

## ОБ ИЗОБРАЖЕНИИ ЯМОК ТРАВЛЕНИЯ НА РЕНТГЕНОВСКИХ ТОПОГРАММАХ

А. М. Афанасьев, В. Г. Кон

### Введение

Недавно авторами [1] были получены очень интересные и яркие картины изображения от ямок травления в условиях, когда кристалл подвергался деформации. Это обстоятельство объяснялось авторами тем, что наличие острых углов на поверхности ямки является источником концентрации сильных напряжений, которые и обуславливают наблюдаемую картину.

Однако известны случаи, когда контраст от ямок травления возникал и в таких условиях, когда кристалл не подвергался внешним деформациям. Хотя несомненно ясно, что наличие сильноискаженных областей вблизи острых углов должно приводить к резкому контрасту, тем не менее остается открытым вопрос о том, возникает ли изображение в том случае, когда напряжения в кристалле полностью отсутствуют, и какова в этом случае картина изображения.

Решению этого вопроса посвящена настоящая работа. При этом развитая авторами теория [2], в которой, в частности, дан метод расчета изображения от сильноискаженных областей, очень удобна для решения этой проблемы, так как ямку травления по существу можно рассматривать как сильноискаженную область в плоском образце. Оказалось, что ямки травления могут в ряде случаев давать резко выраженный контраст, и в разделе 3 дан конкретный расчет изображения ямки травления в форме тетраэдра, причем для простоты рассматривается симметричная лауэ-позиция.

### 1. Общая схема расчета изображения ямок травления произвольной формы

В двухволновом приближении решение для рентгеновского поля в кристалле удобно искать в виде

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{\eta}_0 e^{i\vec{k}_0 \vec{r}} E_0(\vec{r}) + \vec{\eta}_1 e^{i\vec{k}_1 \vec{r}} E_1(\vec{r}). \quad (1.1)$$

Пусть  $\vec{\kappa}$  — волновой вектор падающего на кристалл излучения. При этом

$$\vec{k}_0 = \vec{\kappa} + \vec{q}_0, \quad \vec{k}_1 = \vec{k}_0 + \vec{K}_1, \quad (1.2)$$

где  $\vec{q}_0$  — комплексный вектор в плоскости рассеяния, определенный так, чтобы

$$(\vec{q}_0 \vec{s}_0) = \frac{1}{2} \kappa g_{00}, \quad (\vec{q}_0 \vec{s}_1) = \frac{1}{2} \kappa (g_{00} - \alpha). \quad (1.3)$$

Остальные обозначения здесь и далее взяты из [2]. Далее мы будем рассматривать дополнительные поля

$$e_h(\vec{r}) = E_h(\vec{r}) - E_h^{(id)}(\vec{r}), \quad h = 0, 1, \quad (1.4)$$

где  $E_h^{(id)}(\vec{r})$  — обычные амплитуды для идеального кристалла в форме плоской пластины. Поля  $e_h(\vec{r})$  в области идеального кристалла удовлетворяют тем же уравнениям, что и  $E_h^{(id)}(\vec{r})$ , но возникают лишь там, где есть откло-

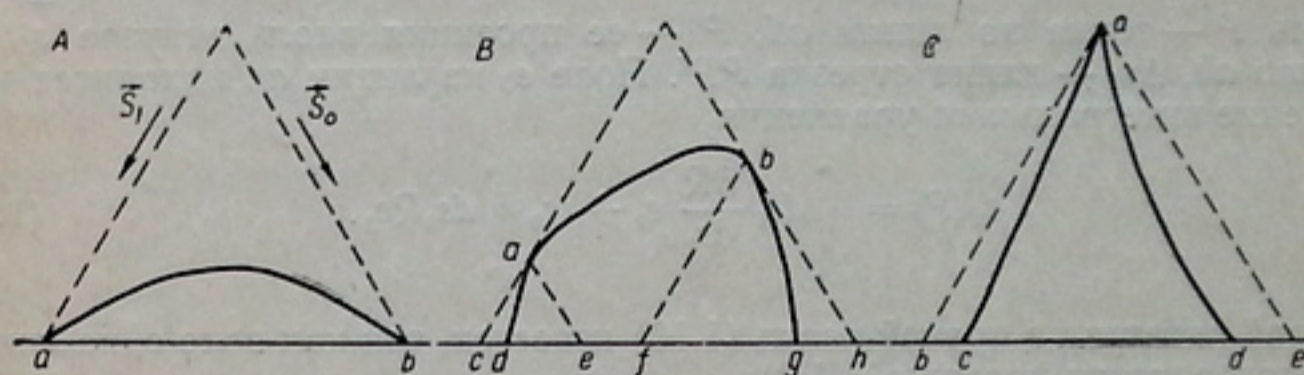


Рис. 1.

нение от обычных условий. Далее будем рассматривать лишь такие условия, при которых до выходной поверхности кристалла доходит только аномально проходящая волна. Для определенности ограничим анализ дифрагированным пучком. Обобщение на случай прошедшего пучка тривиально.

С точки зрения взаимодействия рентгеновских волн интерес представляет сечение ямки травления плоскостью рассеяния. В зависимости от формы ямки могут представиться различные ситуации, все многообразие которых может быть сведено к трем простым случаям, указанным на рис. 1. При этом в случае А отношение интенсивности на линии  $a$  к фону определяется просто:

$$\frac{I_1(x)}{I_1^{(id)}} = e^{\mu_a \Delta s_1(x)}, \quad (1.5)$$

где  $x$  — координата вдоль выходной поверхности,  $\mu_a$  — аномальный коэффициент поглощения,  $\Delta s_1(x)$  — длина отрезка, проведенного от точки наблюдения вдоль вектора  $\vec{s}_1$  до границы ямки. Если размеры ямки невелики, то изображение практически отсутствует. Для ямок больших размеров должно наблюдаться почернение.

В случае В расчет изображения представляет более сложную задачу. На участке  $df$  по-прежнему справедлива формула (1.5). Поле  $e_1$  на участке  $cd$  определяется через поля  $e_0, e_1$  на линии  $ad$ . Пусть  $P$  — точка на линии  $cd$  и  $P'$  — проекция этой точки на линию  $ad$  вдоль вектора  $\vec{s}_1$ , тогда

$$e_1(P) = e_1(P') - \int_{aP'} ds_0 \frac{\partial R}{\partial s_0} e_1 - ic_1 \int_{aP'} ds_1 R e_0. \quad (1.6)$$

Здесь используются косоугольные координаты  $s_0, s_1$  в плоскости рассеяния такие, что

$$\vec{r} = s_0 \vec{s}_0 + s_1 \vec{s}_1, \quad (1.7)$$

$R$  — функция Римана задачи:

$$R = J_0(2c \sqrt{(s_{0p} - s_0)(s_{1p} - s_1)}), \quad (1.8)$$

где  $J_n(z)$  — функция Бесселя  $n$ -го порядка,  $s_{0p}$ ,  $s_{1p}$  — координаты точки  $P$  [2].

Поле  $e_1$  на линии  $ad$  определяется переносом с линии  $ab$ . Принимая во внимание, что на линии  $ab$   $e_1 = 0$ , имеем

$$e_1(P) = E_1^{(id)}(P') e^{-i(\vec{q}_0 \vec{s}_1) \Delta s_1} - E_1^{(id)}(P). \quad (1.9)$$

Здесь  $P$  — точка на линии  $ad$ ,  $P'$  — ее проекция вдоль вектора  $\vec{s}_1$  на линию  $ab$ ,  $\Delta s_1$  — длина отрезка  $PP'$ . Поле  $e_0$  на линии  $ad$  находится как решение интегрального уравнения

$$e_0(P) = \int_{aP} ds_1 \frac{\partial R}{\partial s_1} e_0 + ic_0 \int_{aP} ds_0 R e_1. \quad (1.10)$$

Второй интеграл в правой части (1.10) известен, так как поле  $e_1$  на линии  $ad$  определяется формулой (1.9).

На линии  $bg$  поля определяются таким же образом, только теперь  $e_0$  находится из переноса:

$$e_0(P) = E_0^{(id)}(P') e^{-i(\vec{q}_0 \vec{s}_0) \Delta s_0} - E_0^{(id)}(P), \quad (1.11)$$

где  $P$  — точка на линии  $bg$ ,  $P'$  — ее проекция вдоль вектора  $\vec{s}_0$  на линию  $ab$ ,  $\Delta s_0$  — длина отрезка  $PP'$ , а поле  $e_1$  определяется из интегрального уравнения

$$e_1(P) = \int_{bP} ds_0 \frac{\partial R}{\partial s_0} e_1 + ic_1 \int_{bP} ds_1 R e_0. \quad (1.12)$$

На участке  $fg$  поле  $e_1$  определяется переносом с линии  $bg$ :

$$e_1(P) = [e_1(P') + E_1^{(id)}(P')] e^{-i(\vec{q}_0 \vec{s}_1) \Delta s_1} - E_1^{(id)}(P), \quad (1.13)$$

где  $P$  — точка на участке  $fg$ ,  $P'$  — ее проекция вдоль вектора  $\vec{s}_1$  на линию  $bg$  и  $\Delta s_1$  — длина отрезка  $PP'$ . На участке  $gh$  поле  $e_1$  также определяется через поля  $e_0$ ,  $e_1$  на линии  $bg$ , только в данном случае

$$e_1(P) = \int_{bP'} ds_0 \frac{\partial R}{\partial s_0} e_1 + ic_1 \int_{bP'} ds_1 R e_0, \quad (1.14)$$

где  $P'$  — проекция точки  $P$  вдоль вектора  $\vec{s}_0$  на линию  $bg$ .

Формулы (1.6—1.14) в принципе решают поставленную задачу. Как видно из вышеприведенного анализа, она распадается на две части. Первая часть состоит в определении промежуточных полей на боковых стенках ямки (формулы (1.9) — (1.12)), а вторая — в определении амплитуд на выходной поверхности кристалла (формулы (1.5), (1.6), (1.13), (1.14)). Искомое отношение интенсивностей

$$\frac{I_1(x)}{I_1^{(id)}} = \left| 1 + \frac{e_1(x)}{E_1^{(id)}(x)} \right|^2. \quad (1.15)$$

В случае  $C$  первая часть задачи еще более усложняется. В самом деле, здесь перенос осуществляется с противоположной стенки ямки, где

также существуют ненулевые поля  $e_0$ ,  $e_1$ . Следовательно, в формуле (1.9) необходимо сделать замену  $E_1^{(id)}(P')$  на  $e_1(P') + E_1^{(id)}(P')$ , а в формуле (1.11) заменить  $E_0^{(id)}(P')$  на  $e_0(P') + E_0^{(id)}(P')$ , после чего формулы (1.9), (1.11) также превращаются в некие функциональные уравнения. При этом четыре уравнения (1.9) — (1.12) представляют собой замкнутую систему для четырех неизвестных функций — полей  $e_0$ ,  $e_1$  на обеих сторонах ямки.

Практическая реализация намеченной программы для ямки произвольной формы довольно затруднительна, особенно в случае  $C$ . Однако эти трудности не носят принципиального характера. Как будет видно ниже, задача частично упрощается, когда стенки ямки представляют собой плоскости.

## 2. Расчет изображения ямки травления в форме тетраэдра

Ниже приводится конкретный расчет изображения ямки травления в форме тетраэдра. Расположение отражающих плоскостей показано на рис. 2. Плоскости рассеяния перпендикулярны плоскостям отражения, и в результате мы получаем сечения двух видов (случаи  $A$  и  $B$  на рис. 3) со сторонами в виде прямых линий. Это позволяет частично упростить намеченную в разделе 1 общую программу расчета изображения.

Во-первых, интегральные уравнения (1.10), (1.12) становятся уравнениями Вольтерра с разностным ядром и могут быть решены методом интегрального преобразования Лапласа. В результате мы получаем

$$e_0^\pi(\xi_p) = ic_0 \int_0^{\xi_p} d\xi u(B[\xi_p - \xi]) e_1^\pi(\xi),$$

$$\gamma = \frac{\sin(\Theta - \psi)}{\sin 2\Theta}, \quad (2.1)$$

$$B = 2c \frac{\sqrt{\sin(\Theta - \psi) \sin(\Theta + \psi)}}{\sin 2\Theta}.$$

Здесь  $\xi$  — координата вдоль линии  $ac$  (рис. 3,  $A$ ), отсчитываемая от точки  $a$ ,  $\psi$  — угол между плоскостью отражения и стороной ямки в сечении плоскостью рассеяния (для тетраэдра  $\psi = 22^\circ 12'$ ),  $\Theta$  — угол Брэгга,

$$u(z) = \frac{2}{z} J_1(z) \quad (2.2)$$

— функция Римана задачи Брэгга [2, 3]. Индекс «л» означает, что уравнение справедливо на левой стороне ямки.

Аналогично на правой стороне ямки (линия  $ad$  на рис. 3,  $A$ ) уравнение (1.12) преобразуется к уравнению (2.1), если в последнем заменить  $e_0^\pi$  на  $e_1^\pi$  и  $e_1^\pi$  на  $e_0^\pi$ .

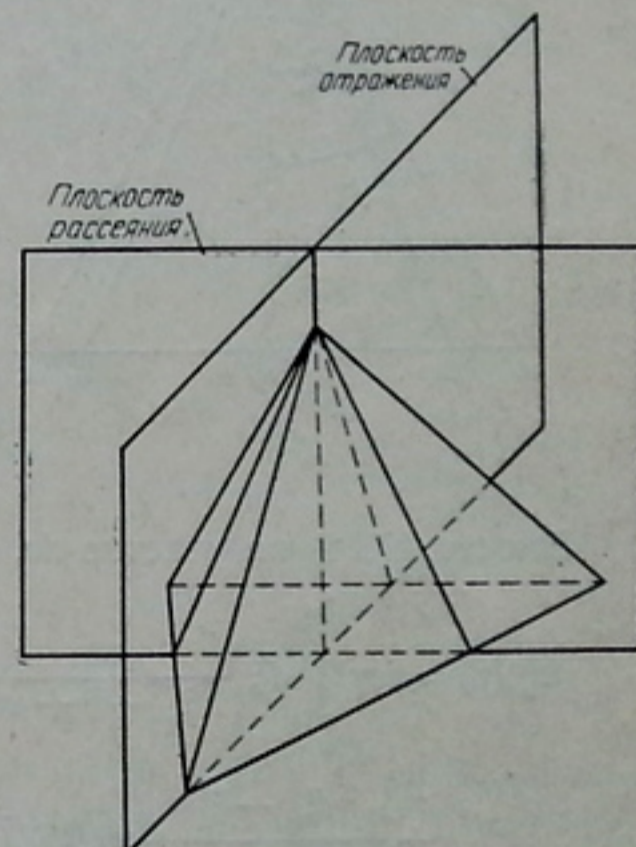


Рис. 2.

Метод преобразования Лапласа позволяет также упростить формулы (1.6) и (1.14). На участке  $bc$  (рис. 3, А), подставляя (2.1) в (1.6), получаем

$$e_1^{bc}(\eta) = e_1^n(\xi_\eta) - \frac{B^2}{4} \varepsilon \eta \int_0^{\xi_\eta} d\xi u(BV(\xi_\eta - \xi)(\xi_\eta - \xi + \varepsilon \eta)) e_1^n(\xi), \quad (2.3)$$

где  $\eta$  — координата точки  $P$  на линии  $bc$ , отсчитываемая от точки  $c$  к  $b$ ,  $\xi_\eta$  — координата точки  $P'$  на  $ac$ :

$$\xi_\eta = \xi_0 - \frac{\cos \Theta}{\sin(\Theta + \psi)} \eta, \quad \varepsilon = \cos \Theta \left( \frac{1}{\sin(\Theta - \psi)} + \frac{1}{\sin(\Theta + \psi)} \right), \quad (2.4)$$

где  $\xi_0$  — длина отрезка  $ac$ .

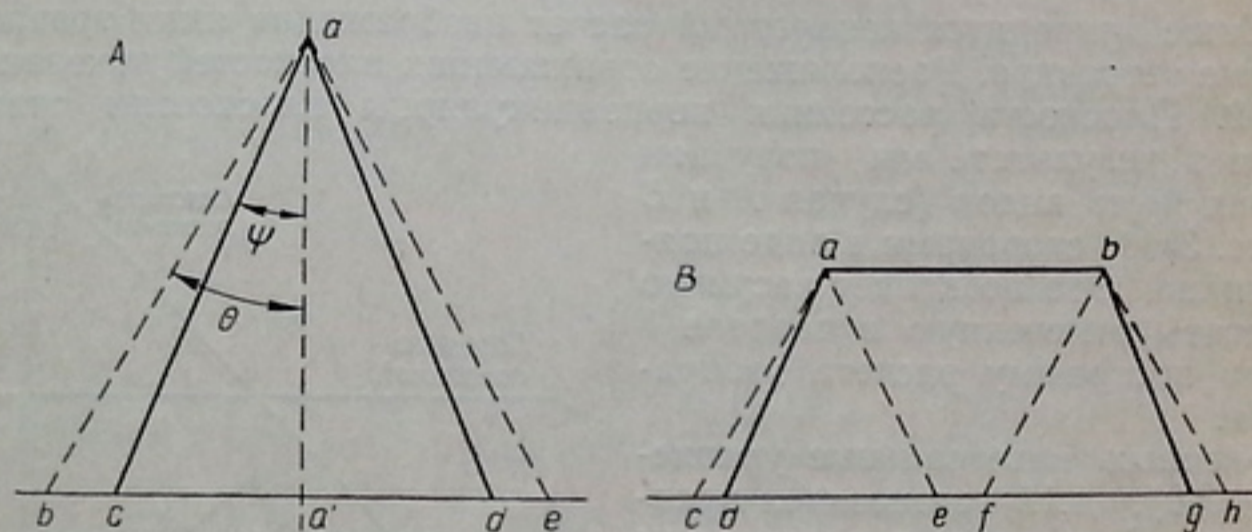


Рис. 3.

Вместо (1.14) на участке  $de$ , используя тот же прием, получаем

$$e_1^{de}(\eta) = ic\gamma \int_0^{\xi_\eta} d\xi \left\{ \frac{\varepsilon \eta}{\xi_\eta - \xi + \varepsilon \eta} J_0(BV(\xi_\eta - \xi)(\xi_\eta - \xi + \varepsilon \eta)) + \frac{\xi_\eta - \xi}{\xi_\eta - \xi + \varepsilon \eta} u(BV(\xi_\eta - \xi)(\xi_\eta - \xi + \varepsilon \eta)) \right\} e_0^n(\xi), \quad (2.5)$$

где  $\eta$  — координата точки  $P$  на линии  $de$ , отсчитываемая от точки  $d$  к  $e$ . Остальные обозначения такие же, как в формуле (2.3).

Система четырех уравнений для сечений типа А на рис. 3 решается методом последовательных подстановок и решение получается в виде разложения по параметру  $\gamma$ . Однако, сходимость ряда еще более сильная, так как перенос сдвигает аргументы полей ближе к нулю, где поля малы. В случае В на рис. 3 процедура нахождения изображения сводится просто к вычислению интегралов.

Расчет был проведен для следующих значений параметров:

$$g_{00} = -3 \cdot 10^{-5} + 0,9 \cdot 10^{-6}i, \quad \Theta = 30^\circ,$$

$$g_{01} = g_{10} = -1,85 \cdot 10^{-5} + 0,85 \cdot 10^{-6}i, \quad \lambda = 1,54 \text{ \AA}.$$

За единицу длины берется длина экстинкции  $l_0 = \frac{\lambda}{\pi} |g'_{01}|$ . Параметр  $\alpha$ , характеризующий отклонение от брэгговского условия, принимался равным нулю. Высота тетраэдра —  $28 l_0$ .

Результаты расчета приведены на рис. 4, 5. На рис. 4 представлена двумерная картина изображения в отраженном пучке, возникающая непосредственно на дне ямки (отрезки  $cd$  на рис. 3, А и отрезки  $dg$  на

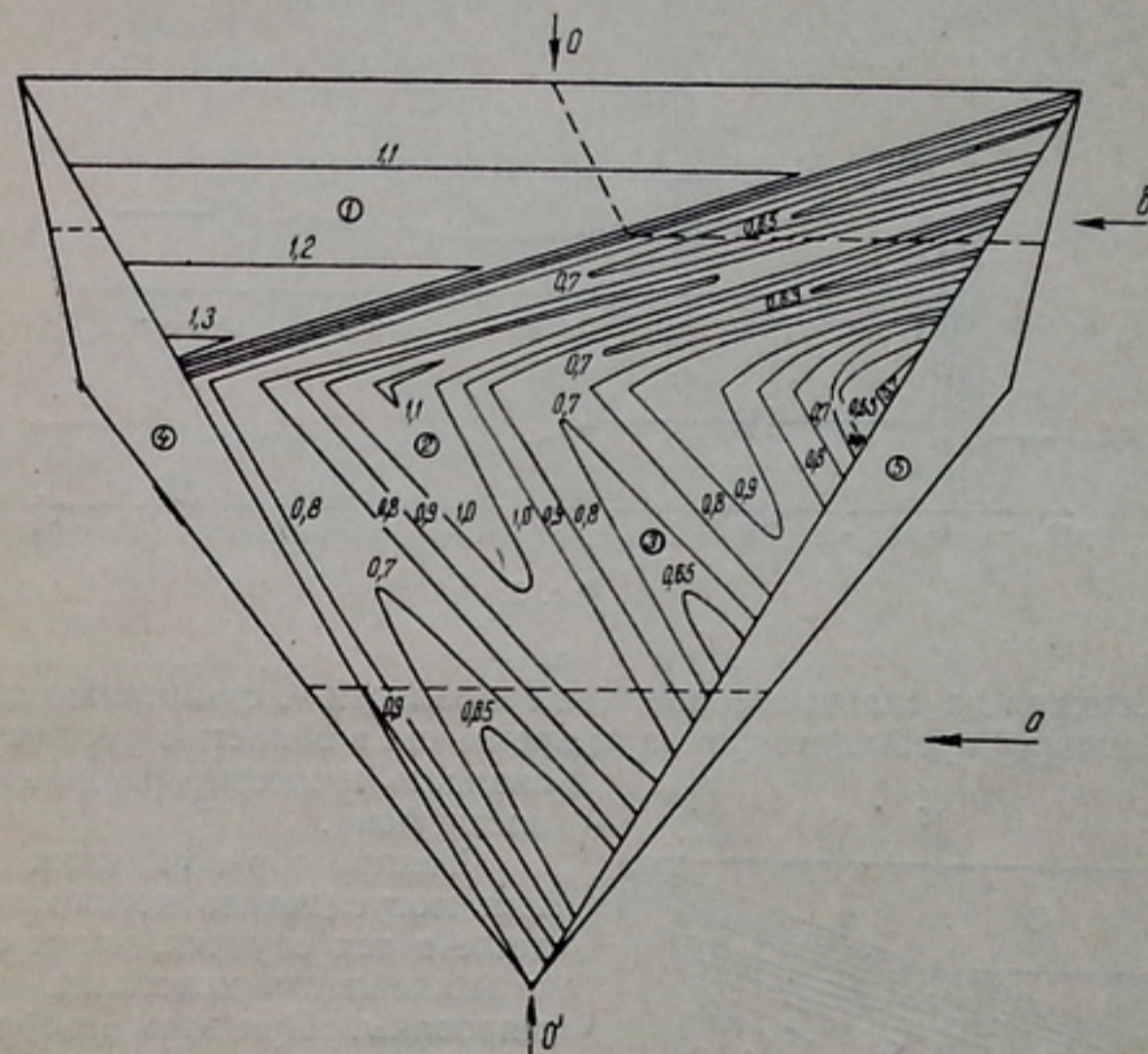


Рис. 4.

рис. 3, В). Из этого рисунка видно, что в данном случае имеется довольно четкое изображение, которое характеризуется наличием резко выраженных областей почернения (увеличения интенсивности по отношению к фону) и просветления (уменьшения интенсивности по отношению к фону). Области почернения (1, 2 на рис. 4) имеют различную физическую природу. Что касается области 1, то она целиком связана с чисто кинематическим эффектом. Действительно, интенсивность в этих точках есть просто перенесенная без поглощения интенсивность идеального поля с верхней части ямки (рис. 3, В).

Почернение в области 2, так же как и просветление в области 3, обусловлено уже динамическими эффектами, и распределение интенсивности в этих областях осциллирует. При этом интересно отметить, что динамическое взаимодействие приводит к уменьшению интенсивности отраженной волны (а также и проходящей волны, для которой изображение полностью идентично и получается из приведенного на рис. 4 зеркальным отображением относительно оси  $OO'$ ) в некоторых областях, хотя и в данном случае мы лишь выбросили часть кристалла.

Что касается областей 4, 5 на рис. 4, то здесь интенсивность очень сильно осциллирует и поэтому распределение интенсивности для этих

областей приведено отдельно на рис. 5. Мы приводим два графика, соответствующие сечениям *a* и *б*, указанным стрелками на рис. 4. Оба сечения имеют высоту  $12l_0$  и находятся по обе стороны от вершины. Промежуточные сечения дают аналогичные картины. Из этих графиков видно,

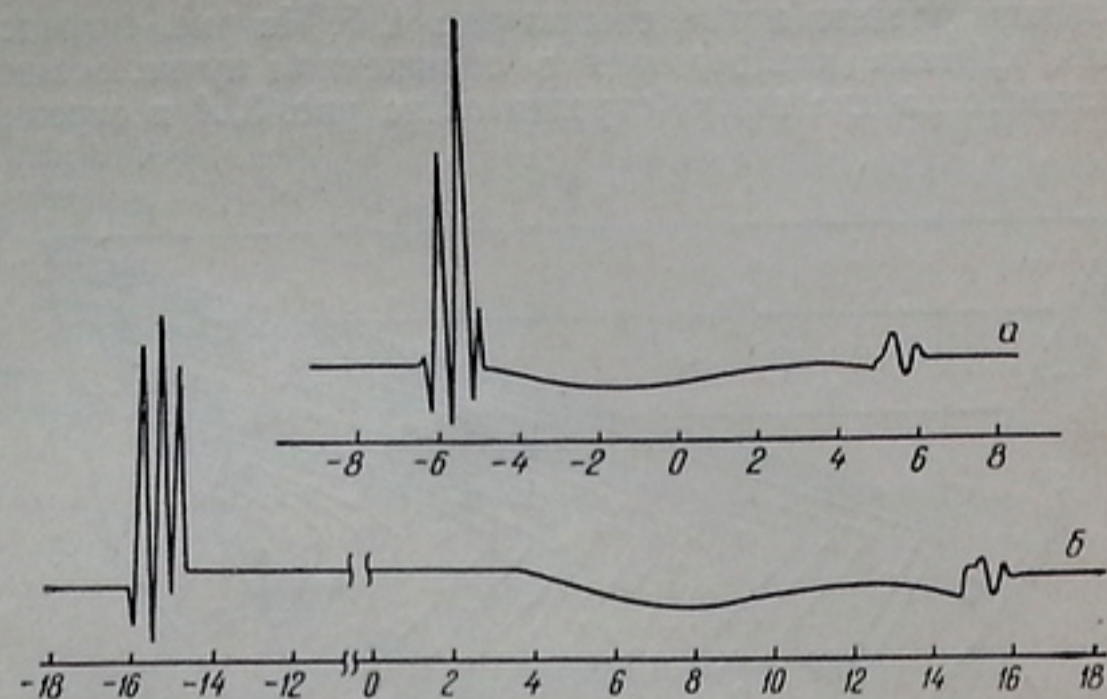


Рис. 5.

что, несмотря на сильные осцилляции в области 4, суммарная интенсивность намного превышает фон, в то время как в области 5 средняя интенсивность примерно равна интенсивности фона.

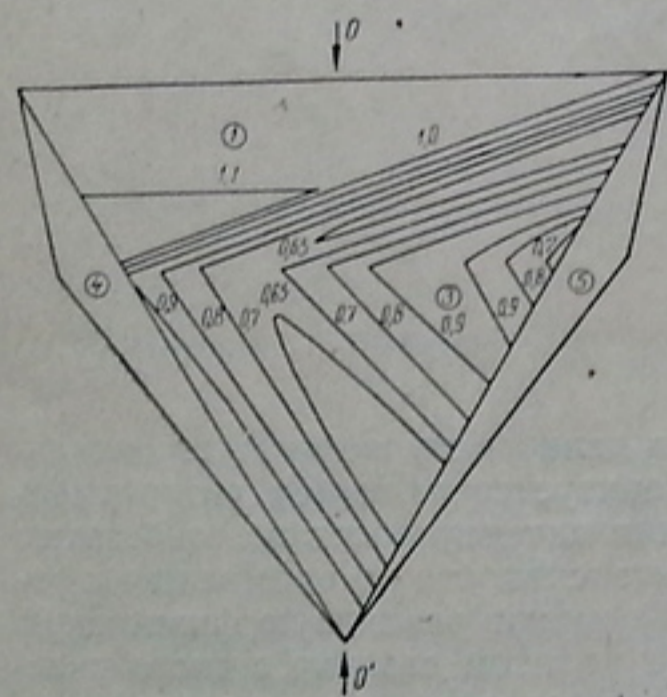


Рис. 6.

Таким образом, ямки травления могут давать четкий контраст даже в тех случаях, когда близкие к ним области кристалла недеформированы. При этом изображение в отраженной волне имеет четкую границу в виде почернения (область 4, а для прошедшей волны это будет область 5). Область 1, которая фактически тоже будет выглядеть как граница изображения, также будет темным, но менее выраженным контрастом, чем область 4, а картина изображения под ямкой травления будет выглядеть как светлый контраст с небольшим темным островком. Качественно такая картина всегда будет иметь

место, если угол Брэгга  $\Theta$  не намного превышает угол  $\psi$  (см. рис. 3, А).

Изображение ямок травления меньшей высоты, чем  $28l_0$  можно получить из рис. 4 путем склеивания нижней и правой верхней частей. Так, на рис. 6 дана картина изображения, соответствующая ямке травления вдвое меньшей высоты. Это изображение получается путем склеивания обведенных пунктирными линиями частей рис. 4. Как видно из этого рисунка, темный контраст (область 2) исчезает и изображение представляет собой светлое пятно, окаймленное темной границей. Для ямок травления большей высоты картина, приведенная на рис. 4, как бы раздви-

гается, и в средней части появятся новые области, соответствующие сечениям большей высоты. При этом могут появиться новые островки на светлом фоне.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Л. И. Даценко, А. С. Васильковский, А. Н. Гуреев, УФЖ, 16, 745, 1971.
2. А. М. Афанасьев, В. Г. Кон, Acta Cryst., A27, 421, 1971.
3. T. Uragami, J. Phys. Soc. Japan, 27, No 1, 147, 1969.

Поступила в редакцию  
16.XII 1970 г.

ON THE IMAGE OF ETCHING PITS  
ON X-RAY TOPOGRAMS

A. M. Afanasiev, V. G. Kon

## Summary

The picture of image from the etching pit of a tetrahedron form is calculated in the case when the distortion of the lattice near the etching pit is absent. It was found that even in this case the etching pit can produce a sharp black-white contrast. The method is given to calculate the image from the etching pit of an arbitrary form.