсутствие периодических деформаций в подложке с вольфрамовой ПР на картах RSM присутствуют диагональные дифракционные порядки, при этом отсутствуют $\pm1$ сателлиты (рис. 10*а*, рис. 11*а*). Кроме того, отсутствуют сателлитные пики с номерами $(\pm2, \pm1)$, наблюдаемые на картах рис. 8*а* и 9*а*, поскольку на дифракционных картинах (рис. 10*а*, рис. 11*а*) нет латеральных сателлитов $\pm1$. Что касается оксидной ПР, то без периодических латеральных деформаций в подложке, дифракционные порядки вовсе отсутствуют. В данном случае угловое распределение интенсивности рассеяния в обратном пространстве соответствует дифракции пространственно-ограниченного рентгеновского пучка в совершенном кристалле (рис. 10*б*, рис. 11*б*) [18].

## 8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Суммируя изложенное выше, можно сделать вывод, что разработанная теория полностью объясняет

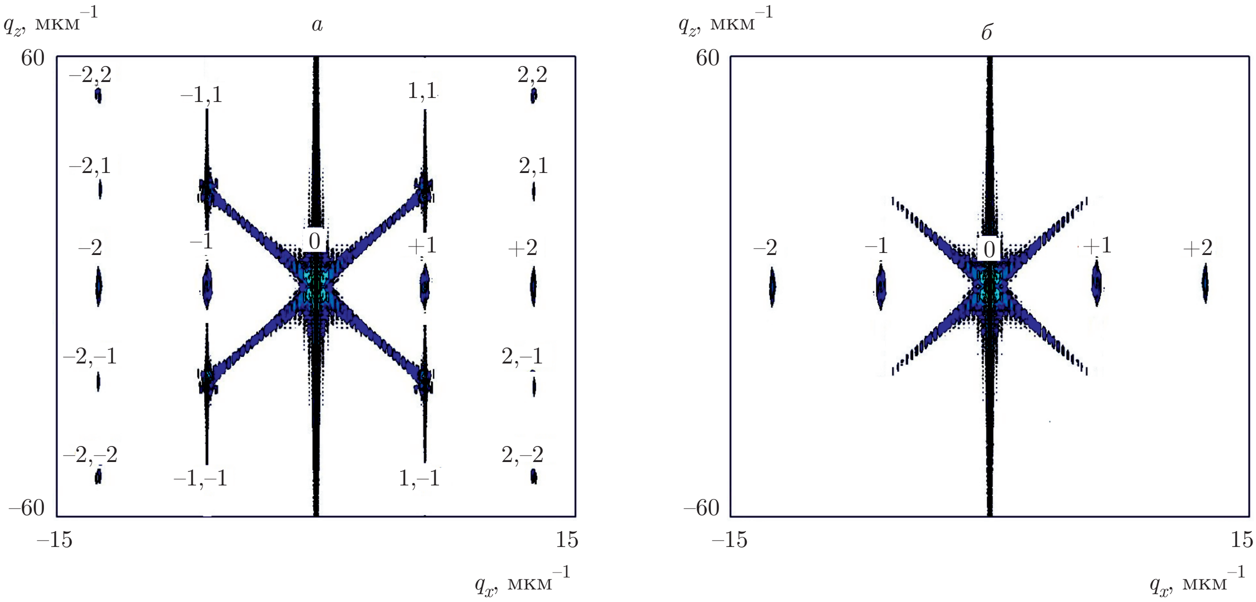


**Рис. 8.** Карты распределения интенсивности рассеяния от кристалла кремния с вольфрамовой (*а*) и оксидной (*б*) поверхностными решетками. Ширина падающего и отраженного рентгеновских пучков 100 мкм

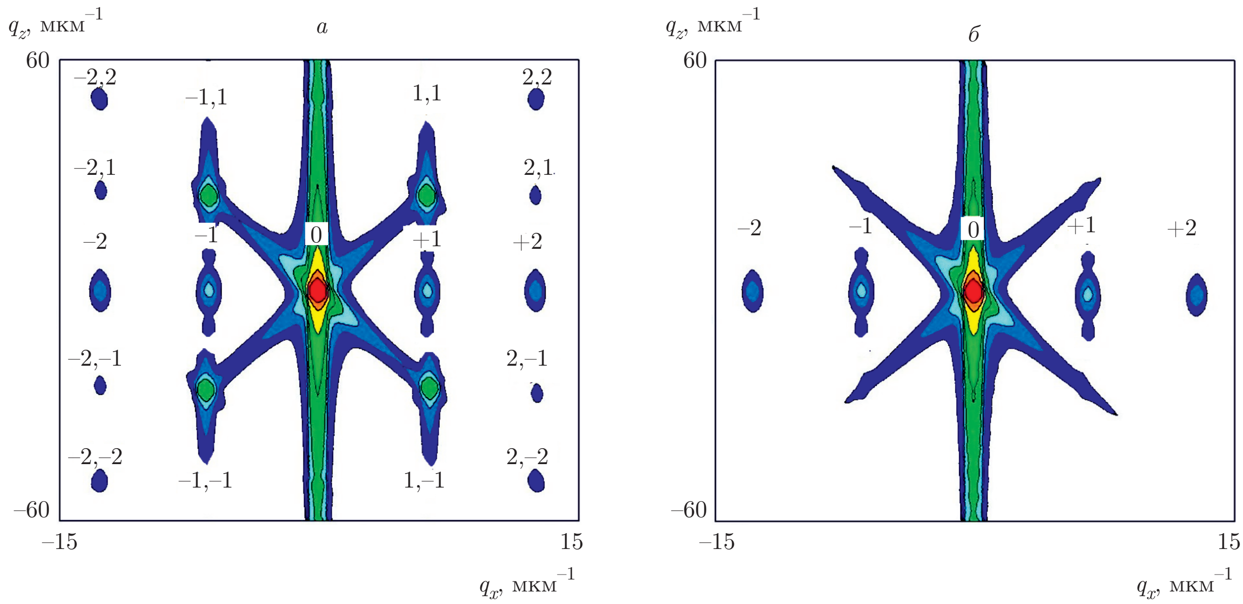


**Рис. 9.** Карты распределения интенсивности рассеяния от кристалла кремния с вольфрамовой (*а*) и оксидной (*б*) поверхностными решетками с учетом инструментальной функции. Ширина падающего и отраженного рентгеновских пучков 100 мкм

наблюдаемое в эксперименте различие в угловых распределениях интенсивности рассеяния от кристалла кремния с вольфрамовой [9] и оксидной [7] поверхностной решеткой. В зависимости от граничных условий и вида периодических полей упругих деформаций теория может быть использована для описания динамической дифракции рентгеновских лучей и тепловых нейтронов в кристаллах, промодулированных поверхностной акустической волной [4, 5, 21], доменных структурах [12], системах с поверхностным рельефом с канавками, заполненными, другим материалом [16], и т. д. Следует также подчеркнуть, что разработанный подход оперирует с пространственно-ограниченными рентгеновскими пучками, что может существенно облегчить анализ экспериментальных данных, сопровождаемый

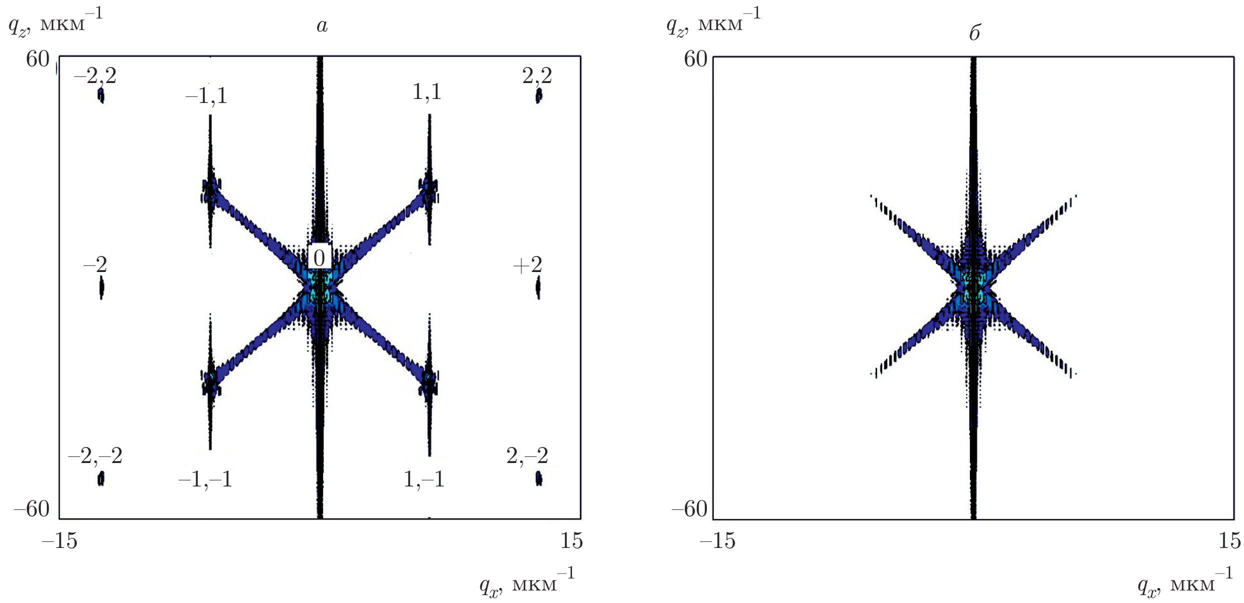


**Рис. 10.** Карты распределения интенсивности рассеяния от кристалла кремния с вольфрамовой (*а*) и оксидной (*б*) поверхностными решетками без учета деформаций в подложке. Ширина падающего и отраженного рентгеновских пучков 100 мкм

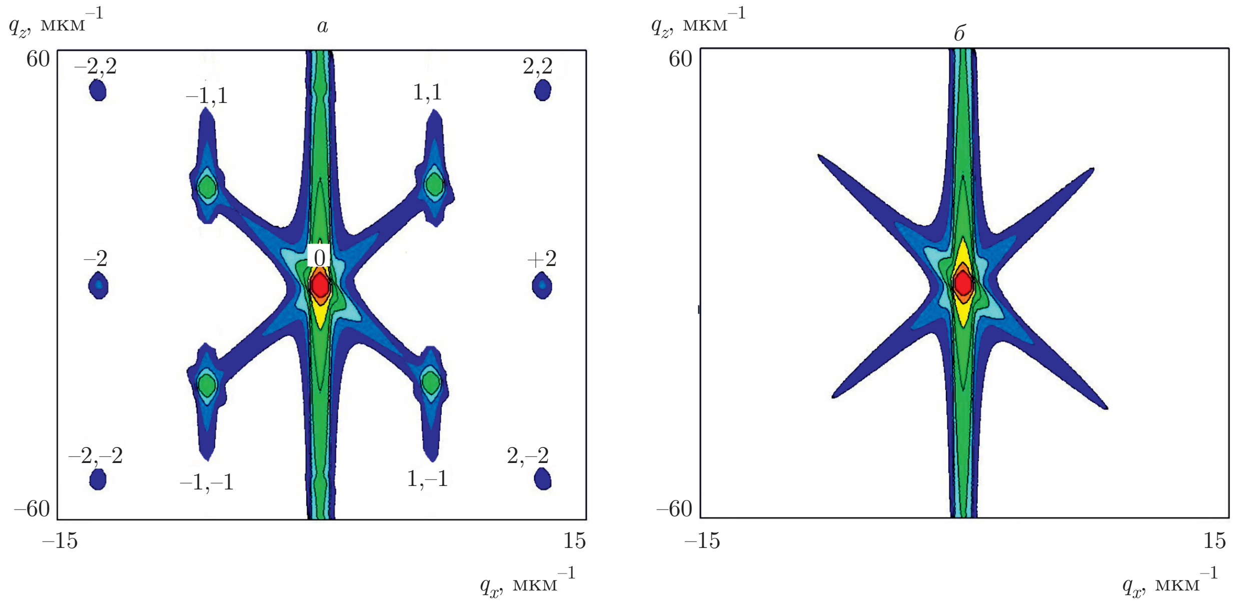


**Рис. 11.** Карты распределения интенсивности рассеяния от кристалла кремния с вольфрамовой (*а*) и оксидной (*б*) поверхностными решетками без учета деформаций в подложке и с учетом инструментальной функции. Ширина падающего и отраженного рентгеновских пучков 100 мкм

численным моделированием или в рамках строгого решения обратных задач рентгеновской дифракции [43].

**Финансирование.** Работа выполнена при частичной финансовой поддержке программы фундаментальных исследований Уральского отделения Российской академии наук (проект № 18-10-2-23) и Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 17-02-00090-а).

**ПРИЛОЖЕНИЕ**

Возникающие в подложке упругие деформации можно рассчитать с использованием соотношений (33)

$$\varepsilon_{xx} = \frac{1}{E_s}[\sigma_{xx} - \nu_s \sigma_{zz}] =$$
$$= -\frac{2F_f}{\pi E_s}\left(\frac{x^3}{(x^2+z^2)^2} - \nu_s \frac{xz^2}{(x^2+z^2)^2}\right), \quad \text{(A.1)}$$

$$\varepsilon_{zz} = \frac{1}{E_s}[\sigma_{zz} - \nu_s \sigma_{xx}] =$$
$$= -\frac{2F_f}{\pi E_s}\left(\frac{xz^2}{(x^2+z^2)^2} - \nu_s \frac{x^3}{(x^2+z^2)^2}\right). \quad \text{(A.2)}$$

Зная связь деформаций с полями атомных смещений $\varepsilon_{xx} = du_x/dx$, $\varepsilon_{zz} = du_z/dz$, получаем

$$u_x = -\frac{2F_f}{\pi E_s}\left(\frac{x^2+\nu_s z^2}{2(x^2+z^2)} + \frac{1}{2}\ln|x^2+z^2|\right), \quad \text{(A.3)}$$

$$u_z = \frac{2F_f}{\pi E_s} \times$$
$$\times \left((1+\nu_s)\frac{zx}{2(x^2+z^2)} - (1-\nu_s)\frac{1}{2}\operatorname{arctg}\frac{z}{x}\right). \quad \text{(A.4)}$$

## ЛИТЕРАТУРА


1. A. Iida and K. Kohra, Phys. Stat. Sol. (a) **51**, 533 (1979).
2. V. V. Aristov, A. I. Erko, A. Yu. Nikulin et al., Opt. Commun. **58**, 300 (1986).
3. V. V. Aristov, A. Yu. Nikulin, A. A. Snigirev et al., Phys. Stat. Sol. (a) **95**, 81 (1986).
4. R. Tucoulou, R. Pascal, M. Brunel et al., J. Appl. Cryst. **33**, 1019 (2000).
5. V. I. Punegov, Ya. I. Nesterets, and D. V. Roshchupkin, J. Appl. Cryst. **43**, 520 (2010).
6. V. V. Aristov, S. M. Kuznetsov, A. V. Kouyumchyan et al., Phys. Stat. Sol. (a) **125**, 57 (1991).
7. P. Ershov, S. Kuznetsov, I. Snigireva et al., J. Appl. Cryst. **46**, 1475 (2013).
8. D. V. Roshchupkin, D. V. Irzhak, S. L. Shabel'nikova et al., J. Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques **7**, 663 (2013).
9. D. V. Irzhak, M. A. Knyasev, V. I. Punegov et al., J. Appl. Cryst. **48**, 1159 (2015).
10. A. Erko and A. Firsov, Proc. SPIE **5539**, 148 (2004).
11. В. И. Пунегов, С. И. Колосов, Письма в ЖЭТФ **102**, 159 (2015).
12. M. Bazzan, C. Sada, N. Argiolas et al., J. Appl. Phys. **106**, 104121 (2009).
13. V. V. Aristov, V. N. Mordkovich, A. Yu. Nikulin et al., Phys. Stat. Sol. (a) **120**, K1 (1990).
14. A. Daniel, Y. Zhuang, J. Stangl et al., Proceedings GMe Forum (2001), p. 165.
15. Y. Ezzaidi, G. Gaudeau, S. Escoubas et al., Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **284**, 23 (2012).
16. M. Eberlein, S. Escoubas, M. Gailhanou et al., Phys. Stat. Sol. (a) **204**, 2542 (2007).
17. S. Takagi, Acta Cryst. **15**, 1311 (1962).
18. V. I. Punegov, K. M. Pavlov, A. V. Karpov et al., J. Appl. Cryst. **50**, 1256 (2017).
19. В. И. Пунегов, ЖЭТФ **154**, 248 (2018).
20. Shin-Lin Chang, *Multiple Diffraction of X-Rays in Crystals*, Springer-Verlag, Berlin (1984).
21. В. И. Пунегов, Д. В. Рощупкин, Кристаллография **57**, 29 (2012).
22. A. Authier, *Dynamical Theory of X-Ray Diffraction*, Oxford University Press, New York (2001).
23. T. Arai, H. Nakaie, K. Kamimura et al., J. Mat. Sci. Chem. Engin. **4**, 29 (2016).
24. S. C. Jain, H. E. Maes, K. Pinardi et al., J. Appl. Phys. **79**, 8145 (1996).
25. G. G. Stoney, Proc. R. Soc. London, Ser. A **82**, 172 (1909).
26. Z. Zhang, J. Yoon, and Z. Suo, Appl. Phys. Lett. **89**, 261912 (2006).
27. A. Blech and E. S. Meieran, J. Appl. Phys. **38**, 2913 (1967).
28. S. M. Hu, Appl. Phys. Lett. **32**, 5 (1978).
29. S. M. Hu, J. Appl. Phys. **50**, 4661 (1979).
30. S. Isomae, J. Appl. Phys. 52, 2782 (1981).
31. E. Suhir, J. Appl. Mech. **53**, 657 (1986).
32. A. Atkinson, T. Johnson, A. H. Harker et al., Thin Solid Films **274**, 106 (1996).
33. I. De Wolf, M. Ignat, G. Pozza et al., J. Appl. Phys. **85**, 6477 (1999).

**34**. C.-H. Hsueh, J. Appl. Phys. **88**, 3022 (2000).

**35**. S. P. Wong, H. J. Peng, and S. Zhao, Appl. Phys. Lett. **79**, 1628 (2001).

**36**. S. C. Jain, A. H. Haker, A. Atkinson et al., J. Appl. Phys. **78**, 1630 (1995).

**37**. A. Loubens, R. Fortunier, R. Fillit et al., Microelectr. Engin. **70**, 455 (2003).

**38**. J. Vanhellemont, S. Amelinckx, and C. Claeys, J. Appl. Phys. **61**, 2170 (1987).

**39**. S. Stepanov and R. Forrest, J. Appl. Cryst. **41**, 958 (2008).

**40**. D. R. França and A. Blouin, Meas. Sci. Technol. **15**, 859 (2004).

**41**. Y.-L. Shen, S. Suresh, and I. A. Blech, J. Appl. Phys. **80**, 1388 (1996).

**42**. В. И. Пунегов, А. А. Ломов, ЖЭТФ **154**, 278 (2018).

**43**. В. И. Пунегов, УФН **185**, 449 (2015).