

## Динамическая теория рентгеновской дифракции на полупроводниковом кристалле с металлической поверхностной решеткой

В.И. Пунегов

Коми Научный Центр УрО РАН, 167982, Сыктывкар, Россия

e-mail: vpunegov@dm.komisc.ru

Тонкопленочные линии металла на поверхности полупроводника имеют широкое применение в приборах микро- и нанoeлектроники, в частности, в технологии интегральных схем, а также при создании дифракционных решеток при условии периодического расположения металлических полос. В работе рассматривается строгая динамическая теория дифракции (ДТД) рентгеновских лучей на кристалле с металлической поверхностной решеткой с учетом периодических деформаций в приповерхностном слое полупроводника.

Ранее ДТД на кристалле с металлической поверхностной решеткой исследовалась на основе феноменологической модели [1]. Однако формирование сегментальной структуры рентгеновских полей в объеме кристалла в рамках этой модели являлось лишь предположением. Строгий подход к динамической дифракции в кристалле с периодически расположенными поглотителями без учета упругих деформаций в приповерхностном слое предложен в [2]. Однако на расчетной карте углового распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве отсутствовали некоторые дифракционные порядки (сателлиты), которые возникают на экспериментально измеренных картах. Для исследования этого несоответствия в данной работе предложен более сложный подход к ДТД.

Для описания периодических упругих атомных смещений использована модель модели краевых сил. Согласно этой модели, на краю металлической пленки, лежащей на полубесконечной подложке из другого материала, концентрируется сила в направлении, параллельном интерфейсу, вызывая упругие напряжения у края пленки. В результате получены аналитические решения для поля атомных смещений, используемые в уравнениях рентгеновской дифракции. Показано, что в одномодовом режиме (без учета динамического взаимодействия между отдельными дифракционными порядками) можно использовать процедуру рекуррентных соотношений.

Численное моделирование углового распределения интенсивности рассеяния выполнено для кристалла кремния с поверхностной решеткой из вольфрама. Период решетки 1 мкм, ширина металлической полосы 0.45 мкм, ее толщина 100 нм. Для вычисления углового распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве (Reciprocal Space Maps (RSM)) выбрана ширина рентгеновского пучка 100 мкм, число засвеченных периодов составляло  $N=400$ . При расчетах учитывалось влияние инструментальной функции.

В результате численного моделирования показано, что на картах RSM появляются интенсивные латеральные сателлиты, наблюдаемые на экспериментальных картах. Сделан вывод, что возникновение этих дифракционных порядков связано с упругими деформациями в приповерхностной области кристалла.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект 15-9-1-13) и РФФИ (проект 17-02-00090).

### Литература

1. Irzhak D. V., Knyasev M. A., Punegov V. I., Roshchupkin D. V., « X-ray diffraction by phase diffraction gratings», *J. Appl. Cryst.*, 48, 1159-1164 (2015)
2. Пунегов В.И., Колосов С.И., «Динамическая дифракция в кристалле с пространственной модуляцией падающей и отраженной рентгеновской волны», *Письма в ЖЭТФ*, 102, 159-166 (2015)