

УДК 539.26,548.73

ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В УСЛОВИЯХ ПОЛНОГО ВНЕШНЕГО ОТРАЖЕНИЯ НА ПОВЕРХНОСТНОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ПЛЕНКЕ

Александров П. А., Афанасьев А. М., Степанов С. А.

В последние годы в ряде работ [1—6] быстро развивается новый метод изучения очень тонких поверхностных слоев монокристаллов с помощью дифракции рентгеновских лучей.

Рентгенодифракционная схема этого метода, впервые предложенная в работе [1], сочетает условия симметричной дифракции в геометрии Лауэ со скольльзящим падением входного пучка (рис. 1), что обуславливает интенсивное зеркальное отражение как падающей, так и дифрагированной волн и дает в принципе возможность исследования кристаллической структуры поверхностных слоев толщиной от нескольких десятков ангстрем и выше.

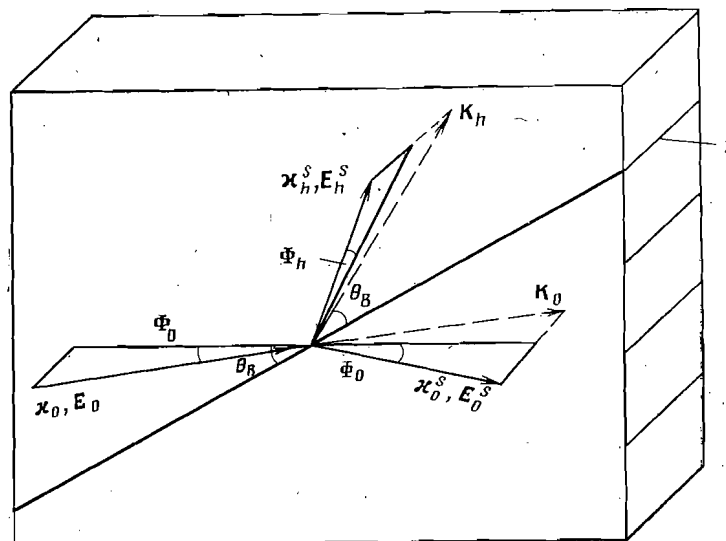


Рис. 1. Оптическая схема дифракции рентгеновских лучей в условиях полного внешнего отражения: 1 — отражающие плоскости, k_0^s — падающая волна, k_0^s — зеркально отраженная волна, k_h^s — дифрагированная зеркально отраженная волна

В работе [2] построена динамическая теория дифракции в условиях полного внешнего отражения для совершенных кристаллов. При этом показано, что величина угла выхода Φ_h зеркально отраженной дифрагированной волны сильно зависит от того, насколько точно выполнено условие Брэгга. Малым угловым отклонениям от брэгговского условия соответствуют на 2—3 порядка большие изменения угла выхода. Например, угловое отклонение падающего пучка от точного условия Брэгга на величину $\sim 0,1''$ вызывает изменение угла Φ_h на величину $\sim 30''$.

Указанное обстоятельство позволило разработать [3, 4] относительно простую схему экспериментальных измерений, в которой падающий пучок коллимируется только в одной плоскости — по углу падения, а дифракционные волны с различными отклонениями от угла Брэгга разделяются по значению угла выхода из образца.

Наличие относительно простой экспериментальной схемы измерений стимулирует быстрое развитие теории в непосредственной связи с экспериментом, что позволяет предположить широкое применение этого метода в практических исследованиях.

В работе [5] теоретически исследована структура волновых полей в кристалле при дифракции в условиях полного внешнего отражения, определены угловые области, в которых дифракционные кривые наиболее чувствительны к изменениям в тонких слоях. В работе [6] решена задача дифракции в условиях полного внешнего отражения на кристалле с поверхностной аморфной пленкой, показана аномально высокая для рентгеновских методов чувствительность дифракционных кривых к очень тонким поверхностным аморфным пленкам толщиной $\sim 10 \text{ \AA}$.

В настоящей работе решена задача дифракции в условиях полного внешнего отражения на плоскопараллельной кристаллической пленке, лежащей на толстой аморфной подложке. Полученные результаты расширяют теорию метода на системы такого рода и позволяют в принципе исследовать с его помощью, например, начальные стадии роста кристаллов на аморфных подложках. Указанное решение в совокупности с решением задачи о дифракции на аморфной подложке [6] описывает дифракцию на бикристалле с большой разницей параметров решетки.

Общее выражение для интенсивности отражений дифрагированной волны. Рассмотрим кристаллическую пленку толщиной t , лежащую на аморфной подложке. Пусть на пленку падают рентгеновские лучи в геометрии, изображенной на рис. 1. Рентгеновское поле перед входной поверхностью состоит из трех волн:

$$E(\mathbf{r}) = E_0 \exp(i\kappa_0 \rho + i\kappa_0 \Phi_0 z) + E_0^s \exp(i\kappa_0 \rho - i\kappa_0 \Phi_0 z) + E_h^s \exp(i\kappa_h \rho - i\kappa_0 \Phi_h z). \quad (1)$$

Здесь ρ — координата вдоль поверхности кристалла; остальные обозначения здесь и в дальнейшем взяты из работы [2].

Угол выхода зеркально отраженной дифрагированной волны зависит от того, насколько точно выполнено условие Брэгга. А именно, имеет место соотношение [2]

$$\Phi_h^2 = \Phi_0^2 - \alpha, \quad (2)$$

где α — стандартный параметр отклонения от угла Брэгга.

Внутри кристаллической пленки поле состоит из совокупности четырех падающих и четырех дифрагированных волн:

$$D(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^4 D_0^{(j)} \exp(i\kappa_0 \rho + i\kappa_0 u^{(j)} z) + D_h^{(j)} \exp(i\kappa_h \rho + i\kappa_0 u^{(j)} z). \quad (3)$$

Величины $u^{(j)}$, а также соотношения между амплитудами $D_0^{(j)}$ и $D_h^{(j)}$ находятся из решения фундаментальной системы динамических уравнений, которая приведена для σ -поляризованных волн в работе [2].

Мы также ограничимся рассмотрением σ -поляризации и воспользуемся соотношениями, полученными в работе [2]. Тогда для амплитуд $D_0^{(j)}$ и $D_h^{(j)}$ имеем следующую связь:

$$D_h^{(j)} = V^{(j)} D_0^{(j)}, \quad j=1, 2, 3, 4. \quad (4)$$

а величины $u^{(j)}$ определяются формулами

$$u^{(j)} = \pm (\Phi_0^2 + \chi_0 + V^{(1,2)} \chi_h)^{1/2}, \quad (5)$$

$$V^{(1,2)} = \left[-\frac{\alpha}{2} \pm \left(\frac{\alpha^2}{4} + \chi_h \chi_h \right) \right]^{1/2} / \chi_h. \quad (6)$$

В отличие от работы [2], где приняты во внимание только те решения $u^{(1)}$ и $u^{(2)}$ дисперсионного уравнения, которые соответствуют затуханию волн в глубь кристалла ($\text{Im } u^{(1,2)} > 0$ — приближение бесконечно толстого кристалла) здесь следует учесть все решения, т. е. принять во внимание также корни $u^{(3)} = -u^{(1)}$ и $u^{(4)} = -u^{(2)}$.

Поле внутри аморфной подложки, которую мы считаем бесконечно толстой, состоит из двух преломленных волн соответственно в направлении падающего и дифрагированного пучков:

$$\mathbf{E}^{\text{ам}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_0 \exp(i\kappa_0 \rho + i\chi_0 y_0^{\text{ам}} z) + \varepsilon_h \exp(i\kappa_h \rho + i\chi_0 y_h^{\text{ам}} z), \quad (7)$$

где

$$y_{0,h}^{\text{ам}} = (\Phi_{0,h}^2 + \chi_0^{\text{ам}})^{1/2}, \quad (8)$$

$\chi_0^{\text{ам}}$ — фурье-компонента поляризуемости подложки.

Для определения интересующих нас амплитуд E_0^S и E_h^S следует использовать условия непрерывности полей и их производных на границе вакуум — кристаллическая пленка и на границе пленка — подложка. В результате имеем четыре уравнения на границе вакуум — кристалл:

$$\begin{aligned} E_0 + E_0^S &= \sum_{j=1}^4 D_0^{(j)}, & E_h^S &= \sum_{j=1}^4 D_h^{(j)}, \\ \Phi_0(E_0 - E_0^S) &= \sum_{j=1}^4 u^{(j)} D_0^{(j)}, & -\Phi_h E_h^S &= \sum_{j=1}^4 u^{(j)} D_h^{(j)}. \end{aligned} \quad (9)$$

и четыре уравнения на границе кристалл — аморфная подложка:

$$\sum_{j=1}^4 \exp(id^{(j)}) D_{0,h}^{(j)} = \varepsilon_{0,h}; \quad \sum_{j=1}^4 u^{(j)} \exp(id^{(j)}) D_{0,h}^{(j)} = y_{0,h}^{\text{ам}} \varepsilon_{0,h}. \quad (10)$$

Здесь $d^{(j)} = \kappa_0 t u^{(j)}$. Вместе с четырьмя уравнениями (4) в совокупности имеем 12 уравнений для двенадцати неизвестных амплитуд E_0^S , E_h^S , $D_0^{(1)}$, $D_0^{(2)}$, $D_0^{(3)}$, $D_0^{(4)}$, $D_h^{(1)}$, $D_h^{(2)}$, $D_h^{(3)}$, $D_h^{(4)}$, ε_0 , ε_h .

Так как система линейная, то ее решение, хотя и является громоздким, не составляет особого труда. Рассмотрим только амплитуду дифрагированной волны E_h^S . Опуская промежуточные выкладки, приведем сразу окончательное выражение:

$$E_h^S = -\frac{2\Phi_0 E_0 [(b_{hh}^{(1)} - b_{hh}^{(2)}) N_{00} + (V^{(2)} b_{0h}^{(1)} - V^{(1)} b_{0h}^{(2)}) N_{h0}]}{(\Phi_0 - \Phi_h) (N_{00} N_{hh} - N_{h0} N_{0h})}. \quad (11)$$

Здесь

$$b_{hl}^{(j)} = (y_h^{\text{ам}} + \Phi_l) \text{ch}(id^{(j)}) - \left(u^{(j)} + \frac{y_h^{\text{ам}} \Phi_l}{u^{(j)}} \right) \text{sh}(id^{(j)}), \quad (12)$$

$$N_{hl} = (V^{(1)})^{h+l-1} b_{hl}^{(1)} - (V^{(2)})^{h+l-1} b_{hl}^{(2)}; \quad k, l = 0, h; \quad j = 1, 2. \quad (13)$$

Остальные параметры определены выше.

Нетрудно видеть, что при $\Phi_0 \rightarrow \Phi_h$ числитель выражения (11) линейно обращается в нуль, и поэтому выражение (11) не имеет особенности в точке $\Phi_0 = \Phi_h$. При малой толщине кристаллической пленки t , т. е.

когда

$$|d^{(j)}| \ll 1,$$

выражение (11) переходит в следующее равенство для амплитуды отраженной дифрагированной волны:

$$E_h^s = \frac{2\chi_h \Phi_0 \chi_0 E_0}{(\Phi_0 + y_0^{\text{ам}})(\Phi_h + y_h^{\text{ам}})} t,$$

которое обращается в нуль линейно по t .

При большой толщине кристаллической пленки

$$t \gg \frac{\lambda}{2\pi \operatorname{Im} u^{(j)}}, \quad j=1, 2,$$

величины $b_{kl}^{(j)}$ приобретают вид

$$b_{kl}^{(j)} = 1/2 \exp(id^{(j)}) (\Phi_h + u^{(j)}) (y_l^{\text{ам}} + u^{(j)}) / u^{(j)}$$

и выражение (11) переходит в формулу для амплитуды отраженной дифрагированной волны, полученную в работе [2] для случая дифракции на бесконечно толстом кристалле:

$$E_h^s = - \frac{2\Phi_0 E_0 (u^{(2)} - u^{(1)})}{V^{(2)} (\Phi_0 + u^{(1)}) (\Phi_h + u^{(2)}) - V^{(1)} (\Phi_0 + u^{(2)}) (\Phi_h + u^{(1)})}.$$

Интенсивность отраженной дифрагированной волны находится по общему правилу [2, 6]

$$P_h^s = \left| \frac{E_h^s}{E_0} \right|^2 \frac{\Phi_h}{\Phi_0}. \quad (14)$$

Полученные формулы полностью решают поставленную задачу.

Эффект кристаллической пленки. Обсудим результаты теории применительно к схеме измерений [4], в которой интенсивность отраженной дифрагированной волны регистрируется как функция угла выхода Φ_h при различных фиксированных значениях угла падения.

В предыдущих работах [2–6] теоретически проанализированы дифракционные кривые соответственно от бесконечно толстого кристалла с поверхностной аморфной пленкой. Приведем основные результаты этих работ.

При дифракции на бесконечно толстом совершенном кристалле внутри кристалла возбуждаются два волновых поля с различной глубиной проникновения. Этим полям соответствуют различные критические углы полного внешнего отражения. Первому полю, имеющему большую глубину проникновения и малую амплитуду взаимодействия с веществом кристалла, соответствует малый критический угол полного внешнего отражения $\Phi_1 = (|\chi_0 - \chi_h|)^{1/2}$, а второму полю, наоборот, — большой критический угол $\Phi_2 = (|\chi_0 + \chi_h|)^{1/2}$.

Интенсивность зеркально отраженной дифрагированной волны от совершенного кристалла имеет существенную величину при значениях угла падения Φ_0 и угла выхода Φ_h , не превышающих величину Φ_2 . При больших значениях хотя бы одного из углов Φ_0 или Φ_h интенсивность зеркально отраженной дифрагированной волны становится малой и быстро падает с ростом угла. Интенсивность отраженной дифрагированной волны достигает своего абсолютного максимума при угле падения, равном критическому углу Φ_1 . Величина этого максимума (его угловое положение $\Phi_0 = \Phi_h = \Phi_1$) близка к единице; например, для кремния отражения (220) CuK_α -излучения она составляет 0,67.

В дифракционных спектрах кристаллов с аморфной пленкой наличие пленки приводит к дополнительному зеркальному отражению в ней как падающей, так и дифрагированной волн, образующихся в кристалле. Это отражение вызывает уменьшение интенсивности отраженной дифраги-

ванной волны по мере увеличения толщины пленки. Наиболее сильное зеркальное отражение падающей волны в пленке происходит при значениях угла падения, меньших величины критического угла полного внешнего отражения вещества пленки $\Phi_c = (|\chi_0^{пл}|)^{1/2}$, поэтому для исследования тонких пленок лучше выбирать малые углы падения $\Phi_0 < \Phi_c$, а для исследования толстых пленок — наоборот. Наиболее сильное зеркальное отражение дифрагированной волны в пленке происходит при значениях угла выхода $\Phi_h < \Phi_c$. Этот эффект изменяет форму дифракционных кривых, а именно, вызывает относительное подавление интенсивности со стороны малых углов выхода $\Phi_h < \Phi_c$ и соответственно обуславливает смещение максимума интенсивности в сторону больших углов. В результате наличие пленки можно регистрировать также по изменению формы кривых.

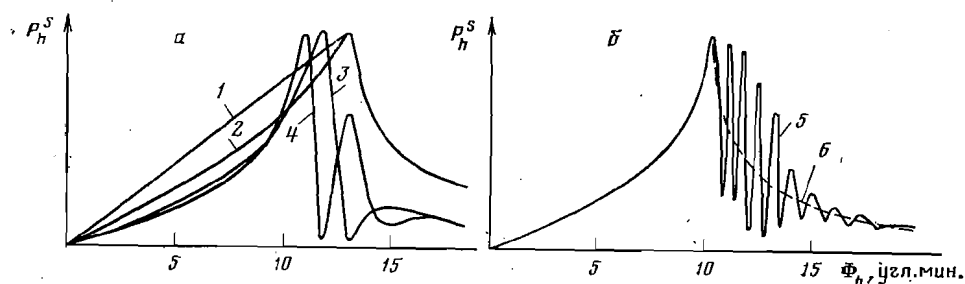


Рис. 2. Изменение формы дифракционных кривых с ростом толщины кристаллической пленки. Расчеты выполнены для кремния (220)-отражения CuK_α -излучения, угла падения $\Phi_0 = 4'$. Толщина пленок (Å): 1 — 10, 2 — 100, 3 — 300, 4 — 500, 5 — 2000, 6 — дифракционная кривая для бесконечно толстого кристалла. Все дифракционные кривые приведены в относительных масштабах по интенсивности; соответствующие абсолютные значения максимумов интенсивности P_h^s (max): 1 — 0,01, 2 — 0,23, 3 — 0,44, 4 — 0,47, 5 — 0,37, 6 — 0,37

Дифракция на кристаллических пленках дает новый тип дифракционных спектров по сравнению с теми, которые наблюдались раньше [2, 6]. В противоположность эффекту аморфной пленки в данном случае интенсивность зеркально отраженной дифрагированной волны увеличивается по мере того, как толщина пленки сравнивается с глубиной формирования дифрагированной волны в кристалле, и при дальнейшем увеличении толщины пленки дифракционные кривые приобретают вид соответствующих кривых для бесконечно толстого кристалла. Увеличение интенсивности дифракционных кривых с ростом толщины кристаллической пленки происходит неравномерно для различных углов выхода. При малых углах выхода глубина формирования дифрагированной волны в кристалле всегда меньше [5], поэтому для формы дифракционных кривых от тонких пленок характерен «завал» интенсивности в области больших углов выхода и относительно большой вклад в области малых углов по сравнению с формой соответствующих кривых от толстого кристалла. В результате имеется возможность определять толщину тонких кристаллических пленок по форме дифракционных кривых. Например, на рис. 2 показано изменение формы дифракционных кривых с увеличением толщины кристаллической кремниевой пленки от 10 до 2000 Å. Расчеты выполнены для CuK_α -излучения, (220)-отражения, угла падения $\Phi_0 = 4'$; подложка — аморфный кремний. Хорошо заметно, что на кривой, соответствующей пленке 10 Å, имеется относительный подъем интенсивности со стороны малых углов выхода $\Phi_h < 12'$, который постепенно понижается при увеличении толщины пленки до 100 Å. Это позволяет различать пленки толщиной 10–100 Å. При дальнейшем увеличении толщины пленки на кривых появляются осцилляции, по расстоянию между которыми можно опреде-

лить толщину пленки. Цифры, приведенные в подписи к рисунку и указывающие абсолютное значение максимума коэффициента отражения P_h^s для соответствующей кривой, указывают на то, что интенсивность кривых также меняется, особенно в диапазоне 10–100 Å. Сопоставление кривой для пленки 2000 Å с кривой для бесконечно толстого кристалла (рис. 2, б) показывает совпадение кривых в области малых углов выхода, где глубина формирования дифракционной волны невелика.

Рассмотрим более подробно механизм формирования дифракционных кривых от кристаллических пленок.

Различие вкладов двух волновых полей. Введем в рассмотрение следующий параметр:

$$l_j = \frac{\lambda}{2\pi \operatorname{Im} u^{(j)}}, \quad j=1, 2. \quad (15)$$

Величины l_j определяют экспоненциальную глубину проникновения в кристалл соответственно первого и второго волновых полей. На этих глубинах формируются вклады указанных полей в зеркально отраженную дифрагированную волну.

Как показано выше, при толщине пленки

$$t \gg \max\{l_1, l_2\} \quad (16)$$

выражение для интенсивности зеркально отраженной дифрагированной волны от пленки переходит в соответствующее выражение для интенсивности отражения от толстого кристалла. Очевидно, что эффект пленки в основном проявляется через соотношение ее толщины с этими двумя параметрами.

В работе [5] показано, что величины l_1 и l_2 значительно различаются между собой и их зависимости от углов Φ_0 и Φ_h также различны. При малых значениях углов Φ_0 и Φ_h оба поля испытывают полное внешнее отражение, и величины l_1 и l_2 малы, хотя различаются между собой. Глубина проникновения первого поля несколько больше, а второго — несколько меньше глубины проникновения l_0 рентгеновской волны в кристалл в том случае, когда дифракция не возбуждается. Например, для кремния (220)-отражения $\text{Cu } K_\alpha$ -излучения эти значения составляют $l_1 \sim 100$ Å, $l_0 \sim 60$ Å и $l_2 \sim 50$ Å, и соответственно дифракционные отражения от кристаллических пленок толщиной $t \geq 100$ Å близки к отражениям от толстого кристалла.

Рассматривая большие углы Φ_0 и Φ_h , мы доходим до угловой границы полного внешнего отражения сначала для поля I, а затем для поля II. При переходе через угловую границу полного внешнего отражения глубина проникновения поля резко возрастает, а его вклад в зеркально отраженную дифрагированную волну — падает.

Угловые границы области полного внешнего отражения полей, согласно выражению (6), определяются из условий

$$\frac{\Phi_0^2 + \Phi_h^2}{2} \pm \left[\left(\frac{\Phi_0^2 - \Phi_h^2}{2} \right)^2 + |\chi_h|^2 \right]^{1/2} - |\chi_0| = 0, \quad (17)$$

где знак «+» относится к первому полю, а «-» — ко второму. На рис. 3 показаны линии границ полного внешнего отражения для полей I и II в координатах $\Phi_0 - \Phi_h$, рассчитанные по формулам (17) для кремния (220)-отражения $\text{Cu } K_\alpha$ -излучения. Области левее и ниже границы полного внешнего отражения для каждого из полей соответствуют на этой диаграмме зеркальному отражению полей. При $\alpha=0$ ($\Phi_0=\Phi_h$) уравнения (17) дают граничные значения $\Phi_0=\Phi_1=8,4'$ для поля I и $\Phi_0=\Phi_2=16,9'$ — для поля II. Эти значения получены в работе [2]. При сколь угодно малых значениях одного из углов (например, $\Phi_h \rightarrow 0$) всегда можно выйти за угловую границу полного внешнего отражения для поля I, если зададим

второй угол $\Phi_0 > \Phi_x = \Phi_1 \Phi_2 / \Phi_c = 10,6'$. Совсем другая ситуация складывается для поля II. Если хотя бы один из углов Φ_0 , Φ_h будет меньше по величине, чем критический угол Φ_c полного внешнего отражения без дифракции, например $\Phi_h < \Phi_c$, то каким бы большим ни выбрали угол падения Φ_0 , невозможно будет выйти за угловую границу полного внешнего отражения для поля II.

Приведенные рассуждения имеют весьма важные и интересные следствия для исследования дифракции на тонких кристаллических пленках. Оказывается, что для исследования тонких пленок вовсе не обязательно выбирать малые углы падения ($\Phi_0 < \Phi_1$), при которых оба поля проникают на малую глубину $\sim 50-100$ Å. И при достаточно больших углах падения ($\Phi_0 > \Phi_2$) интенсивность дифракционного отражения от пленок толщиной $\sim 50-100$ Å будет сравнима по величине с интенсивностью отражения от толстого кристалла.

Рассмотрим углы падения $\Phi_0 = 4$ и $26'$. В таблице приведены значения экспоненциальной глубины проникновения полей соответственно для этих двух углов падения при различных углах выхода. Видно, что при малом угле падения $\Phi_0 = 4'$ и при углах выхода $\Phi_h \leq 10'$ оба поля проникают на глубину $\sim 50-100$ Å, и естественно, что в этом случае пленки толщиной $t \geq 50-100$ Å обеспечат интенсивность, сравнимую с интенсивностью отражения от толстого кристалла. Во втором случае, хотя поле I и проникает на большую глубину во всем диапазоне углов выхода, однако его относительные вклады в суммарное дифракционное отражение малы по сравнению с вкладами поля II, поэтому и при большом угле падения $\Phi_0 = 26'$ интенсивности дифракционного отражения от пленок толщиной $t \geq 50-100$ Å будут иметь тот же порядок величины, что и интенсивности отражения от толстого кристалла.

Таким образом, определилась различная роль волновых полей в формировании дифракционного отражения от кристаллических пленок. Волновое поле II формирует основной вклад в интенсивность дифракционных кривых и задает средний ход угловой зависимости, в то время как поле I формирует дополнительный вклад, состоящий в основном из осцилляций и придающий индивидуальность дифракционным кривым от пленок различной толщины. По этому вкладу можно определить толщину пленок; а также сделать заключение об их однородности.

Дифракция на бикристалле с большой разницей параметров кристаллической решетки. Большое значение имеет создание метода для исследования различного рода бикристаллических систем. Сюда относятся кристаллы с ионно-легированными и диффузионными слоями, эпитаксиальные пленки и т. д. Решение, полученное выше, позволяет теоретически описать дифракцию от этих объектов в том случае, когда разница параметров решетки в бикристалле достаточно велика. Действительно, если разница параметров решетки в бикристалле такова, что угловое расстояние между дифракционными максимумами (по углу дифракционной настройки θ) превышает суммарную полуширину этих дифракционных мак-

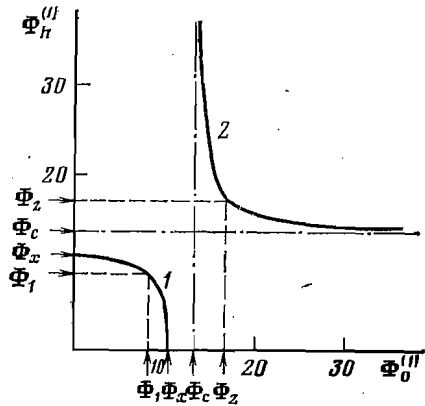


Рис. 3. Диаграммы угловых областей полного внешнего отражения для двух волновых полей для кремния (220)-отражения $\text{CuK}\alpha$ -излучения. 1 — граница области полного внешнего отражения для волнового поля I, 2 — для волнового поля II. Значения углов: $\Phi_c = 13,4'$; $\Phi_1 = 8,4'$; $\Phi_2 = 16,9'$; $\Phi_x = 10,6'$

симумов, то, например, для луча, удовлетворяющего точному условию Брэгга на пленке, подложка ведет себя практически как аморфное вещество, и наоборот. Следовательно, дифракционный максимум от пленки описывается формулами, полученными в настоящей работе, а дифракционный максимум от подложки — формулами, полученными в работе [6].

Рассмотрим примеры дифракционных кривых от бикристаллов применительно к схеме измерений, разработанной в работе [4]. Так как коллимация по углу дифракционной настройки не обеспечивается, то картина дифракционного отражения от бикристалла представляет из себя простое наложение (т. е. сумму интенсивностей) дифракционных отражений от

Глубина затухания волновых полей в кристалле и относительный вклад их интенсивности в отраженную дифракционную волну
Кремний, (220)-отражение, $\text{CuK}\alpha$ -излучение

Φ_h угл. мин	$l_1, \text{Å}$		$l_2, \text{Å}$		$ D_h^{(1)}/D_h^{(2)} ^2$	
	1*	2**	1	2	1	2
2,5	110	13000	51	61	4	0,3
5,0	120	13000	52	65	4	0,3
7,5	150	13000	53	71	4	0,2
10,0	410	14000	55	85	3	0,2
12,5	13000	15000	57	130	1	0,2
15,0	13000	16000	58	1400	0,7	0,3
17,5	12000	18000	60	2500	0,6	0,4
20,0	12000	23000	61	3500	0,5	0,6
22,5	12000	39000	62	3800	0,4	0,7
25,0	13000	160000	63	4000	0,4	0,8
27,5	14000	110000	63	4400	0,4	0,8
30,0	14000	34000	64	5200	0,3	0,8

* Угол падения $\Phi_0=4'$ ($l_0=66 \text{ Å}$).

** Угол падения $\Phi_0=26'$ ($l_0=3000 \text{ Å}$).

слоя и подложки при соответствующих углах падения и выхода. Хотя разность параметров решетки при этом не может быть определена (кроме вывода о том, что эта разность больше полуширины дифракционных максимумов), но по форме дифракционных кривых легко оценить толщину верхнего слоя, отличить бикристаллы от кристаллических слоев на аморфных подложках и от кристаллов с аморфными слоями, выяснить степень однородности слоев по толщине и т. п.

На рис. 4, а и б представлены кривые дифракционного отражения от трех перечисленных объектов для угла падения $\Phi_0=4'$ и толщины слоев $t=30$ и 50 Å . Нетрудно видеть, что все перечисленные двухслойные системы дают различные дифракционные кривые и что по форме кривых легко определяется толщина верхней пленки в диапазоне $t \sim 25-75 \text{ Å}$.

Ни для кривой отражения от кристаллической пленки, ни для кривой отражения от кристалла с аморфной пленкой угловые положения максимумов интенсивности не соответствуют лучам, удовлетворяющим точным условиям Брэгга. Это явление обусловлено резкой угловой дисперсией зеркального отражения в аморфной пленке и формирования дифракционной волны в кристаллической пленке.

Из-за сильного зеркального отражения в пленке при малых углах падения дифракционные кривые от бикристалла с верхним слоем толщиной $t > 100 \text{ Å}$ будут похожи на дифракционные кривые от кристаллического слоя на аморфной подложке, поэтому при исследовании слоев толщиной $t \sim 100-10\,000 \text{ Å}$ для сохранения интенсивности вклада от подложки целесообразно выбирать большие углы падения $\Phi_0 > \Phi_c$. На рис. 4, в-д представлены дифракционные кривые трех типов: для угла падения $\Phi_0=26'$ и пленок толщиной 100, 200 и 500 Å . Эти результаты четко иллюстрируют все перечисленные возможности метода.

Выводы. Таким образом, показано, что диффракция в условиях полного внешнего отражения является чрезвычайно перспективным методом для исследования кристаллической структуры тонких поверхностных пленок. Кристаллические пленки глубиной $t \approx 50-100 \text{ \AA}$ даже при достаточно больших углах падения дают дифракционные отражения такой же интенсивности, как и соответствующие отражения от толстых кристаллов.

Показано, что в сравнительно простой экспериментальной схеме, осуществленной в работе [4] на основе стандартного рентгеновского спектрометра с обычным источником излучения, в которой падающий пучок не коллимируется по углу отклонения от условия Брэгга и все измере-

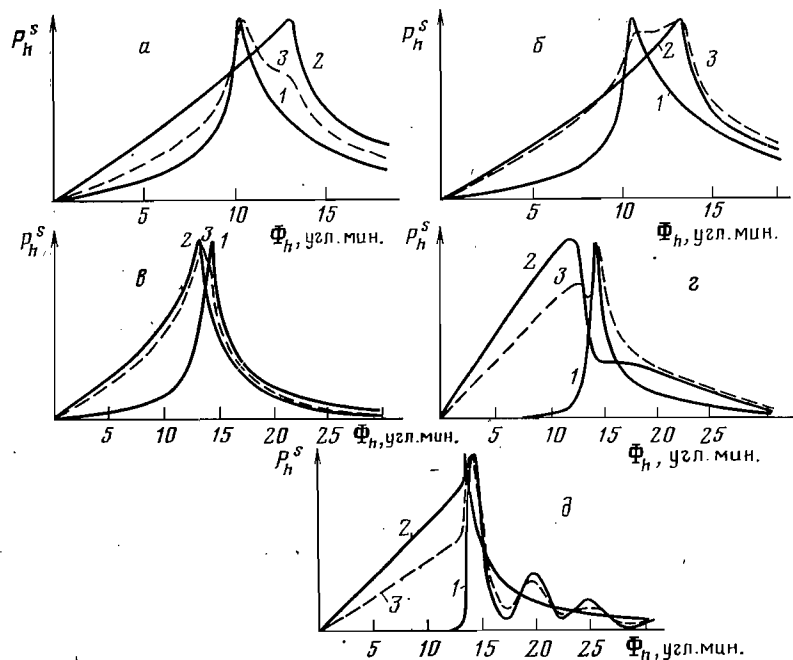


Рис. 4. Зависимость формы дифракционных кривых от типа исследуемого объекта и от толщины верхнего слоя. 1 — дифракционная кривая от кристалла с аморфным слоем; 2 — дифракционная кривая от кристаллического слоя на аморфной подложке; 3 — дифракционная кривая от бикристалла. Толщина слоя (\AA): а — 30, б — 50, в — 100, г — 200, д — 500. Значения Φ_0 (угл. мин): а, б — 4, в — д — 26

ния проводятся в минутном диапазоне углов, есть возможность четко различать по форме кривых различные типы двухслойных систем (бикристалл, кристалл с аморфной пленкой и кристаллическая пленка на аморфной подложке) и определять толщину верхнего слоя в диапазоне $\sim 25 \text{ \AA} - 1 \text{ мкм}$.

Все перечисленное показывает широкие возможности рентгеновской дифракции в условиях полного внешнего отражения для исследования ростовых эффектов на аморфных и кристаллических подложках, а также ионной имплантации и диффузии примеси в кристаллы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Marra W. C., Eisenberger P., Cho A. Y. J. Appl. Phys., 1979, v. 50, p. 6927.
2. Afanas'ev A. M., Melkonyan M. K. Acta Cryst., 1983, v. A39, p. 207.
3. Golovin A. L., Imatov R. M. Phys. Stat. Sol. (a), 1983, v. 77, p. K91.
4. Imatov R. M., Golovin A. L., Stepanov S. A., Afanas'ev A. M. In: Proc. Intern. Ion Engineering Congress ISIAI'83 and IPAT'83. Kyoto, 1983, p. 1913.

5. Александров П. А., Мелконян М. К., Степанов С. А. Кристаллография, 1984, т. 29, с. 376.
6. Afanas'ev A. M., Alexandrov P. A., Melkonyan M. K., Stepanov S. A. Phys. Stat. Sol. (a), 1984, v. 81, p. 47.

Институт кристаллографии
АН СССР, Москва

Поступила в редакцию
8.VI.1983

THE X-RAY DIFFRACTION UNDER SPECULAR REFLECTION CONDITIONS ON THE SURFACE CRYSTALLINE FILM

Alexandrov P. A., Afanas'ev A. M., Stepanov S. A.

The X-Ray diffraction under specular reflection conditions has been theoretically studied for the case of the parallel-sided crystalline film lying on the amorphous substrate. It has been shown that even thin films of about 50–100 Å in depth yield as strong diffracted intensities as thick crystals, the shape of the rocking curves being sensitive to the film depth up to several microns. The equations obtained, together with those from the work [6], describe theoretically the diffraction by bicrystals with great matrix differences ($\Delta a/a \approx 10^{-5} - 10^{-4}$). The computations carried out for the reflection of CuK_α radiation from Si(220) show that a relatively simple diffraction scheme [4] allows one, from the shape of the rocking curves, to distinguish readily among the various types of objects under research (bicrystal, crystal with amorphous layer and crystalline film on amorphous substrate) and to determine the top layer depth within the range of about 25 Å – 1 μm.