

УДК 548.4

ОЦЕНКА ПРЕДЕЛЬНО ДОПУСТИМОГО УГЛА ОТКЛОНЕНИЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ПЛОСКОСТИ (hkl) ОТ ЗАДАННОЙ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ ПЛОСКОСТИ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ОБРАЗЦА ПРИ ЕГО ОПРЕДЕЛЕНИИ ПО СТАНДАРТНОЙ МЕТОДИКЕ

Статья поступила 21 октября 2015 г.

В полупроводниковой отрасли для производства и контроля ориентированных подложек используют стандартную рентгеновскую методику определения угла отклонения (γ) кристаллографической плоскости (hkl) от заданной геометрической плоскости монокристаллического образца.

Угол γ — угол между нормалью к поверхности образца (N_0) и к кристаллографической плоскости (hkl) (N_{hkl}). Его проекции — углы α и β — расположены в двух взаимно перпендикулярных плоскостях, линия пересечения которых — нормаль N_0 .

Очевидно, существуют максимальные (предельные) величины α и β , при которых еще возможна регистрация детектором отраженного от кристаллографических плоскостей (hkl) рентгеновского луча. Так для угла α — проекции γ , расположенной в плоскости вращения гониометра, — ограничением будет условие непревышения брэгговского угла дифракции θ_0 для заданного отражения (HKL). Для β (при измерении α) — предельного значения (β_m), при котором дифрагированный от плоскостей (hkl) рентгеновский луч может пройти выше либо ниже приемного окна детектора и не будет зарегистрирован.

Предельную величину β_m , при которой еще возможна регистрация отраженного рентгеновского пучка, как правило, в методике измерения не указывают. Это связано с тем, что она зависит не только от θ_0 , но и от характеристик используемого гониометра: высоты приемного окна детектора (H), расстояния от оси вращения прибора до окна детектора (R), вертикальной расходимости рентгеновского пучка, падающего на измеряемую геометрическую плоскость образца (δ).

На рисунке представлен ход диафрагмированного рентгеновского луча при отражении (HKL) от кристаллографической плоскости (hkl). Рентгеновский луч, проходя от точечного источника F через диафрагму K , падает на измеряемую поверхность под брэгговским углом θ_0 к плоскости (hkl), отражается от геометрической плоскости образца и попадает в приемное окно высотой H детектора излучения. Видно, что $[N_0 N_h]$ составляет четверть H , $[ON_0]$ равен радиусу гониометра R , умноженному на $\sin \theta_0$. Отсюда следует, что предельный угол β_ϕ (его затем сопоставляли с экспериментально полученными β_m), при превышении которого отраженный рентгеновский луч не попадет

в приемное окно детектора и тем самым не будет зарегистрирован, определяется формулой:

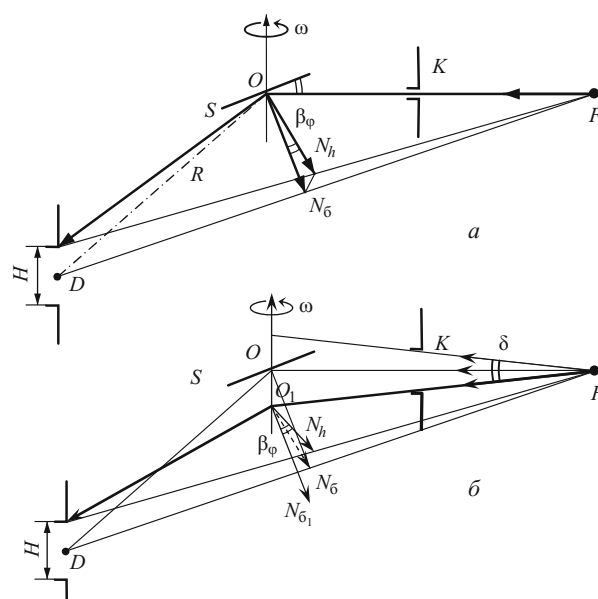
$$\beta_\phi = \text{arctg} \frac{H}{4R \sin \theta_0}. \quad (1)$$

С учетом малой величины отношения H/R формулу (1) можно представить в виде:

$$\beta_\phi \approx \frac{H}{4R \sin \theta_0}. \quad (1')$$

В случае расходящегося рентгеновского пучка (см. рисунок) угол β_ϕ состоит из двух углов: $N_{01}N_0$ и $N_0O_1N_h$. Угол $N_{01}N_0$ определяется угловой расходимостью рентгеновского пучка δ и может быть выражен как $\delta/2 \sin \theta_0$. Тогда для β_ϕ можно записать:

$$\beta_\phi \approx \left[\left(\frac{H}{2R} + \delta \right) \frac{1}{2 \sin \theta_0} \right]. \quad (2)$$



Схемы хода диафрагмированного (а) и вертикально расходящегося (б) рентгеновских пучков при положении образца в отражении (HKL) (S — измеряемая плоскость образца; $O\omega$ — ось вращения гониометра; β_ϕ — предельный угол отклонения; ON_h — проекция нормали N_{hkl} плоскости (hkl) на вертикальную плоскость держателя образца; ON_0 — нормаль к базовой плоскости держателя образца на гониометре; O_1N_0 — нормаль к измеряемой плоскости в точке O_1 , определяемой лучом FO_1

Рассчитанные (β_ϕ) и экспериментально определенные (β_m) предельные углы отклонения (Cu $K\alpha_1$ -излучение)

Гониометры	H , мм	L , мм	R , мм	(HKL)	θ_ϕ , угл. град.	Диафрагмированный пучок		Расходящийся пучок	
						β_ϕ	β_m	β_ϕ	β_m
ГУР-8	10	290	190	(111)	14,22	3,1	3,5	7	6,5
				(220)	23,65	1,9	1,7	4,3	3,6
				(400)	34,56	1,3	1,5	3	3
				(333)	47,48	1,0	1,1	2,3	1,8
Пьезогониометр (Rigaku)	16	200	80	(111)	14,22	11,7	более 11,3	—	—
				(220)	23,65	7,2	7,2	—	—
				(400)	34,56	5,1	5,5	—	—
				(333)	47,48	3,9	4,2	—	—

Для гониометра ГУР-8 при использовании схемы расходящегося пучка:

$$\delta = h/L = 0,034 \text{ рад}, \quad (3)$$

где h — высота окна базовой плоскости держателя образца ($h = 10$ мм); L — расстояние от фокального пятна рентгеновской трубки до оси прибора ($L = 290$ мм).

Результаты расчетов β_ϕ для отражений (111), (220), (400), (333) от монокристаллического кремния в Cu $K\alpha_1$ -излучении в условиях диафрагмированного и расходящегося рентгеновских пучков гониометра ГУР-8 и для диафрагмированного рентгеновского пучка пьезогониометра (Rigaku) приведены в таблице.

Формулы (1) и (2) носят оценочный характер. Это связано в первую очередь с тем, что при расчетах используется не нормаль N_{hkl} к плоскости (hkl), а ее проекция на вертикальную плоскость N_n , в которой лежит ось вращения гониометра и нормаль N_6 (см. рисунок).

Для экспериментальной проверки формул в качестве образцов для измерения использовали пластины монокристаллического кремния со следующими углами отклонения γ кристаллографических плоскостей (hkl) относительно заданных при резке геометрических плоскостей, град.: (111) — 11,3, (110) — 14,3, (100) — 7,2. Исследовали диафрагмированный и расходящийся рентгеновские пучки Cu $K\alpha_1$ -излучения в отражениях (111), (220), (400), (333).

Методика определения максимальных значений угла отклонения β_m следующая. Образец устанавливали в исходное положение на держателе гониометра, при котором угол отклонения γ кристаллографических плоскостей (hkl) относительно геометрической плоскости пластины лежал в плоскости вращения прибора. После регистрации отражения (HKL) интенсивностью I_0 от заданной плоскости (hkl) образец поворачивали в базовой плоскости держателя, с которой совпадает измеряемая плоскость пластины, на угол $\Delta\phi = 3^\circ$. После чего с помощью вращения держателя вокруг оси гониометра образец снова занимал положение отражения (HKL). Операцию последовательно повторяли до момента, когда интенсивность отраженного пучка еще надежно регистрировалась (минимальная предельная интенсивность — около $0,05I_0$). При таком положении образца в держателе измеряли конечный угол поворо-

та ϕ_m . Зная γ и ϕ_m , максимальный угол отклонения β_m определяли по формуле:

$$\text{tg } \beta_m = \text{tg } \gamma \sin \phi_m. \quad (4)$$

Значения β_m получены при измерениях в отражениях (111), (220), (400), (333) Cu $K\alpha_1$ -излучения для диафрагмированного и расходящегося рентгеновских пучков (см. таблицу). Погрешности для каждого отражения (hkl) не превышали $0,1\beta_m$.

Из таблицы видно, что для диафрагмированных пучков β_m отличается от β_ϕ для всех отражений в пределах погрешности измерений. Для расходящегося рентгеновского пучка величина β_m равна или меньше β_ϕ (разница не превышает $0,2\beta_m$).

При измерении в условии расходящегося рентгеновского пучка предельно допустимые величины β почти в два раза превышают значения, полученные для диафрагмированного пучка.

Для измерений на пьезогониометре (диафрагмированный рентгеновский пучок) предельные значения угла отклонения β более чем в три раза превышают значения, допустимые при измерении на гониометре ГУР-8, что объясняется большей величиной высоты H приемного окна детектора на пьезогониометре и меньшим расстоянием R от оси прибора до окна детектора.

Таким образом, предложенные формулы позволяют оценить максимальные величины углов отклонения кристаллографических плоскостей (hkl) от заданных геометрических плоскостей монокристаллических образцов, при которых возможно определение по стандартной методике при измерении в условиях диафрагмированного и расходящегося рентгеновских пучков, падающих на образец. Измерения, выполненные на монокристаллических пластинах кремния в отражениях (111), (220), (400), (333) Cu $K\alpha_1$ -излучения, показали удовлетворительное соответствие (в пределах погрешности измерений) полученных экспериментально предельных величин углов отклонения, при которых еще возможна регистрация отраженных рентгеновских пучков, с расчетными значениями.