

ПРЯМОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФАЗЫ АМПЛИТУДЫ ОТРАЖЕНИЯ С ПОМОЩЬЮ СТОЯЧИХ РЕНТГЕНОВСКИХ ВОЛН

И.А.Вартаньянц, М.В.Ковальчук, В.Г.Кон,
А.М.Николаенко, И.Ю.Харитонов

Экспериментально реализован метод прямого определения фазы амплитуды отражения с использованием стоячих рентгеновских волн. Метод основан на измерении рентгеновского отражения и фотоэлектронной эмиссии при больших отклонениях от угла Брэгга. Решение фазовой проблемы позволило однозначно определить структуру реальных приповерхностных слоев монокристаллов. Развитый подход иллюстрируется на примере кристалла кремния после ионной имплантации.

Как известно, в любом эксперименте, основанном на рассеянии излучения конденсированным веществом, измеряемой величиной является интенсивность, позволяющая определить лишь модуль амплитуды рассеяния. Однако для получения полной информации о структуре рассеивающего объекта необходимо знать также и ее фазу. Указанная проблема возникает, в частности, при изучении структуры приповерхностных слоев монокристаллов с помощью дифракционного рассеяния рентгеновских лучей. В этом случае из угловой зависимости амплитуды и фазы отраженной волны можно прямо получить профиль изменения структуры приповерхностного слоя по глубине с помощью преобразования Фурье. Вместе с тем стандартный рентгенодифракционный эксперимент не позволяет определить фазу амплитуды рассеяния.

Для этой цели в рентгеноструктурном анализе широко используются косвенные методы, основанные, например, на вероятностных оценках фазовых инвариантов из анализа экспериментальных распределений модулей структурных амплитуд для большого числа рефлексов¹. Наряду с этим, в последнее время интенсивно разрабатываются прямые методы определения фазы с использованием многоволновой дифракции²⁻⁴, стоячих рентгеновских волн^{5,6} и др., эффективность которых возрастает благодаря успехам рентгеновской оптики и использованию синхротронного излучения.

В настоящей работе впервые демонстрируется возможность прямого определения профиля изменения структуры приповерхностного слоя с использованием стоячих рентгеновских волн, а именно, из одновременного измерения коэффициента отражения рентгеновских лучей и выхода рентгеновских фотоэлектронов с малой глубины во всем угловом диапазоне вблизи брэгговского пика, включающем как его центральную часть, так и "хвосты".

Изменение структуры в кристалле описывается двумя параметрами: средним смещением $u(z)$ атомов из положений, соответствующих идеальному кристаллу, и статическим фактором Дебая–Валлера $f(z) = \exp(-W(z))$. Последний учитывает случайный разброс положений атомов из положения, соответствующего среднему смещению.

Идея метода была высказана в работе⁷ и состоит в следующем. Пусть толщина нарушенного слоя L в исследуемом образце удовлетворяет условию $L \ll L_{ex}$, где L_{ex} — длина экстинкции (это условие всегда можно обеспечить выбором достаточно высокого порядка отражения). В этом случае отражение рентгеновских лучей нарушенным слоем является кинематическим, а амплитуда отражения $R(\Delta\theta)$ для σ -поляризованного излучения определяется следующим выражением

$$R(\Delta\theta) = - \frac{i\pi\chi_h}{\lambda \sin\theta_B} \int_0^\infty dz f(z) \exp(iqz - i\varphi(z)) = |R(\Delta\theta)| \exp(i\Phi_R(\Delta\theta)). \quad (1)$$

Здесь $\varphi(z) = \mathbf{h}u(z)$, $q = (4\pi/\lambda)\cos\theta_B\Delta\theta$, $\chi_h = \chi_{rh} + i\chi_{ih}$ — фурье-компоненты поляризуемости кристалла, \mathbf{h} — вектор обратной решетки, λ — длина волны излучения, θ_B — угол Брэгга. Согласно (1), $R(\Delta\theta)$ вне области полного отражения есть по существу фурье-компонента функции $F(z) =$

$= f(z)/\exp(-i\varphi(z))$. Поэтому для восстановления этой функции, а следовательно и структуры нарушенного слоя, достаточно воспользоваться обратным преобразованием Фурье. При этом, однако, необходимо знать как модуль, так и фазу $R(\Delta\theta)$.

Модуль амплитуды $R(\Delta\theta)$ определяется на хвостах кривой угловой зависимости коэффициента отражения по формуле

$$P_R(\Delta\theta) = K |R(\Delta\theta)|^2. \quad (2)$$

Здесь K есть поляризационный множитель. В двухкристальной схеме измерения он равен $K = (1 + \cos^3 2\theta_B)/(1 + \cos 2\theta_B)$. Для определения фазы воспользуемся кривой угловой зависимости вторичного излучения с малой глубиной выхода L_{yi} ($L_{yi} \ll L$), например, фотоэлектронной эмиссии. При больших отклонениях от угла Брэгга она описывается следующим выражением ⁷

$$I(\Delta\theta) = 1 + P_R(\Delta\theta) + 2K |R(\Delta\theta)| \frac{|\chi_{ih}|}{\chi_{io}} f(0) \cos [\Phi_R(\Delta\theta) + \varphi(0) - \omega], \quad (3)$$

где ω — фаза комплексной величины χ_{ih} . Таким образом, измеряя одновременно кривые отражения $P_R(\Delta\theta)$ (2) и вторичного излучения $I(\Delta\theta)$ (3) мы непосредственно определяем модуль $|R(\Delta\theta)|$ и фазу $\Phi_R(\Delta\theta)$ амплитуды отражения $R(\Delta\theta)$ во всем угловом диапазоне. Значения $f(0)$ и $\varphi(0)$ определяются по центральной части кривых $P_R(\Delta\theta)$ и $I(\Delta\theta)$. Затем обратным преобразованием Фурье находим и саму структуру нарушенного слоя.

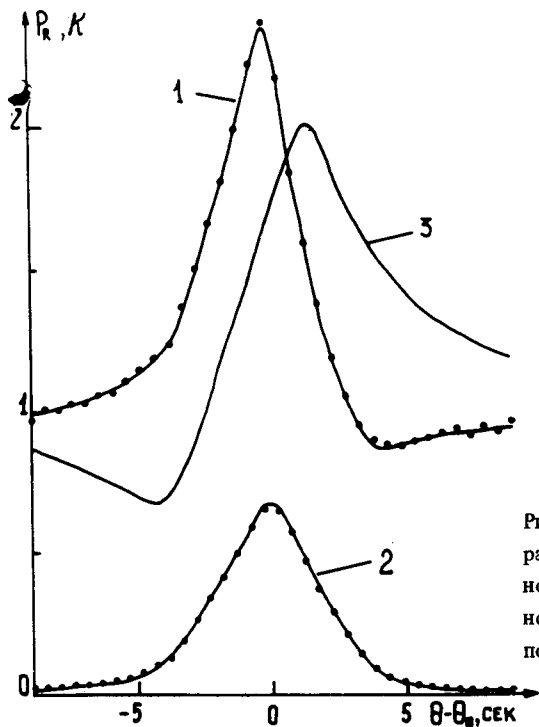


Рис. 1. Кривые фотоэмиссии (1) и рентгеновского отражения (2) от исследуемого образца в области полного отражения. Кривая 3 — фотоэмиссия от идеального кристалла кремния. Сплошные линии — расчет по динамической теории

В данной работе изложенный выше метод иллюстрируется на примере определения профиля искажений приповерхностного слоя в кристаллах кремния, имплантированных ионами B^+ (энергия 100 кэВ, доза 10^{15} см^{-2}) с последующим отжигом ($T = 800^\circ\text{C}$, $t = 10 \text{ мин}$) в окислительной атмосфере. В эксперименте использовалось отражение $(400) \text{ Si } K_\alpha$ -излучения. Были измерены кривые фотоэмиссии и рентгеновского отражения от исследуемых образцов как в области полного отражения (рис. 1), так и при больших отклонениях от угла Брэгга (рис. 2). Фотоэлектронная эмиссия измерялась газовым пропорциональным счетчиком с разрешением

$\approx 15 \div 20\%$ ⁵. При этом регистрировались электроны с энергией в интервале от 5,9 кэВ до 6,4 кэВ, с малой глубиной выхода ($L_{yi} \approx 1000 \text{ \AA}$).

Для решения поставленной задачи на первом этапе была решена проблема измерения слабого полезного сигнала вторичного излучения (он составляет 10 имп/с на "хвостах" кривой фотоэмиссии) путем создания эффективной системы накопления ⁵, позволяющей копить полезный сигнал в течение многих часов. Кроме того, следует отметить, что кривые отражения, полученные в стандартной двухкристальной схеме, содержат сумму когерентного и некогерентного каналов рассеяния s^{-10} и поэтому непригодны для теоретической обработки. Вклад в некогерентную часть интенсивности дает как диффузное рассеяние в исследуемом образце (оно мало в нашем случае), так и тепловое диффузное рассеяние в монохроматоре, которое наиболее существенно на хвостах кривой отражения. Поэтому при измерении хвостов кривой отражения была использована трехкристальная схема, позволяющая выделить когерентную интенсивность, как интенсивность главного пика ⁹⁻¹⁰. Однако при измерении фотоэмиссии нами использовалась двухкристальная схема, поскольку некогерентный вклад, связанный с монохроматором, здесь пренебрежимо мал.

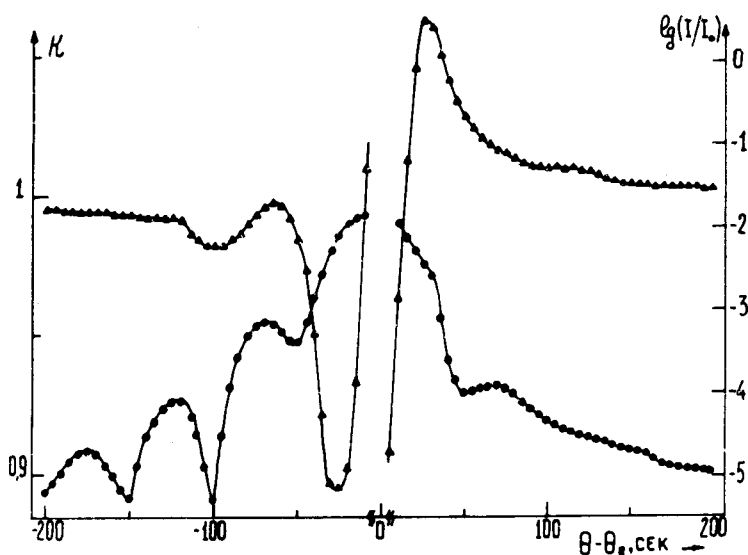


Рис. 2. Кривые фотоэмиссии (Δ) и рентгеновского отражения (○) от исследуемого образца при больших отклонениях от угла Брэгга. Кривая рентгеновского отражения получена методом трехкристальной рентгеновской дифрактометрии

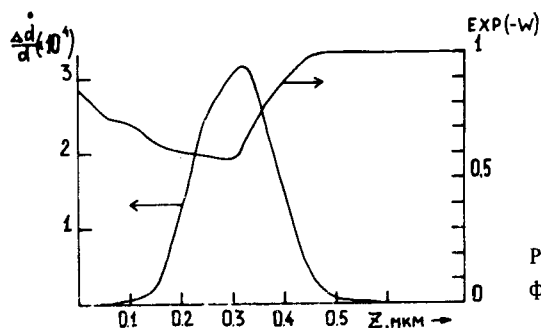


Рис. 3. Профили деформации $\Delta d/d(z)$ и статического фактора Дебая-Валлера $f(z) = \exp(-W)$

На рис. 2 показаны хвосты экспериментальных кривых фотоэмиссии и рентгеновского отражения. Кривая фотоэмиссии в центральной части (рис. 1) похожа на обращенную кривую от идеального кристалла. Она совпадает с теоретической кривой при $\varphi(0) = 2,3$, а $f(0) = 0,9$. На рис. 3 приведены профили деформации $\Delta d(z)/d = \Delta u/\Delta z$ и фактора Дебая-Валлера $f(z)$, полученные по описанной выше методике. Как видно из рисунка, деформации в нарушенном

слое положительны, а их максимум приходится на глубину $L \approx 0,3$ мкм, что коррелирует как с глубиной пробега ионов B^+ в кремнии ($\approx 0,3$ мкм), так и с теорией дефектообразования в исследуемых кристаллах¹¹. Отметим, что хотя расчеты проводились в пределе $L_{yi} = \approx 0$, учет реальной глубины выхода, как показывает анализ, не меняет полученных результатов, а ошибка составляет не более 10–15%.

Таким образом, одновременное измерение хвостов кривых выхода фотоэлектронов и рентгеновского отражения позволяет непосредственно решить фазовую проблему в исследовании нарушенных приповерхностных слоев монокристаллов, т.е. полностью определить комплексную амплитуду отражения, а затем получить и сам профиль искажений.

В заключение авторы приносят благодарность С.Ю.Ширяеву и А.Ю.Казимирову за помощь при проведении работы.

Литература

1. Вайнштейн Б.К. Современная кристаллография. М.: Наука, 1, 1979.
2. Чжан Ш. Многоволновая дифракция рентгеновских лучей в кристаллах. М.: Мир, 1987.
3. Ковьев Э.К., Симонов В.И. Письма в ЖЭТФ, 1986, 40, 244.
4. Kohn V.G. Phys. Stat. Sol. (a), 1988, 106, 31.
5. Ковальчук М.В., Кон В.Г. УФН, 1986, 149, 69.
6. Bedzyk M.J., Materlik G. Phys. Rev. B, 1985, 32, 6456.
7. Афанасьев А.М., Кон В.Г. ЖЭТФ, 1978, 74, 300.
8. Казимиров А.Ю. и др. Кристаллография, 1987, 32, 360.
9. Cembali F. et al. Phys. Stat. Sol. (a), 1986, 98, 511.
10. Казимиров А.Ю. и др. Металлофизика, 1987, 9, 54.
11. Руссел Х., Руге И. Ионная имплантация. М.: Наука, 1983.

*
Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
15 мая 1989 г.