КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2024, том 69, № 4, с. 575–580

ДИФРАКЦИЯ И РАССЕЯНИЕ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

УДК 548.73

БЫСТРЫЙ ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ ОТ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МИКРОСИСТЕМ

© 2024 г. В. И. Пунегов[1,*], Д. М. Мальков[1]

[1]*Физико-математический институт ФИЦ "Коми научный центр УрО РАН", Сыктывкар, Россия*

**E-mail: vpunegov@dm.komisc.ru*

Поступила в редакцию 17.11.2023 г.
После доработки 29.11.2023 г.
Принята к публикации 29.11.2023 г.

Разработан метод быстрого численного расчета рентгеновской дифракции в кинематическом приближении от тонких кристаллических микросистем. Скорость вычислений карт интенсивности рассеяния вблизи узла обратной решетки с использованием этого подхода на 3–4 порядка выше, чем скорость расчетов на основе уравнений Такаги–Топена или двумерных рекуррентных соотношений. В рамках полученных решений выполнено численное моделирование картографирования рентгеновской дифракции в обратном пространстве для трех моделей кристаллических чипов микросистем.

DOI: 10.31857/S0023476124040021, **EDN:** XDWGDS

ВВЕДЕНИЕ

В микроэлектромеханических системах (**МЭМС**), которые применяются в аэрокосмической, автомобильной или часовой промышленности, используются тонкие полупроводниковые кристаллы [1]. Данные системы создают высокий спрос на контроль качества, поэтому требуют развития новых методов в области тестирования и анализа структуры. Монокристаллические материалы, такие как кремний, обладают высокой потенциальной устойчивостью к старению. На качество кристаллов влияют этапы всего инженерного процесса, включая производство и компоновку чипов. Термический отжиг, нарезка и склеивание влияют на кристаллическую структуру кремния и увеличивают вероятность выхода чипов из строя. Для понимания процесса деградации чипов МЭМС важно получить информацию о напряженном материале в атомном масштабе. Экспериментальные измерения локальных напряжений и деформаций проводятся с использованием методов высокоразрешающей рентгеновской дифракции [2]. Анализ экспериментальных результатов, как правило, сопровождается численным моделированием, например на основе метода конечных элементов [3]. Однако этот подход, а также другие методы компьютерного моделирования с использованием уравнений Такаги–Топена [4, 5] и двумерных рекуррентных соотношений [6, 7] являются трудоемкими и затратными по времени вычислений. Поскольку в основе конструкции МЭМС в ряде случаев используются тонкие структуры, например кристаллы кремния толщиной ~4 мкм [2], для численного моделирования рентгеновского рассеяния вместо уравнений динамической дифракции можно использовать решения в кинематическом приближении. В данной работе представлены новые решения кинематической рентгеновской дифракции ограниченных пучков от тонких планарных, градиентных и изогнутых кристаллов.

Метод высокоразрешающей трехосевой рентгеновской дифракции является наиболее эффективным для тестирования микроструктур. Этот метод позволяет регистрировать карты интенсивности рентгеновского рассеяния вблизи узла обратной решетки (reciprocal space map, **RSM**). Расчеты карт RSM для когерентной дифракции возможны только для случая латеральных кристаллов [6, 7] и (или) пространственно ограниченных рентгеновских пучков [4, 5].

КИНЕМАТИЧЕСКАЯ ДИФРАКЦИЯ НА ИЗОГНУТОМ КРИСТАЛЛЕ

В общем случае дифракция в деформированном кристалле в симметричной геометрии Брэгга описывается уравнениями Такаги–Топена [8, 9]:

$$\begin{cases} (\cot\theta_B \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z}) E_0(\eta; x, z) = \\ = ia_0 E_0(\eta; x, z) + ia_{-h}\, \varphi(x,z) E_h(\eta; x, z) \\ (\cot\theta_B \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial z}) E_h(\eta; x, z) = \\ = i(a_0 + \eta) E_h(\eta; x, z) + ia_h \varphi^*(x,z) E_0(\eta; x, z) \end{cases}, \quad (1)$$

где $E_{0,h}(\eta;\, x,\, z)$ – амплитуды проходящей и дифрагированной волны, $a_0 = \pi\chi_0 / (\lambda\gamma_0)$, $a_{h,-h} = C\pi\chi_{h,-h} / (\lambda\gamma_{0,h})$, $\gamma_{0,h} = \sin\theta_B$, θ_B – угол Брэгга, $\eta = 2k(\cos\theta_B)\omega$ – угловой параметр, используемый в двухкристальной дифрактометрии в режиме θ–2θ-сканирования, ω – отклонение рентгеновского пучка от угла Брэгга θ_B, $k = 2\pi/\lambda$ – волновое число, λ – длина волны рентгеновского излучения в вакууме, C – поляризационный фактор, $\chi_g = -r_0\lambda^2 F_g/(\pi V_c)$ $(g = 0,\, h,\, -h)$ – фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости, V_c – объем элементарной ячейки, $r_0 = e^2/(mc^2)$ – классический радиус электрона, e, m – заряд и масса электрона, F_g – структурный фактор.

В уравнениях (1) присутствует фазовый фактор $\varphi(x,z) = \exp\left(ihu_z(x,z)\right)$, при этом "звездочка" означает комплексное сопряжение, $h = 2\pi/d_{hkl}$ – величина вектора обратной решетки, d_{hkl} – межплоскостное расстояние, $u_z(x,z)$ – проекция вектора атомных смещений на направление вектора обратной решетки.

В случае изогнутого кристалла проекция вектора атомных смещений запишется как

$$u_z(x,z) = \frac{1}{2R}\left[x^2 + \nu z^2\right],$$

где R – радиус изгиба кристалла, ν – постоянная величина, которая зависит от модулей упругости и ориентации кристалла. Фазовый фактор в уравнениях (1) можно записать в виде произведения $\varphi(x,z) = \varphi_x(x)\varphi_z(z)$, где $\varphi_x(x) = \exp\left(-ih\frac{x^2}{2R}\right)$ и $\varphi_z(z) = \exp\left(-ih\frac{\nu z^2}{2R}\right)$ – одномерные фазовые функции по координате x и z в условиях дифракции в изогнутом кристалле. Далее, выполняя фурье-преобразование амплитуд рентгеновских полей в двумерных уравнениях (1):

$$E_{0,h}(\eta; x, z) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dq_x \exp\left(iq_x x\right) E_{0,h}(q_x, \eta; z), \quad (2)$$

и фазовой функции

$$\varphi_x(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dq_x \exp\left(iq_x x\right)\varphi_x\left(q_x\right), \quad (3)$$

получаем систему одномерных уравнений для полей $E_{0,h}(q_x, \eta; z)$ [4]. Эта система описывает кинематическую дифракцию при условии $a_{-h} = 0$, что означает отсутствие влияния дифракционного пучка на проходящую рентгеновскую волну. Заменяя амплитуды рентгеновских волн

$$\begin{cases} E_0(q_x, \eta; z) = \\ = \hat{E}_0(q_x, \eta; z)\exp(i(a_0 - q_x\cot\theta_B)z) \\ E_h(q_x, \eta; z) = \\ = \hat{E}_h(q_x, \eta; z)\exp(-i(a_0 + \eta - q_x\cot\theta_B)z) \end{cases},$$

запишем уравнения дифракции в виде

$$\begin{cases} \frac{\partial \hat{E}_0(q_x, \eta; z)}{\partial z} = 0 \\ -\frac{\partial \hat{E}_h(q_x, \eta; z)}{\partial z} = ia_h\varphi_z^*\left(z\right)\varphi_x^*\left(q_x\right)\times \\ \times E_0(\eta; x, z)\exp[i(a_0 + \eta - q_x\cot\theta_B)z] \end{cases}. \quad (4)$$

В трехосевой дифрактометрии угловое положение образца ω и анализатора (позиционно чувствительного детектора) ε связаны с проекциями отклонения вектора дифракции от узла обратной решетки соотношениями: $q_x = k\sin(\theta_B)(2\omega - \varepsilon)$, $q_z = \cos(\theta_B)\varepsilon$. В этом случае угловая переменная η в уравнениях (4) выражается как $\eta = q_x\cot(\theta_B) - q_z$.

Используя граничные условия $E_0(\eta; x, 0) = 1$ и $E_h(\eta; x, z = L_z) = 0$, а также вводя функцию $\Phi(q_x) = \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx\, \varphi_x(x)\exp\left(iq_x x\right)$, где L_x – ширина поверхности и L_z – толщина изогнутого кристалла, для амплитуды дифракционной волны получаем решение

$$E_h(q_x, q_z) = ia_h\Phi(q_x)\int_0^{L_z} dz\, \exp(i(a_0 - q_z)z)\varphi_z(z). \quad (5)$$

МОДЕЛИ ЧИПОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МИКРОСИСТЕМ

Рассмотрим рентгеновскую дифракцию от трех моделей чипов МЭМС шириной L_x и толщиной L_z. Кристаллические чипы "купаются" в падающем рентгеновском пучке, т.е. поперечная ширина рентгеновского пучка больше размера микросистем. Угловое распределение интенсивности рассеяния в обратном пространстве (RSM) описывается выражением $I_h(q_x, q_z) = \left|E_h(q_x, q_z)\right|^2$, где $E_h(q_x, q_z)$ – амплитуда дифрагированной волны.

Первая модель представляет собой изогнутый кристалл толщиной L_z. Решение для амплитуды дифракционной волны описывается формулой (5).

Вторая и третья модели МЭМС выбраны в виде двухслойной кристаллической системы. В обоих случаях верхняя часть представляет собой изогнутый кристалл толщиной L_{z1}, дифракция в котором описывается решением (5). В нижних слоях изгиб атомных плоскостей отсутствует из-за действия латеральных сил при креплении чипа на печатную плату [1]. Полная толщина структуры $L_z = L_{z1} + L_{z2}$, где $L_{z1,\,z2}$ – толщины верхней и нижней частей чипа МЭМС (рис. 1). Нижней частью второй модели служит совершенный кристалл толщиной L_{z2}, а для третьей модели – градиентный по глубине слой той же толщины. Для такой структуры решение в общем случае имеет вид

$$E_{2h}(q_x,q_z) = \\ = ia_h\Phi_2(q_x)\int_0^{L_{z2}} dz\,\exp(i(a_0-q_z)z)\varphi_{2z}(z), \quad (6)$$

где $\varphi_{2z}(z) = \exp\left(ih\,u_{2z}[z]\right)$ для градиентного слоя и $\varphi_{2z}(z) = 1$ для совершенного кристалла, $u_{2z}(z)$ – проекция вектора атомных смещений градиентного слоя на направление вектора обратной решетки; $\Phi_2(q_x) = \sin(q_xL_x/2)/(q_x/2)$.

Решение задачи дифракции от двухслойной структуры с учетом граничных условий записывается в виде

$$E_h(q_x,q_z) = \\ = E_{1h}(q_x,q_z) + \exp(iq_zL_{z1})E_{2h}(q_x,q_z), \quad (7)$$

где $E_{1h,2h}(q_x,q_z)$ – амплитуды отраженной рентгеновской волны от верхнего и нижнего слоя чипа МЭМС.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Численные расчеты рентгеновской дифракции от трех моделей чипов МЭМС толщиной 4 мкм выполнены для симметричного (333) отражения σ-поляризованного рентгеновского Cu$K_{\alpha1}$-излучения. Результаты расчетов представлены с учетом сдвига системы координат на угловое расстояние, связанное с преломлением рентгеновских лучей, которое пропорционально вещественной части коэффициента a_0 в уравнениях (1). Значения коэффициентов Фурье рентгеновских поляризуемостей $\chi_0 = (-15.127 + i\,0.350) \times 10^{-6}$ и $\chi_h = (-4.497 + i\,0.218) \times 10^{-6}$ получены с использованием вычислительной процедуры сервера “X-Ray Server” [10]. Длина первичной брэгговской экстинкции для

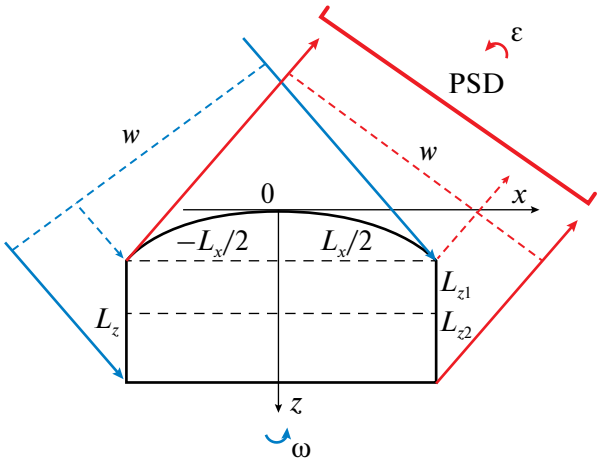

Рис. 1. Схематическое изображение рентгеновской дифракции от чипа МЭМС, состоящего из верхней изогнутой части толщиной L_{z1} и нижней совершенной или градиентной области кристалла толщиной L_{z2}. Ширина падающего и отраженного рентгеновского пучка w, засветка поверхности структуры имеет размер L_x. PSD – позиционно чувствительный детектор.

(333) отражения от кремния $l_{ext} = \lambda|\gamma_h| / (\pi|\chi_h|) = 8.03$ мкм. Угол Брэгга для выбранного отражения составляет 47.476°. Межплоскостное расстояние отражающих плоскостей равно $d = 0.1045$ нм. В расчетах размер пучка $w = 102$ мкм. Ширина засветки латеральной поверхности кристалла $L_x = 135$ мкм и боковой поверхности $L_z = 4$ мкм. Дифракционные интенсивности на всех расчетных картах RSM нормированы на единицу.

Численные расчеты карт RSM, а также их латеральных и вертикальных сечений выполнены для трех моделей чипов МЭМС. Согласно первой модели чип состоит из изогнутого кристалла кремния толщиной 4 мкм, в котором отсутствуют дополнительные градиентные деформации. Радиус изгиба $R = 1$ м. На карте RSM от данной структуры имеется уширенный главный максимум из-за изогнутости отражающих атомных плоскостей (рис. 2).

Вторая и третья модели чипов МЭМС представляют собой двухслойные системы. Верхней частью в обоих случаях является изогнутая область кристалла кремния толщиной 2 мкм с радиусом изгиба у поверхности $R = 1$ м. Изгиб отражающих атомных плоскостей на глубине $L_{z1} = 2$ мкм отсутствует. Для второй модели нижним слоем является кристалл толщиной $L_{z2} = 2$ мкм, в котором отсутствуют деформации кристаллической решетки. Карта RSM от второй модели показана на рис. 3.

Для третьей модели верхняя часть такая же, как для второй, однако нижний слой МЭМС имеет деформации с полем атомных смещений $u_{2z}(z) = \alpha z^2$,

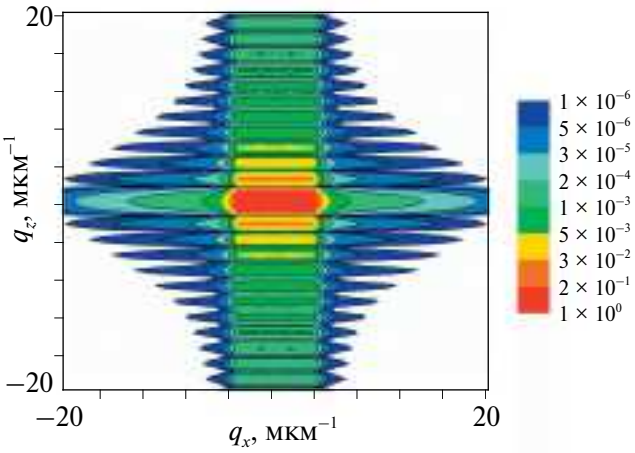

Рис. 2. Расчетная карта RSM от первой модели чипа МЭМС – изогнутого кристалла Si толщиной 4 мкм. Латеральная ширина кристалла L_x = 135 мкм.

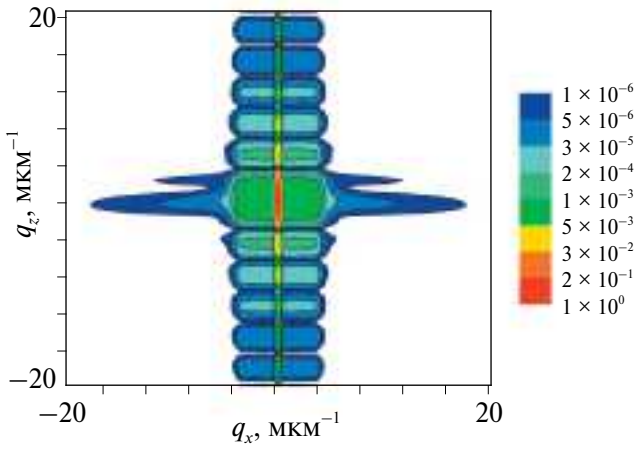

Рис. 3. Расчетная карта RSM от второй модели чипа МЭМС с изогнутой верхней частью толщиной 2 мкм. Нижним слоем является недеформированный кристалл толщиной L_{z2} = 2 мкм.

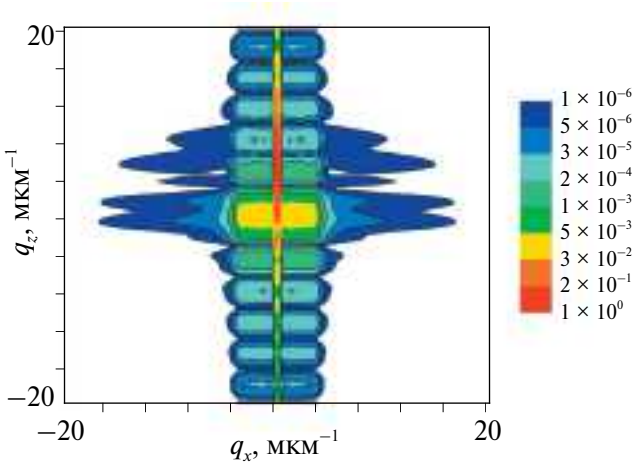

Рис. 4. Расчетная карта RSM от третьей модели чипа МЭМС с изогнутой верхней частью. Нижний слой имеет одномерный градиент деформации по глубине кристалла.

где $\alpha = 4 \times 10^{-5}$ мкм$^{-1}$. Рисунок 4 демонстрирует карту RSM от такой модели МЭМС.

В отличие от первой модели на картах RSM структур второй и третьей моделей имеются узкие вертикальные полосы, вызванные рентгеновской дифракцией на слое, в котором отсутствует изгиб отражающих атомных плоскостей.

На рис. 5 показаны q_x- и q_z-сечения карт RSM для трех рассмотренных моделей: полностью изогнутого чипа МЭМС (кривая *1*), чипа с искривленной верхней и совершенной нижней частями (кривая *2*), а также при наличии градиентной структуры в нижней части (кривая *3*). Наличие изгиба отражающих атомных плоскостей приводит к уширению профилей q_x-сечений (рис. 5а). На рис. 5б представлены вертикальные q_z-сечения карт RSM. При отсутствии дополнительных атомных смещений вглубь кристалла на q_z-сечениях наблюдаются типичные кинематические кривые качания (*1* и *2* на рис. 5б). Дополнительный однородный градиент деформации вглубь кристалла с увеличением периода решетки изменяет профиль кривой отражения и смещает его в сторону меньших углов, так как $q_z \sim -\varepsilon$ (кривая *3* на рис. 5б).

Расчетные карты RSM (рис. 3, 4) и q_x-сечения (рис. 5а, кривые *2*, *3*) согласуются с экспериментальными данными, полученными с использованием трехосевой рентгеновской дифракции высокого разрешения [2].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Обычно карты RSM рассчитываются с использованием двумерных рекуррентных соотношений или уравнений Такаги–Топена [4]. Такие вычисления требуют больших затрат компьютерного времени даже в случае тонких кристаллов. Предложенный метод расчетов карт RSM сокращает вычислительное время на три–четыре порядка. Например, вычисление карты RSM с помощью нового метода в кинематическом приближении (рис. 2) выполняется за 10–15 с. Аналогичный по точности расчет на основе уравнений Такаги–Топена с применением алгоритма “полушаговой производной” (300 шагов вдоль вертикального направления вычислительной сетки, 5000 шагов вдоль латерального направления и 100 × 100 разбиений по угловым координатам (q_x, q_z)) требует порядка 3–4 ч.

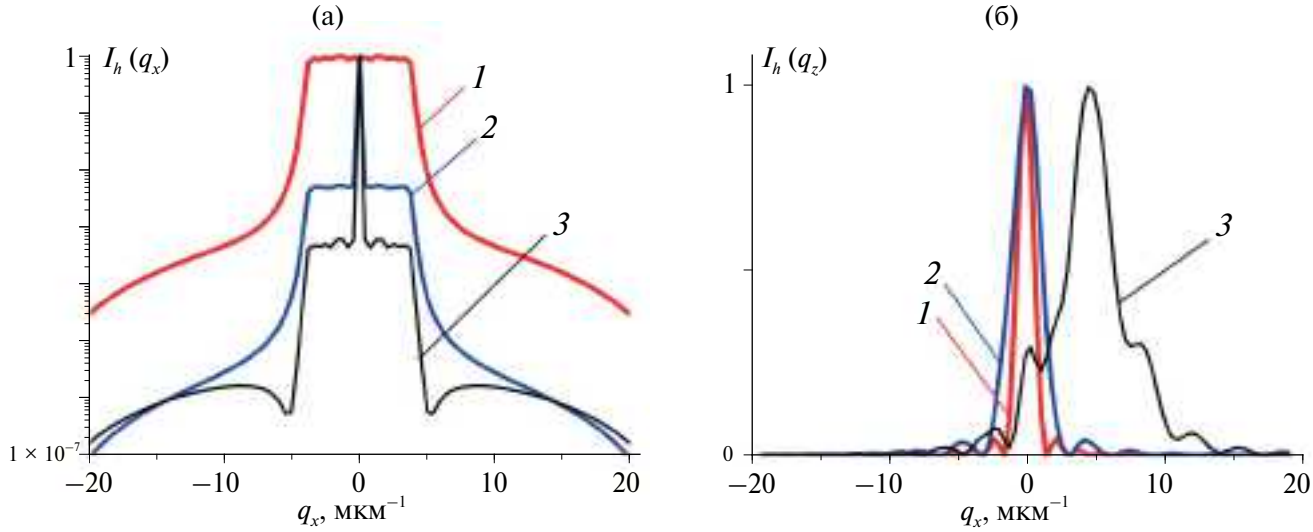

Рис. 5. Латеральные q_x-сечения (а) и вертикальные q_z-сечения (б) карт RSM от первой (*1*), второй (*2*) и третьей (*3*) моделей чипов МЭМС.

Поскольку на дифракционную картину от чипов МЭМС влияет достаточно много параметров, в частности изгиб некоторой области структуры, изменение параметров решетки по глубине кристалла, вариация толщин разных частей чипов МЭМС, дополнительные атомные смещения, вызванные процессами термического отжига, нарезки и склеивания, предложенный метод будет наиболее эффективным при анализе экспериментальных измерений карт RSM.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 23-22-00062, https://rscf.ru/project/23-22-00062/).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Neels A., Bourban G., Shea H. et al.* // Proc. Chem. 2009. V. 1. P. 820. https://doi.org/10.1016/j.proche.2009.07.204
2. *Neels A., Dommann A.* // Techn. Proc. NSTI-Nanotechnology, 2010. (Conference and Expo, Anaheim, USA, 21–24 June 2010.) V. 2. P. 182.
3. *Schifferle V., Dommann A., Neels A.* // Sci. Technol. Adv. Mater. 2017. V. 18. P. 219. https://doi.org/10.1080/14686996.2017.1282800
4. *Punegov V.I., Pavlov K.M., Karpov A.V., Faleev N.N.* // J. Appl. Cryst. 2017. V. 50. P. 1256. https://doi.org/10.1107/S1600576717010123
5. *Punegov V.I., Kolosov S.I.* // J. Appl. Cryst. 2022. V. 55. P. 320. https://doi.org/10.1107/S1600576722001686
6. *Punegov V.I., Kolosov S.I., Pavlov K.M.* // Acta Cryst. A. 2014. V. 70. P. 64. https://doi.org/10.1107/S2053273313030416
7. *Punegov V.I., Kolosov S.I., Pavlov K.M.* // J. Appl. Cryst. 2016. V. 49. P. 1190. https://doi.org/10.1107/S1600576716008396
8. *Takagi S.* // Acta Cryst. 1962. V. 15 P. 1311. https://doi.org/10.1107/S0365110X62003473
9. *Taupin D.* // Bull. Soc. Fr. Miner. Crist. 1964. V. 87. P. 469.
10. *Stepanov S., Forrest R.* // J. Appl. Cryst. 2008. V. 41. P. 958. https://doi.org/10.1107/S0021889808022231

FAST NUMERICAL CALCULATION OF X-RAY DIFFRACTION FROM CRYSTAL MICROSYSTEMS

V. I. Punegov*, D. M. Malkov

Institute of Physics and Mathematics, Federal Research Center "Komi Scientific Center, the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences," 167982 Syktyvkar, Russia

**e-mail: vpunegov@dm.komisc.ru*

Abstract. In the kinematical approximation, a method for rapid numerical calculation of X-ray diffraction from thin crystalline microsystems has been developed. The speed of calculating of reciprocal space maps using this approach is three to four orders of magnitude higher than calculations based on the Takagi–Taupin equations or two-dimensional recurrence relations. Within the framework of the obtained solutions, numerical simulation of X-ray reciprocal space mapping was performed for three models of crystal chips of microsystems.