

## Наблюдение эффекта упругой квазимозаичности в изогнутых монокристаллах кремния

Ю. М. Иванов<sup>1)</sup>, А. А. Петрунин, В. В. Скоробогатов

Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова РАН, 188300 Гатчина, Ленинградская обл., Россия

Поступила в редакцию 6 декабря 2004 г.

Наблюден значительный упругоквазимозаичный эффект при дифракции рентгеновского излучения на изогнутой пластинке из монокристаллического кремния. Показано, что эффект зависит от выбора отражающих кристаллографических плоскостей и ориентации выреза пластинки. Возможно применение эффекта для улучшения характеристик кристаллов-монокроматоров электромагнитного излучения и кристаллов-дефлекторов пучков заряженных частиц, выполненных из монокристаллического кремния.

PACS: 07.85.-m, 61.10.-i, 61.85.+p

В кристалл-дифракционной гамма-спектрометрии известен эффект упругой квазимозаичности кварца, возникающий при изгибе по цилиндру кварцевых пластинок, используемых для дифракции излучения в фокусирующих спектрометрах. Он проявляется в уширении дифракционных профилей гамма-линий и изменяет линейную зависимость интегрального коэффициента отражения от энергии квантов на квадратичную. Эффект обусловлен анизотропными свойствами кварца, приводящими к изгибу дифрагирующих излучение атомных плоскостей, совпадающих с нормальными поперечными сечениями неизогнутой пластины. Величина изгиба зависит от выреза пластины относительно кристаллографических осей и может достигать десятков угловых секунд для определенных кристаллографических плоскостей, на порядки превосходя естественную мозаичность кварца. Вышеприведенное объяснение эффекта было дано в работах Сумбаева [1–3] и использовано им и его сотрудниками для увеличения светосилы и повышения разрешения фокусирующих кристалл-дифракционных спектрометров.

В настоящее время все более распространенным материалом для изготовления дифракционных пластин становится монокристаллический кремний, однако его упругая квазимозаичность практически не изучена. Это послужило одной из причин к проведению данной работы. Другая причина связана с поиском новых способов изгиба атомных плоскостей монокристаллического кремния для каналирования протонов высоких и сверхвысоких энергий короткими кристаллами [4, 5].

Предсказание заметного упругоквазимозаичного эффекта в кремнии для кристаллографической плоскости (022), а также анализ некоторых схем изгиба применительно к кристалл-дифракционным спектрометрам содержится в работе [6], использующей методику расчета деформированного состояния изогнутой анизотропной кристаллической пластины [7].

В соответствии с рекомендованным в [6] углом выреза нами была изготовлена кремниевая пластинка с кристаллографической плоскостью (022), нормальной большим граням, и исследована на рентгеновском дифрактометре. Результатом исследования стало заключение об отсутствии у пластинки упругоквазимозаичного эффекта.

Для разрешения возникшего противоречия нами были предприняты новые расчеты упругоквазимозаичного эффекта по методике [7], которые показали, что зависящим от угла выреза упругоквазимозаичным эффектом должна обладать кремниевая пластинка с плоскостью (111), нормальной большим граням, для пластины же с плоскостью (022) расчетный упругоквазимозаичный эффект равен нулю.

На рис.1 показаны изогнутая по цилиндру с радиусом  $\rho$  пластина рассматриваемой ориентации и вызванное изгибом пластины изменение формы кристаллографических плоскостей (111). В расчетной модели это изменение обусловлено коэффициентом  $k_9$ , входящим в выражение для  $x$ -проекции смещения  $\Delta r$  произвольной точки пластины  $(x_0, y_0, z_0)$  в системе координат пластины, которое записывается в виде

$$\Delta r_x = -k_5 z_0^2 + k_{10} x_0^2 + 2k_{11} x_0 y_0 + k_9 y_0^2.$$

Приближенно сечения, нормальные большим граням пластины, после изгиба принимают форму параболи-

<sup>1)</sup>e-mail: yumi@pnpi.spb.ru

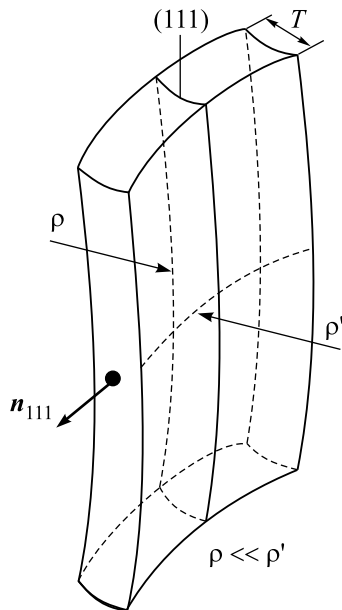


Рис.1. Искривление кристаллографических плоскостей (111) при изгибе пластины из монокристаллического кремния по цилиндру с радиусом  $\rho$ . Радиус  $\rho'$  характеризует изгиб в плоскости, перпендикулярной плоскости основного изгиба

ческих цилиндров с проекцией на плоскость  $xy$ , определяемой выражением

$$x = k_9 y^2.$$

Величина коэффициента  $k_9$  для произвольной кристаллографической плоскости ( $hkl$ ) определяется упругими постоянными кристалла, углом выреза пластины в плоскости ( $hkl$ ), радиусом изгиба и способом изгиба, задающим граничные условия задачи. Для плоскости (111) и изгиба пластины методом моментов расчетная зависимость коэффициента  $k_9$  от угла выреза  $\varphi$  приведена на рис.2. Из графика видно, что коэффициент  $k_9$  равен нулю при углах выреза, равных  $-90^\circ$ ,  $-30^\circ$ ,  $30^\circ$ ,  $90^\circ$ , и принимает экстремальное значение  $0.00141 \text{ см}^{-1}$  при углах, равных  $-60^\circ$ ,  $0^\circ$ ,  $60^\circ$ . Радиус изгиба пластины при расчете был принят равным 1 м. Пересчет для других радиусов изгиба пластины выполняется делением значения коэффициента  $k_9$  из графика на новый радиус в метрах.

Ориентация осей координат пластины  $xyz$ , отвечающая углу выреза  $\varphi = 0^\circ$ , относительно кристаллографических осей кремния  $x_c y_c z_c$  для слитка, вращенного вдоль оси [111], показана на рис.3. Оси системы  $xyz$  параллельны ребрам пластины, при этом координатная плоскость  $xz$  параллельна большим граням пластины, а координатная плоскость  $yz$  – кристаллографическим плоскостям (111). Угол  $\varphi$

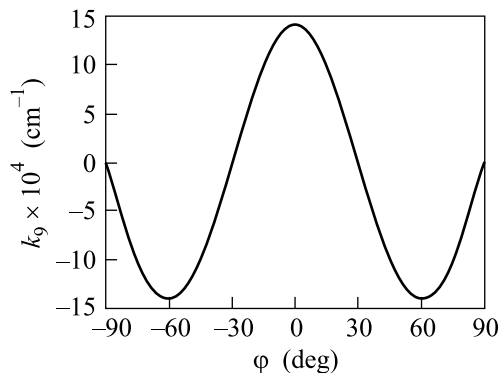


Рис.2. Зависимость величины коэффициента  $k_9$  от угла  $\varphi$ , характеризующего возможный поворот выреза пластины вокруг нормали плоскости (111)

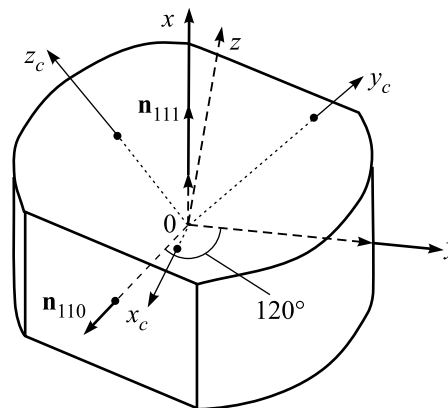


Рис.3. Ориентация осей координат пластины  $xyz$ , отвечающая углу выреза  $\varphi = 0^\circ$ , относительно кристаллографических осей кремния  $x_c y_c z_c$  для слитка, вращенного вдоль оси [111]

характеризует возможный поворот пластины вокруг нормали плоскости (111) и отсчитывается от оси  $y$ .

Расчетное значение упругой квазимозаики определяется величиной изгиба кристаллографических плоскостей (111), который для малых деформаций вычисляется как разность значений на границах кристалла производной от функции, описывающей форму изгиба, и выражается формулой

$$\Delta\theta = 2k_9 T,$$

где  $\Delta\theta$  – изгиб плоскостей,  $T$  – толщина пластинки. Видно, что упругая квазимозаика повторяет зависимость коэффициента  $k_9$  от угла выреза  $\varphi$ .

На основе новых расчетов из монокристаллического кремния была вырезана пластинка, отвечающая максимальному значению коэффициента  $k_9$ . Пластинка имела размеры  $60 \times 20 \times 0.43$  мм и ориентацию относительно кристаллографических осей, показанную на рис.3 (плоскость (111) параллельна гра-

ни  $60 \times 0.43$  мм). Экспериментальное обнаружение упругоквазимозаичного эффекта было выполнено на рентгеновском двухкристальном дифрактометре [8] путем измерения кривых качания до и после изгиба пластинки по цилиндру.

Схема измерений показана на рис.4. В качестве первого кристалла служил испытуемый Si образец в положении на прохождение, в качестве второго –

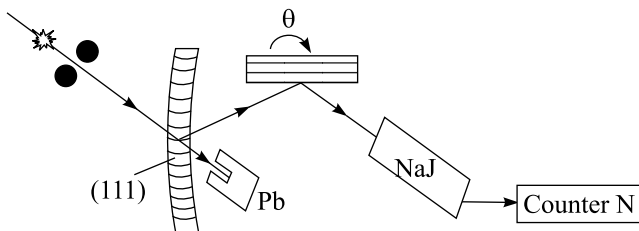


Рис.4. Схема измерения кривой качания на двухкристальном дифрактометре

эталонный Si кристалл в положении на отражение. В обоих кристаллах дифрагирующими плоскостями служили кристаллографические плоскости (111). В качестве источника излучения использовалась рентгеновская трубка с молибденовым анодом. Падающий на исследуемый образец пучок формировался с помощью двухщелевого коллиматора, выходная щель которого имела ширину 0.1 мм и высоту 5.0 мм, угловая расходимость пучка равнялась  $1'$ , что существенно меньше расщепления компонент тонкой структуры. Брегговский угол дифракции на линии  $\text{MoK}_{\alpha_1}$  в первом порядке отражения составлял  $6.5^\circ$ , естественная ширина линии  $\text{MoK}_{\alpha_1}$  равнялась  $9.2''$ , точность определения углового положения кристаллов была не хуже  $0.5''$ .

Результаты измерений показаны на рис.5, где представлены обе кривые качания. Ширина кривой качания неизогнутой пластинки равна  $6''$  и близка к ширине свертки дифракционных кривых двух идеальных кристаллов. После изгиба до радиуса  $\rho = 92$  см ширина кривой качания возросла в 4 раза и достигла  $24''$ , или 120 мкрад. Наблюдаемое уширение кривой качания согласуется с расчетным значением упругой квазимозаики, равным  $26''$ , и свидетельствует о значительном упругоквазимозаичном эффекте в изогнутой пластинке. Увеличение ширины сопровождалось также значительным ростом интенсивности в максимуме кривой качания, что послужило темой специального исследования, которое будет опубликовано в отдельной статье.

Следует заметить, что форма изогнутой пластинки отличалась от цилиндрической и была близка к седлообразной с радиусом  $\rho' = 410$  см в плоскости,

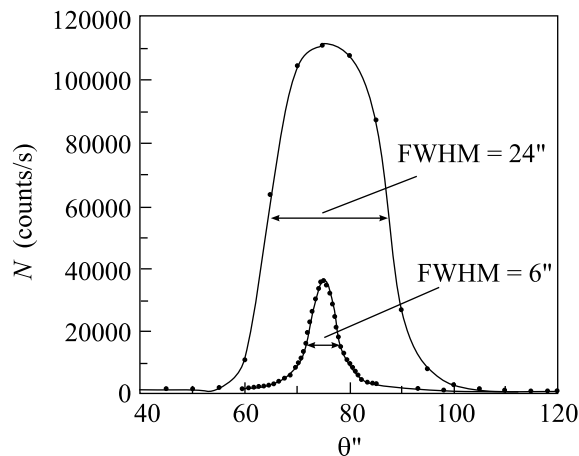


Рис.5. Кривые качания пластины, вырезанной под углом  $\varphi = 0^\circ$  до ( $6''$ ) и после ( $24''$ ) изгиба

перпендикулярной плоскости основного изгиба (см. рис.1). Отклонение от цилиндрической формы является общим свойством пластинок при изгибе методом моментов, причем величина радиуса  $\rho'$  и знак кривизны зависят от симметрии кристалла, выбранной кристаллографической плоскости и угла выреза пластины. Нецилиндричность приводит к уширению кривой качания, однако это уширение в вышеописанном измерении было существенно меньше величины упругоквазимозаичного эффекта.

Для проведения контрольного опыта из того же слитка была изготовлена пластинка, идентичная исследованной, за исключением угла выреза, который был выбран равным  $\varphi = -30^\circ$  и отвечал расчетному значению  $k_9 = 0$ . В неизогнутом состоянии кривая качания пластинки с  $\varphi = -30^\circ$  практически совпала с аналогичной кривой от пластинки с  $\varphi = 0^\circ$ . Но свойства контрольной пластинки после изгиба до радиуса  $\rho = 75$  см были совершенно иные: кривая качания лишь немного уширилась с одновременным понижением интенсивности в максимуме. Полученный результат вполне объясняется отклонением формы изогнутой контрольной пластинки от цилиндрической при полном отсутствии упругого квазимозаичного эффекта.

Выполненное экспериментальное исследование обнаружило значительный упругоквазимозаичный эффект в кремнии и показало, что небольшим изменением ориентации выреза монокристаллических кремниевых пластинок можно существенно варьировать их деформационное состояние при изгибе. Мы полагаем, что использование данного эффекта способно улучшить характеристики кристалломонокроматоров электромагнитного излучения и

кристаллов-дефлекторов пучков заряженных частиц, выполненных из монокристаллического кремния.

Авторы выражают признательность С. А. Вавилову и М. А. Кознову за помощь в изготовлении кристаллов и Л. П. Лапиной за помощь в подготовке публикации.

Работа выполнена при поддержке грантов Российского фонда фундаментальных исследований # 01-02-018005 и # 01-02-17992.

---

1. О. И. Сумбаев, *ЖЭТФ* **32**, 1276 (1957).

2. О. И. Сумбаев, *Кристалл-дифракционные гамма-спектрометры*, М.: Госатомиздат, 1963.
3. О. И. Сумбаев, *ЖЭТФ* **54**, 1352 (1968).
4. A. G. Afonin, V. T. Vaganov, V. M. Biryukov et al., *Phys. Rev. Lett.* **87**, 094802 (2001).
5. А. Г. Афонин, В. Т. Баранов, В. М. Бирюков и др., *Письма в ЖЭТФ* **74**, 57 (2001).
6. В. М. Самсонов, Е. Г. Лапин, *Препринт ЛИЯФ №587*, Ленинград, 1980.
7. В. М. Самсонов, *Препринт ЛИЯФ №278*, Ленинград, 1976.
8. С. Г. Скорняков, А. И. Смирнов, Г. П. Солодов, *Препринт ЛИЯФ №1133*, Ленинград, 1985.