

На правах рукописи

ОКУНЕВ АЛЕКСЕЙ ОЛЕГОВИЧ

**АНАЛИЗ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ ПОЛУПРОВОДНИКОВ
ПО РЕНТГЕНОТОПОГРАФИЧЕСКИМ И
ПОЛЯРИЗАЦИОННО-ОПТИЧЕСКИМ РОЗЕТКАМ
КОНТРАСТА**

Специальность 01.04.01 – Приборы и методы экспериментальной физики

А в т о р е ф е р а т
диссертации на соискание учёной степени
доктора физико-математических наук

Ижевск – 2009

Работа выполнена в Совместной с ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН научной лаборатории рентгенографических методов исследования материалов электронной техники при Новгородском государственном университете им. Ярослава Мудрого

Научный консультант: доктор физико-математических наук, г.н.с.
Шульпина Ирэн Леонидовна,
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе
РАН

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор
Суворов Эрнест Витальевич,
Институт физики твёрдого тела РАН

доктор физико-математических наук, профессор
Кютт Регинальд Николаевич,
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе
РАН

доктор физико-математических наук, профессор
Пунегов Василий Ильич,
Коми научный центр Уральского Отделения
Российской Академии Наук

Ведущая организация: Институт проблем технологии микроэлектроники и
особочистых материалов РАН, Черноголовка

Защита состоится «__» _____ 2009 г. в __ часов в ауд. __ на заседании
диссертационного совета № ДМ 212.275.03 в Удмуртском государственном
университете по адресу: 426037, Ижевск, ул. Университетская, 1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Удмуртского государственного
университета

Автореферат разослан «__» _____ 2009 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
к.ф.-м.н., доцент



Крылов П.Н.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Одной из основных проблем физики реальных твёрдых тел является проблема зарождения дефектов кристаллической решётки и их влияния на структурночувствительные свойства кристаллов. Актуальность этой проблемы в последние годы ещё более возросла в связи с бурным развитием микро- и нанoeлектроники, внедрением новых полупроводниковых материалов и технологических процессов.

Образование дефектов кристаллической решётки, их размножение при высокотемпературных обработках кристалла и взаимодействие между собой и примесями является одной из основных причин снижения процента выхода и надёжности полупроводниковых приборов и интегральных микросхем, а также деградиационных процессов, протекающих в них. Поэтому разработка и совершенствование высокоразрешающих физических методов обнаружения и исследования дефектов структуры и их внедрение в практику научно-исследовательских и производственных лабораторий являются актуальными задачами физического материаловедения.

Особое значение в решении этих задач приобретают методы рентгеновской дифракционной топографии, которые, являясь прямыми и неразрушающими, позволяют получать наиболее объективные и детальные сведения о ростовых и технологически внесённых дефектах в кристаллах различной физико-химической природы.

Одним из наиболее чувствительных к различного рода дефектам в монокристаллах является метод рентгеновской топографии на основе эффекта Бормана (метод РТБ). Использование метода РТБ долгие годы сдерживалось отсутствием теории рентгенодифракционного контраста и требовало подтверждения полученных результатов другими независимыми методами. Применение в работах Л.Н. Данильчука розеточной методики для обнаружения и идентификации дефектов в кремнии и германии расширило возможности метода РТБ за счет получения специфического класса дифракционных изображений – розеток интенсивности. По розетке контраста определяются все основные параметры дислокации – кристаллографическое направление оси дислокации, направление, знак и величина вектора Бюргерса. Даже по одной топограмме с розетками контраста возможно получить такую информацию о дефекте (знак деформации решётки вблизи дефекта, природу микродефектов и дефектов упаковки и др.), которую затруднительно или невозможно получить другими методами.

Высокая чувствительность и большие возможности при анализе отдельных дефектов делают метод РТБ особенно привлекательным при исследовании высокосовершенных кристаллов. Следует ожидать, что дальнейшее развитие и применение розеточной методики для исследования других перспективных материалов электронной техники будет также высокоэффективно и даст новые научные ре-

зультаты.

Другим методом, в котором дефекты выявляются и интерпретируются по розеткам контраста, является метод поляризационно-оптического анализа (ПОА). Несмотря на развитую теорию, позволяющую достаточно полно охарактеризовать выявляемые дислокации, наглядность и простоту реализации, метод относительно редко применяется для исследования дефектов структуры полупроводников.

Высокосовершенные монокристаллы SiC с прямолинейными дислокациями являются перспективным материалом для проведения специальных дифракционных экспериментов, направленных на изучение механизмов формирования контраста. Отбор образцов и получение информации о характеристиках дефектов можно проводить методами РТБ и ПОА.

Наличие факторов, затрудняющих анализ экспериментальных топограмм и поляризационно-оптических снимков (зернистость, слабый контраст, фоновая неоднородность, дефекты фотоэмульсии), обуславливает необходимость развития и применения цифровых методов анализа этих изображений.

Цель работы. Целью данной диссертационной работы являются развитие методов РТБ и поляризационно-оптического анализа, повышение их информативности и надёжности применением для анализа экспериментальных данных и идентификации дефектов структуры компьютерного моделирования и цифровой обработки, дальнейшее развитие розеточных методик и их применение к исследованию перспективных материалов электронной техники, получение новой количественной и качественной информации об их реальной структуре, анализ особенностей изображений структурных дефектов в различных топографических методах.

Методы исследования. Основными методами исследования дефектов структуры полупроводников являлись: рентгено топографический метод на основе эффекта Бормана, розеточные методики на его основе, методы секционной и проекционной топографии Ланга, двухкристальная рентгено топография в геометрии Брэгга, дифрактометрия, поляризационно-оптический анализ (метод фотоупругости), оптическая микроскопия видимого и ИК-диапазона, селективное травление, моделирование на компьютере контраста интенсивности от дефектов структуры, цифровая обработка экспериментального контраста, основанная на анализе яркостных характеристик и частотном Фурье- и вейвлет-анализе.

Научная новизна. Диссертационная работа характеризуется следующей научной новизной.

1. Методом РТБ обнаружен, теоретически и экспериментально исследован контраст в виде розеток интенсивности от дислокаций различных типов в монокристаллах SiC, GaAs и монокристаллических сплавах (Bi+Sb), изучены закономерности изменения дислокационных розеток интенсивности в зависимости от ус-

ловий дифракции.

2. Методом РТБ обнаружен, изучен и систематизирован контраст интенсивности от когерентных включений в кристаллах SiC, GaAs и (Bi+Sb). На основании теоретического исследования контраста предложен и реализован метод идентификации различных когерентных включений. Микродефекты идентифицированы как когерентные выделения второй фазы, деформирующие матрицу как по типу внедрения, так и по типу вакансии.

3. Проведено моделирование теоретического контраста основных типов дефектов структуры исследованных материалов в методе РТБ. На основе моделирования разработаны методики идентификации дислокаций и микродефектов, определения их количественных и качественных параметров.

4. В методе РТБ теоретически и экспериментально исследован контраст интенсивности от отдельных частичных дислокаций, ограничивающих ростовые дефекты упаковки в Si, при распространении волнового рентгеновского поля вдоль их осей. Путём идентификации частичных дислокаций определена природа и структура простых и сложных ростовых дефектов упаковки.

5. Методом секционной топографии впервые получены и исследованы изображения дислокаций в монокристаллах SiC, выявлены особенности изображений краевых, винтовых и смешанных дислокаций, лежащих в плоскости рассеяния перпендикулярно вектору дифракции в методах секционной топографии и Ланга.

6. В монокристаллах SiC для основных типов дефектов структуры проведено сопоставление дифракционных изображений, полученных различными рентгено-топографическими методами: методом РТБ, методами секционной и проекционной топографии Ланга, методом двухкристальной топографии в геометрии Брэгга. Проведено сопоставление информативности и достоверности методов.

7. В монокристаллах SiC впервые методом поляризационно-оптического анализа обнаружены и исследованы фигуры двойного лучепреломления от индивидуальных дислокаций.

8. Для анализа изображений дефектов структуры, имеющих вид розеток интенсивности, и устранения «зашумляющих факторов» применены методы цифровой обработки, основанные на анализе яркостных характеристик и частотном вейвлет-анализе. Использование специально разработанных алгоритмов и программ позволило устранить фоновую неоднородность и зернистость экспериментального контраста, обнаружить ранее не выявляемые особенности изображений дефектов.

9. Для исследованных материалов проведена экспериментальная оценка чувствительности метода РТБ к макро- и микродеформациям, создаваемыми дефектами структуры.

10. Получены новые данные о дефектной структуре монокристаллов SiC, GaAs, (Bi+Sb) и Si.

Обоснованность и достоверность полученных результатов и выводов подтверждается применением комплекса рентгеновских методов и методик, большим количеством используемых отражений и образцов; применением контрольных и дополнительных методов ИК-микроскопии и металлографических наблюдений; хорошей корреляцией экспериментальных и теоретических результатов исследований; широким апробированием основных результатов работы на конференциях и семинарах различного ранга, включая международные.

Практическая значимость полученных результатов состоит в следующем:

– повышена информативность, достоверность метода РТБ и розеточных методик на его основе при выявлении дефектов в монокристаллах различной физико-химической природы, от широкозонных (SiC) до полуметаллов (Bi+Sb), за счёт применения компьютерного моделирования и цифровой обработки изображений;

– разработаны и опробованы на большом количестве образцов методики исследования структурных дефектов в полупроводниках, основанные на анализе изображений розеточного типа;

– для метода РТБ развита полуфеноменологическая теория контраста, позволяющая интерпретировать изображения розеточного типа и определить основные характеристики дефектов структуры;

– создан пакет программ для расчёта и построения теоретических розеток эффективной деформации и контраста от основных типов дефектов структуры;

– для исследованных материалов и различных условий эксперимента составлены атласы расчётных и экспериментальных рентгенотопографических и поляризационно-оптических изображений дефектов структуры, применение которых в условиях научных и производственных лабораторий значительно упрощает процесс идентификации дефектов, выявляемых методами РТБ и поляризационно-оптического анализа;

– для устранения факторов, затрудняющих идентификацию дефектов структуры (зернистость (гранулярность), слабый контраст и фоновую неоднородность топограмм и фотоснимков) применены разработанные методы цифровой обработки, основанные на анализе яркостных и частотных характеристик экспериментального контраста, позволившие выявить «тонкие» особенности экспериментального контраста; предложены методы оцифровки топограмм и микроснимков непосредственно с негатива;

– спроектирована и изготовлена сканирующая топографическая камера для кососимметричных, несимметричных и симметричных съёмки, позволяющая существенно увеличить информативность метода РТБ;

– модернизировано оборудование и оптимизирован режим резки монокристаллов карбида кремния, разработана компьютерная программа статистической обработки результатов измерений толщины пластин.

Результаты диссертационной работы могут представлять научный и практический интерес для специалистов, работающих в областях физического материаловедения и структурного анализа, компьютерного моделирования и цифровой обработки изображений, научных лабораторий институтов РАН и Минобрнауки РФ. В совместной с ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН научно-учебной лаборатории рентгенотопографических методов исследования материалов электронной техники разработанные методы регистрации дефектов структуры и определения их физической природы широко применяются при исследовании и диагностике различных полупроводниковых материалов, подготовке диссертаций, выпускных квалификационных работ, при чтении спецкурсов для студентов физических и инженерных специальностей НовГУ им. Ярослава Мудрого.

Основные положения, выносимые на защиту.

1. В кристаллах различной физико-химической природы (SiC, GaAs, (Bi+Sb) и Si) дефекты кристаллической решётки с медленно изменяющимися полями деформаций (полные и частичные дислокации, когерентные выделения второй фазы) формируют контраст в виде розеток интенсивности, который хорошо соответствует теоретическому контрасту, рассчитанному по модифицированным уравнениям Инденбома–Чамрова.

2. В кристаллах, исследованных методом РТБ, выявлены особенности изображений краевых, винтовых и смешанных дислокаций при различных условиях дифракции, по которым определяются их основные качественные и количественные характеристики.

3. Использование розеточной методики, основанной на явлении аномального прохождения рентгеновских лучей, позволяет путём идентификации частичных и вершинных дислокаций установить природу простых и сложных ростовых дефектов упаковки.

4. В методе секционной и проекционной топографии Ланга при различных условиях дифракции выявлены характерные особенности изображений дислокаций, позволяющие надёжно идентифицировать дефект и определить его характеристики.

5. Тип микровключений второй фазы, глубина их расположения в монокристалле и значение параметра ε , характеризующего упругую деформацию включения, могут быть определены розеточной методикой в условиях эффекта Бормана.

6. Ростовые микродефекты в кристаллах Si, выращенных методом Чохральского, SiC, GaAs и монокристаллических сплавах (Bi+Sb), регистрируемые методами рентгеновской топографии, представляют собой когерентные выделения второй фазы.

7. Методом фотоупругости в монокристаллах SiC идентифицируются

индивидуальные краевые и смешанные дислокации, параллельные оси [0001], а также имеющие углы наклона к оси [0001] до 50°.

8. Экспериментальная поляризационно-оптическая розетка содержит дополнительные слабые лепестки контраста, соответствующие лепесткам рентгенотопографической розетки, сформированным релаксационным полем смещений в кристалле.

Апробация работы. Основные результаты диссертационного исследования докладывались и обсуждались на следующих конференциях и семинарах:

1. Международном семинаре «Полупроводниковый карбид кремния и приборные структуры на его основе», Новгород, 1995;

2. Национальной конференции по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования материалов (РСНЭ'97), Москва–Дубна, 1997;

3. Международном семинаре «Карбид кремния и родственные материалы», Новгород, 1997;

4. I Международном семинаре «Актуальные проблемы прочности» имени В.А. Лихачева, Новгород, 1997;

5. Второй национальной конференции по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования материалов (РСНЭ–99), Москва, 1999;

6. III международном семинаре «Карбид кремния и родственные материалы» (ISSCRM–2000), Великий Новгород, 2000;

7. III Национальной конференции по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования материалов (РСНЭ–2001), Москва, 2001;

8. IV International Seminar on Silicon Carbide and Related Materials, Novgorod the Great, 2002;

9. Международном научном семинаре «Современные методы анализа дифракционных данных (рентгенотопография, дифрактометрия, электронная микроскопия)», Великий Новгород, 2002;

10. Третьей Российской конференции по материаловедению и физико-химическим основам технологий получения легированных кристаллов кремния и приборных структур на его основе «Кремний–2003», Москва, 2003;

11. 4 национальной конференции по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования материалов (РСНЭ–2003), Москва, 2003;

12. V International seminar on silicon carbide and related materials. Velikiy Novgorod. 2004;

13. Втором научном семинаре с международным участием «Современные

методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная микроскопия)», Великий Новгород, 2004;

14. 2-ой Украинской научной конференции по физике полупроводников, Черновцы, Украина, 2004;

15. Пятой Национальной конференции по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования наноматериалов и наносистем (РСНЭ НАНО–2005), Москва, 2005;

16. Третьем международном научном семинаре «Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная микроскопия)», Великий Новгород, 2006;

17. III Международной конференции по физике кристаллов «Кристаллофизика XXI века», Черногоровка, 2006;

18. Первой международной научной школе-семинаре «Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная микроскопия)», Великий Новгород, 2007;

19. Российском симпозиуме «Космическое материаловедение» – 2007 г. (КМ–2007), Калуга, 2007 г.

20. VI Национальной конференции по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования материалов (РСНЭ–2007), Москва, 2007;

21. Второй международной научной школе-семинаре «Современные методы анализа дифракционных данных (дифракционные методы для нанотехнологии)», Великий Новгород, 2008;

22. Четвёртом международном научном семинаре «Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная микроскопия)», Великий Новгород, 2008;

23. Ежегодных научных конференциях профессорско-преподавательского состава, аспирантов и студентов НовГУ им. Ярослава Мудрого, Великий Новгород, 1995–2006 гг.;

24. Научных семинарах Отделения физики диэлектриков и полупроводников ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, 2000–2006 гг.

Личный вклад автора. В диссертацию вошли результаты исследований, проведённых автором в Совместной с ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН научно-учебной лаборатории рентгенотопографических методов исследования материалов электронной техники. Автором поставлены научные задачи, выбраны пути их решения и предложены методики исследований. Автору принадлежат все приводимые результаты моделирования изображений дефектов, результаты дифракционных экспериментов, выполненных на кристаллах и эпитаксиальных структурах SiC. Исследования реальной структуры монокристаллов GaAs, Si и (Bi+Sb) выполнены ав-

тором совместно с к.ф.-м.н. А.Н. Буйловым, к.т.н. В.Г. Анисимовым и д.ф.-м.н., проф. Л.Н. Данильчуком. Автор принимал непосредственное участие в постановке задач и разработке методик цифровой обработки, основанных на анализе яркостных характеристик и частотном Фурье- и вейвлет-анализе, совместно с д.ф.-м.н., с.н.с. В.А. Ткалем, ведущими инженерами Ю.А. Дроздовым и Я.С. Белеховым.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 76 работ, из них 31 в академических журналах и журналах, рекомендованных ВАК, остальные представляют собой расширенные тезисы докладов, издано 5 научных монографий в соавторстве с другими сотрудниками совместной лаборатории. Перечень основных публикаций приведён в заключении.

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения, списка литературы, содержащего 293 наименования и приложения. Объём диссертации составляет 457 страниц, включая 145 рисунков на 147 страницах, 7 таблиц на 7 страницах, 2 листинга программ.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы исследований, сформулированы цель, основные защищаемые положения, научная новизна и практическая значимость работы, даются сведения об апробации работы и публикациях автора.

В первой главе «Прямые неразрушающие методы анализа индивидуальных дефектов кристаллической решётки монокристаллов» дана краткая характеристика методов рентгеновской топографии и поляризационно-оптического анализа, рассматриваются их физическая сущность, современное состояние, возможности при исследовании современных материалов электронной техники и тенденции дальнейшего развития. С точки зрения динамической теории рассеяния рассмотрены особенности явления аномального прохождения рентгеновских лучей. Особое внимание уделяется вопросам теории топографического контраста и существующим подходам к интерпретации дифракционных изображений структурных дефектов. Анализируются литературные данные по цифровой обработке дифракционных данных. Отмечается перспективность метода РТБ и его розеточных методик для исследования малодислокационных и бездислокационных материалов, а метода фотоупругости для исследования карбида кремния. На основании проведённого анализа сделаны выводы и поставлены задачи диссертационного исследования.

Во второй главе «Аппаратура и методы исследования, подготовка монокристаллов» приводятся данные по подготовке образцов для дифракционных и оптических исследований, выбору оптимальной геометрии съёмки и модернизации рентгеновского оборудования.

В п. 2.1. приводятся данные по режимам механической обработки и подго-

товке образцов карбида кремния для оптических и рентгено топографических исследований. В силу высокой твердости SiC особое внимание уделено операции «резка». Для применяемого промышленного оборудования (установка «STAX^{Q/1}» с использованием дисков с внутренней режущей кромкой типа ACM 60/40 толщиной 200 мкм) оптимизирован процесс резки монокристаллов карбида кремния.

На основании проведенных исследований процесса резки сделаны следующие выводы:

1. из реализованных на практике скоростей подачи монокристаллов SiC наиболее оптимальной с точки зрения качества поверхности и производительности процесса резки является скорость 0,12 мм/мин;

2. лучшие результаты операции «резка» получены при использовании в качестве охлаждающей жидкости смеси керосин-индустриальное масло в соотношении 1:1 и расходе 3–4 л/мин;

В п. 2.2. охарактеризованы методы идентификации политипов SiC и излагается разработанная методика юстировки кристалла для метода политипного анализа, основанного на регистрации рефлексов ряда 000 l ($l \neq n, 2n, 3n \dots$) (метод, предложенный Картенко Н.Ф. и др.). В согласии с результатами, полученными в упомянутой работе, для монокристаллов 4H-SiC и 6H-SiC наблюдались отражения 000 l с любыми значениями l , что характерно для пространственной группы $R\bar{3}m1$.

В п. 2.3. определена оптимальная геометрия съёмок исследуемых кристаллов при использовании одно- и двухкристального варианта метода РТБ, методов Ланга и двухкристальной топографии в геометрии Брэгга по схемам (n,-n) и (n,-m). Приведено описание оригинальной сканирующей рентгено топографической камеры для кососимметричных, симметричных и несимметричных съёмок, позволяющей существенно расширить возможности методов проекционной топографии (РТБ и Ланга).

В п. 2.4. формулируются требования к оборудованию для оцифровки экспериментальных топограмм и экспериментальных снимков и приводится описание использованной методики оцифровки негативов с использованием микроскопа МИН-8, цифрового фотоаппарата и специально изготовленного оптического переходного модуля.

В п. 2.5. выделены основные задачи цифровой обработки экспериментальных топограмм и оптических снимков, описываются наиболее эффективные методы цифровой обработки топографических и поляризационно-оптических изображений дефектов структуры монокристаллов, обеспечивающие устранение факторов, затрудняющих расшифровку экспериментального контраста и надёжную идентификацию дефектов: метод устранения зернистости топографического контраста с помощью фильтра с рекурсивным накоплением, метод устранения сильной фоновой неоднородности экспериментального контраста с помощью высокочас-

точной фильтрации с предварительной обработкой нелинейным фильтром, методы устранения зернистости и сильной фоновой неоднородности при помощи вейвлет-анализа. Показано, что вейвлет-анализ является наиболее перспективным инструментом цифровой обработки, позволяющим исследовать частотную природу экспериментального контраста. Рассмотрены критерии выбора полос пропускания фильтров, возможности анализа изображений, исходя из их особенностей. Сравнивается эффективность методов цифровой обработки и применения различных вейвлет-базисов. Методы цифровой обработки изображений широко использовались в данной диссертационной работе при выявлении «тонких» особенностей контраста от дефектов.

Третья глава посвящена моделированию контраста интенсивности основных типов дефектов структуры монокристаллов с медленно изменяющимися полями деформаций в методах РТБ и поляризационно-оптического анализа.

В п. 3.1. дано обоснование использования модифицированных уравнений Инденбома–Чамрова для расчёта изображений дефектов в методе РТБ. Показано для различных материалов, что в области слабых искажений вокруг дефекта, где рассеяние рентгеновских лучей имеет динамический характер, контраст интенсивности в отражённом и прошедшем пучках лучей может быть выражен формулами:

$$\begin{cases} \delta_D = \frac{I_D - I_\phi}{I_\phi} = \frac{-w_{2a} - w_{2b}}{\gamma_2}, \\ \delta_T = \frac{I_T - I_\phi}{I_\phi} = \frac{-w_{2a} + w_{2b}}{\gamma_2}. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь I_D , I_T – интенсивности отражённой и прямой волны в данной точке изображения; I_ϕ – фоновая интенсивность (интенсивность в неискажённом кристалле); w_{2a} , w_{2b} , γ_2 – параметры, характеризующие деформацию отражающих плоскостей у поверхности выхода лучей:

$$w_{2a} = \Lambda |\vec{g}| \frac{\partial U_g}{\partial x_g} \operatorname{tg} \theta; \quad w_{2b} = \Lambda \vec{g} \frac{\partial \vec{U}}{\partial x}; \quad \gamma_2 = \sqrt{1 + w_2^2}; \quad w_2 = w_{2a} + w_{2b}.$$

Для построения розеток эффективной разориентации и теоретических топограмм дефектов разработан пакет программ на языке Turbo Pascal 7.0 для персонального компьютера. При моделировании использовались 13- и 64-уровневые шкалы контраста интенсивности, средний уровень контраста соответствовал фоновой интенсивности I_ϕ . Программа позволяет моделировать розетки эффективной разориентации или контраста в любом заданном масштабе и предусматривает возможность построения интегрального изображения в случае, когда в аналитическое выражение для δ_D или δ_T входит переменная z .

Наибольший интерес представляет моделирование контраста интенсивности от дислокаций при преимущественном направлении распространения энергии волнового рентгеновского поля вдоль линий дислокаций. В этом случае формируется изображение в виде симметричной розетки контраста, по которому можно определить все основные параметры дислокации (кристаллографическое направление оси, направление, знак и модуль вектора Бюргерса). Разработка методов выявления дислокаций, выходящих на поверхность пластин, имеет важное значение, т.к. они наследуются эпитаксиальными слоями и оказывают влияние на параметры приборов.

П. 3.2. На основании данных теории дислокаций (Фридель, Хирт и Лоте, Иоффе, Шебани и Хазледине, Белов и Чамров) и уравнений (1) получены аналитические формулы для бормановского контраста интенсивности в изотропном приближении от краевых и винтовых дислокаций в кристаллах с кубической решёткой (Si, Ge, Bi+Sb) и анизотропных гексагональных кристаллах (SiC).

В качестве примера приведём формулы для расчёта контраста от правовинтовой дислокации, перпендикулярной базисной плоскости (0001) гексагонального кристалла:

$$\begin{aligned} \delta_D &= \left\{ -\frac{b\Lambda g}{2\pi v_3 r_3^2 (r_3 + z_3)^2} [xyt\theta + v_3 x(r_3 + z_3)] \right\} \times \\ &\times \left\{ 1 + \frac{b^2 \Lambda^2 g^2}{4\pi^2 v_3^2 r_3^2 (r_3 + z_3)^4} [xyt\theta + v_3 x(r_3 + z_3)]^2 \right\}^{-\frac{1}{2}}; \\ \delta_T &= \left\{ -\frac{b\Lambda g}{2\pi v_3 r_3^2 (r_3 + z_3)^2} [xyt\theta - v_3 x(r_3 + z_3)] \right\} \times \\ &\times \left\{ 1 + \frac{b^2 \Lambda^2 g^2}{4\pi^2 v_3^2 r_3^2 (r_3 + z_3)^4} [xyt\theta - v_3 x(r_3 + z_3)]^2 \right\}^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (2)$$

$$\quad (3)$$

где δ_D, δ_T – контраст интенсивности в отражённом и прямом пучках лучей, θ – угол Брэгга, \vec{b} – вектор Бюргерса дислокации, \vec{g} – вектор дифракции, Λ – длина

экстинкции, $v_3 = \left(\frac{c_{66}}{c_{44}} \right)^{1/2}$; $r^2 = x^2 + y^2$, $r_3^2 = r^2 + z_3^2$, $z_3 = v_3 z$; c_{ij} – стандартные

упругие постоянные кристалла. Теоретические топограммы правовинтовой дислокации в отражённом и прямом пучках лучей приведены на рис. 1, а, б. Из анализа формул (2), (3) и расчётных изображений следует, что контраст лепестков определяется знаком дислокации (правовинтовая или левовинтовая) и типом рефлекса (прямой или отражённый).

Собственное поле краевой дислокации (поле деформаций в объёме кристалла) обуславливает основные лепестки дислокационных розеток. В случае коллине-

арности векторов \vec{g} и \vec{b} линия нулевого контраста розетки совпадает с положени-

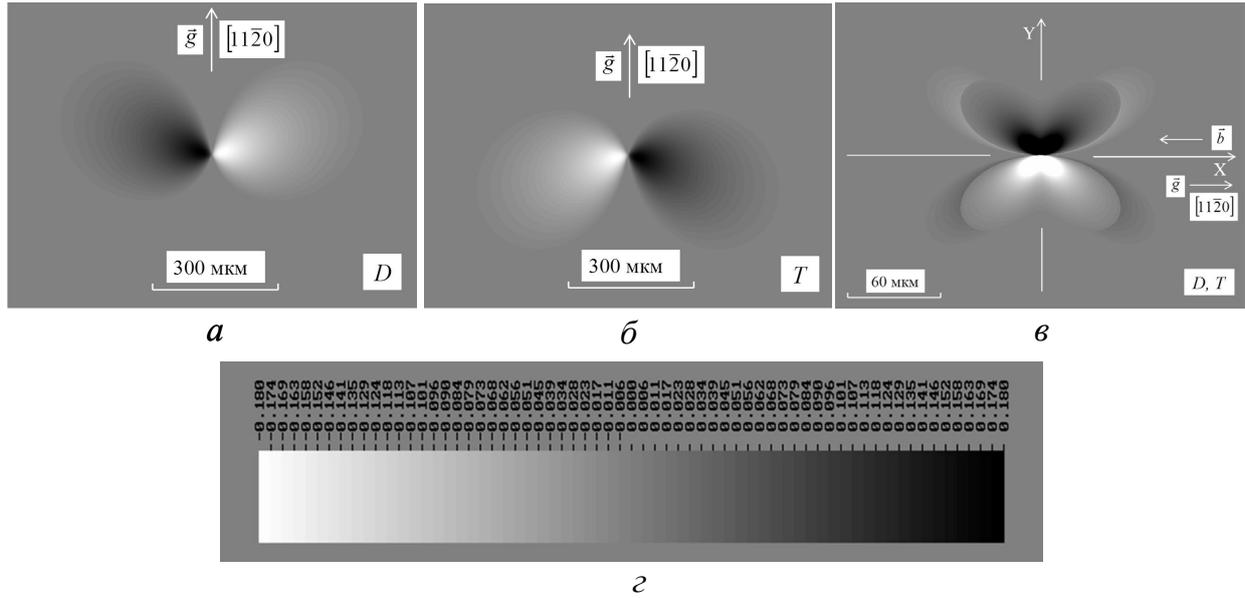


Рис. 1. Теоретические топограммы правовинтовой дислокации в 6H-SiC в отражённом (а) и прошедшем (б) пучках лучей; топограмма краевой дислокации в SiC (с учётом релаксационного поля деформаций); шкала контраста (г).

ем плоскости скольжения дислокации (рис. 1, в). Моделирование показало, что при наличии угла ψ между плоскостью скольжения дислокации и вектором Бюргерса линия нулевого контраста розетки не совпадает, но закономерно связана с положением плоскости скольжения, что позволяет определить направления и знаки векторов Бюргерса для случаев $\psi = 30^\circ$ (дислокации системы скольжения $\langle \bar{1}010 \rangle \{ \bar{1}2\bar{1}0 \}$ в SiC), $\psi = 35^\circ$ (дислокации системы скольжения $\langle 101 \rangle \{ 111 \}$ в (Bi+Sb) и кристаллах с ГЦК решёткой), $\psi = 45^\circ$ (дислокации систем скольжения $\langle \bar{1}00 \rangle \{ 0\bar{1}0 \}$ и $\langle 110 \rangle \{ 1\bar{1}0 \}$ в GaAs), $\psi = 60^\circ$ (дислокации системы скольжения $\langle 11\bar{2}0 \rangle \{ 1\bar{1}00 \}$ в SiC) и др. В зависимости от угла ψ розетка является четырёх- или шестилепестковой, контраст лепестков определяется знаком вектора Бюргерса: области сжатия решётки вблизи экстраполуплоскости соответствует чёрный лепесток (рис. 2). Переход от отражения $hki\ell$ к $\bar{h}\bar{k}\bar{i}\bar{\ell}$ -отражению не приводит к изменению формы и контраста лепестков розетки.

В общем случае розетка контраста от краевой дислокации содержит дополнительные лепестки контраста, обусловленные релаксацией напряжений на выходной для рентгеновских лучей поверхности кристалла и появлением дополнительных компонент поля смещений, например, лепестки контраста, расположенные вдоль плоскости скольжения дислокации на рис. 1, в. Моделирование демонстрирует также наличие двух лепестков, вытянутых вдоль экстраполуплоскости и её продолжения по другую сторону плоскости скольжения в розетках контраста от дислокаций в кристаллах Si и GaAs.

Проанализировано изменение изображения дислокации при отклонении её оси от направления потока энергии в кристалле. На рис. 3 приведены расчётные розетки контраста от левовинтовой дислокации в отражённом пучке лучей в 6H-SiC и правовинтовых дислокаций в GaAs. При повороте оси дислокации относительно поверхности кристалла как в плоскости рассеяния (рис. 3, б, в), так и в перпендикулярной к ней плоскости (рис. 3, а), происходит изменение формы и размера

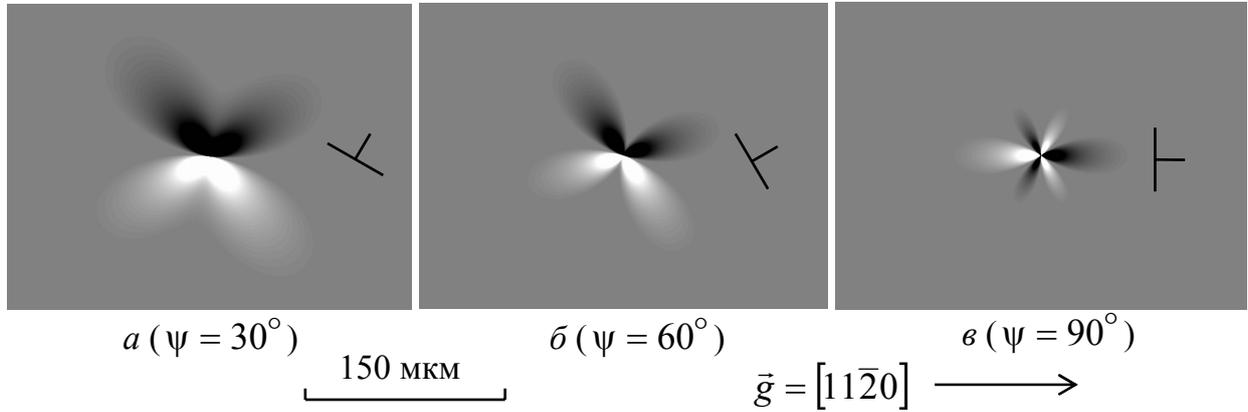


Рис. 2. Контраст, обусловленный собственным полем смещений вокруг краевой дислокации в 6H-SiC, при различных углах ψ между плоскостью скольжения дислокации и вектором дифракции.

двух основных лепестков розетки контраста, сопровождаемое появлением дополнительных лепестков при малых углах наклона к поверхности. Если вектор дифракции \bar{g} располагается параллельно оси OX , изображение представляет собой двухлепестковую розетку для диапазона углов α от 0 до 25° . Начиная с $\alpha = 26^\circ$, появляется дополнительная пара лепестков, и такой характер контраста сохраняется до $\alpha = 75^\circ$ градусов. При дальнейшем увеличении угла контраст также описывается двухлепестковой розеткой.

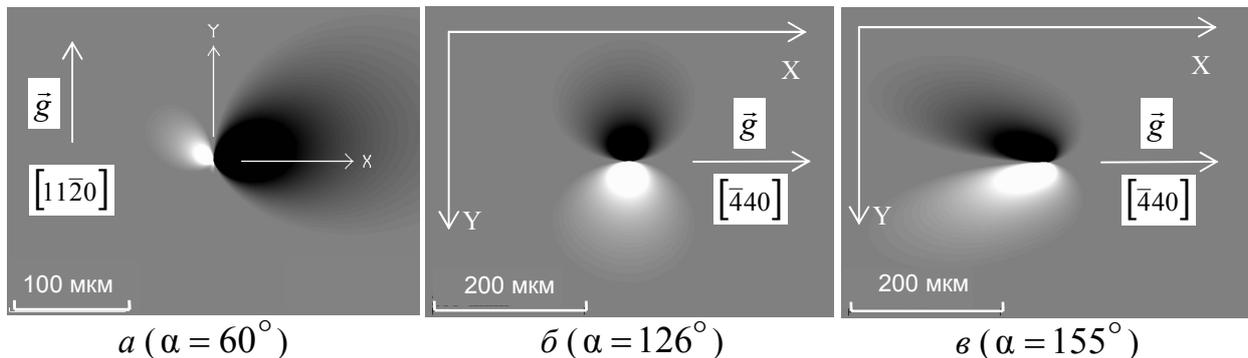


Рис. 3. Изменение контраста от винтовой дислокации при наклоне её оси на угол α к поверхности в плоскости XOZ в 6H-SiC (а) и GaAs (б, в).

Моделирование изображений винтовых дислокаций, оси которых отклоняются от перпендикуляра к поверхности кристалла, показало высокую эффективность при идентификации 30-градусных дислокаций с осями $\langle \bar{1}12 \rangle$ и векторами

Бюргера $\vec{b} = a/2\langle 011 \rangle$ в кристаллах GaAs.

На рис. 4. показано изменение розетки контраста от краевой дислокации с вектором Бюргера $\vec{b} = \frac{a}{3}[11\bar{2}0]$ и плоскостью скольжения $[1\bar{1}00]$ в SiC при наклоне оси дислокации к поверхности как в плоскости рассеяния (рис 4, а, б), так и в отражающей плоскости. Учитывались только деформации в области, расположенной вблизи точки пересечения оси дислокации с выходной для рентгеновских лучей поверхностью кристалла ($z = 0$), наклон проводился в плоскости XOZ . Видно, что для изображения характерно вытягивание лепестков в сторону наклона оси дислокации.

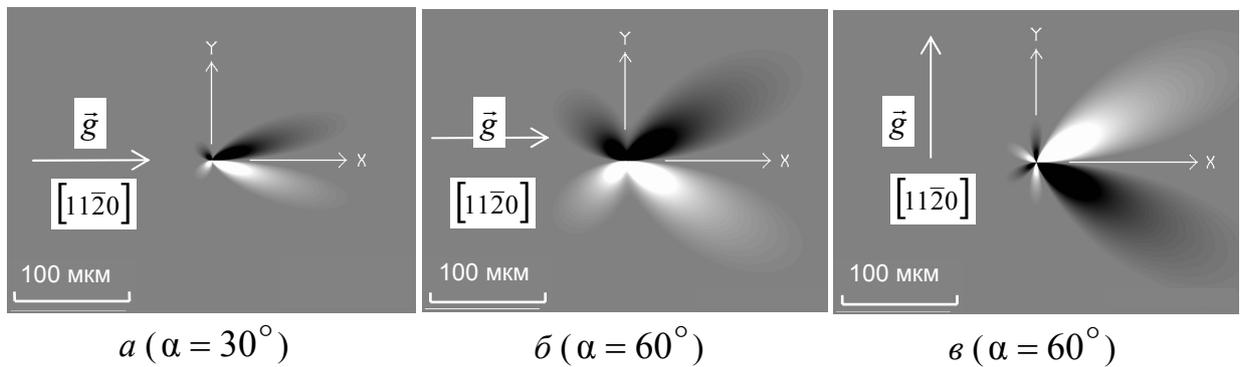


Рис. 4. Изменение контраста от краевой дислокации при наклоне её оси на угол α к поверхности в плоскости XOZ в 6H-SiC.

На примере дислокационной полупетли в толстых эпитаксиальных слоях Ge показана возможность расчёта по уравнениям (1) результирующего контраста от перекрывающихся полей деформаций близко расположенных дефектов кристаллической решётки (рис. 5). Расчёт проведён для случая, когда боковые участки полупетли совпадают с направлением вектора Пойнтинга.

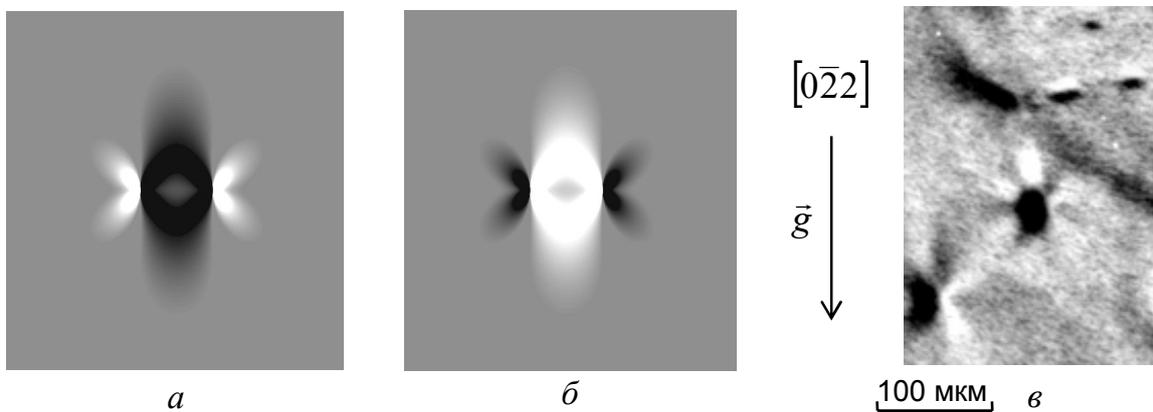


Рис. 5. Расчётный контраст интенсивности от дислокационных полупетель междуузельного (а) и вакансионного (б) типов и экспериментальная топограмма полупетли вакансионного типа в эпитаксиальном слое Ge (позитивный контраст) (в).

В п. 3.3 на основе уравнений (1) исследованы теоретические розетки интенсивности от микродефектов (МД) *A*- и *B*-типов (когерентных включений второй фазы) в кристаллах Si, GaAs, SiC и (Bi+Sb). Теоретически показана возможность однозначного определения методом РТБ знака деформации матрицы, создаваемой микродефектом, или, другими словами, природы МД и показана принципиальная возможность регистрации методом РТБ микродефектов *B*-типа. Составлены атласы расчётных рентгенотопографических изображений МД *A*- и *B*-типов. Показана принципиальная возможность определения параметра несоответствия ϵ для микродефектов. Пример теоретических топограмм МД в SiC приведён на рис. 6.

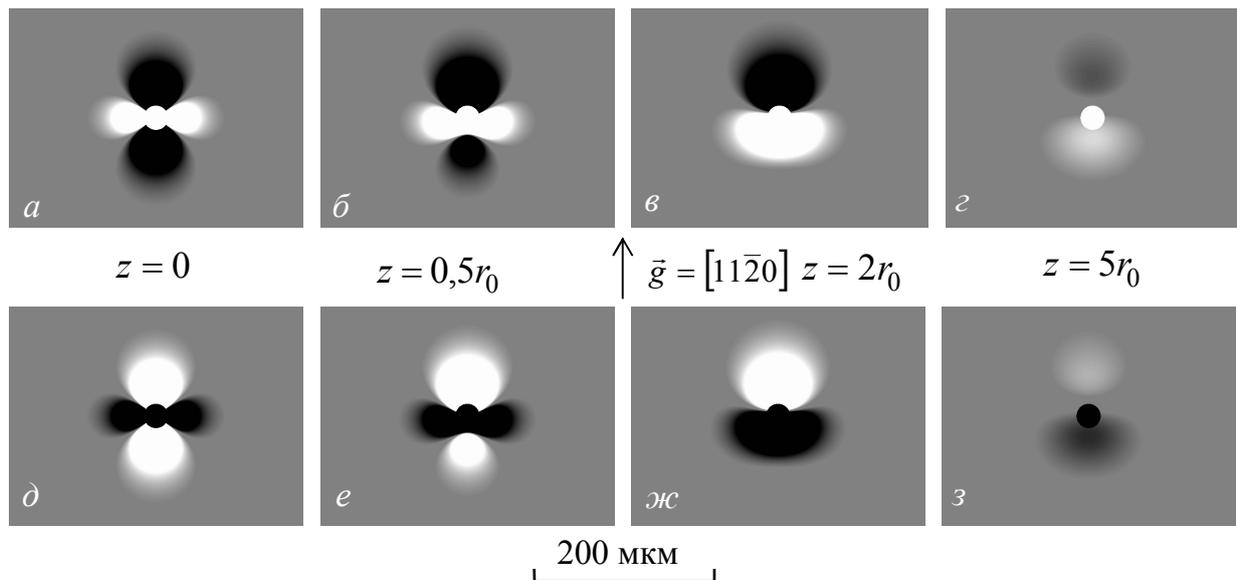


Рис. 6. Теоретические топограммы включений в 6H-SiC типа «внедрения» (а, б, в, г) и типа «вакансии» (д, е, ж, з) в отражённом пучке рентгеновских лучей.

В п. 3.4 для интерпретации розеток двойного лучепреломления вокруг дислокаций, перпендикулярных поверхности (0001) пластин SiC, проведено моделирование поляризационно-оптических изображений дислокаций в общем случае (при углах между плоскостью скольжения дислокации и плоскостью колебаний в одном из николей, отличных от 0 или 45°). На основе простой геометрической теории контраста проведён теоретический анализ линейно-протяжённых фигур двойного лучепреломления от смешанных дислокаций, расположенных наклонно к направлению наблюдения.

В четвёртой главе «Исследование дефектов структуры монокристаллов методом РТБ» проводится сопоставление экспериментальных изображений розеточного типа, зафиксированных методом РТБ, с результатами моделирования и изложены результаты исследования реальной структуры SiC, GaAs, (Bi+Sb) и Si.

П. 4.1. Исследованы особенности контраста от индивидуальных дислокаций в монокристаллах 6H-SiC, выращенных методом Лели (*n*-тип проводимости, легирование азотом с концентрацией нескомпенсированных доноров $N_d - N_a =$

$8 \cdot 10^{17} - 3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$).

Дислокации, оси которых параллельны или почти параллельны направлению $\langle 0001 \rangle$, формировали на топограммах, полученных методом РТБ, розетки контраста, по которым проведена идентификация типов дислокаций. В полном соответствии с результатами моделирования винтовая дислокация в карбиде кремния при распространении энергии волнового поля внутри кристалла вдоль ее оси формирует на топограмме двухлепестковую розетку чёрно-белого контраста, плоскость антисимметрии которой перпендикулярна отражающим плоскостям (рис. 7). В кристаллах SiC экспериментально фиксировались винтовые дислокации разных знаков – в соответствии с формулами (2)–(3) левовинтовая дислокация имеет контраст интенсивности, противоположный правовинтовой. Переход от отражения $hkil$ к $\bar{h}\bar{k}\bar{i}\bar{l}$ -отражению также изменяет контраст розетки на противоположный. Большой размер изображения дислокации, обусловленный большой величиной вектора Бюргерса $|\vec{b}| = 1,51 \text{ нм}$, позволяет выявить дополнительные детали розетки контраста, не обнаруживаемые на изображениях дислокаций малой мощности. Так, на изображениях винтовых дислокаций (рис. 7), помимо двух круглых лепестков большого размера, видны ещё два длинных узких лепестка более слабого контраста, вытянутых в направлении вектора \vec{g} . Компьютерная обработка изображений винтовых дислокаций в SiC позволила выявить, кроме упомянутых, ещё два лепестка, вытянутых в противоположном направлении.

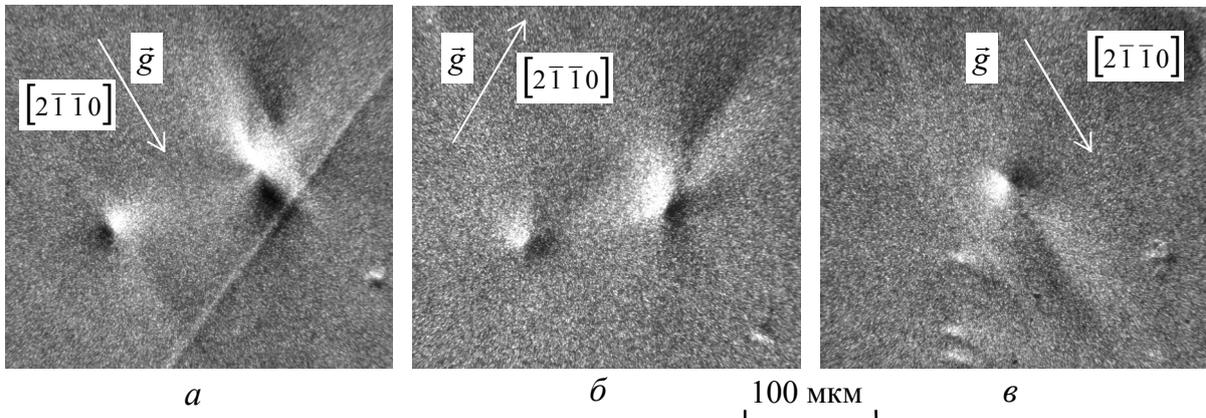


Рис. 7. Экспериментальные розетки интенсивности от левовинтовой дислокации и группы краевых дислокаций (а, б), правовинтовой дислокации (в) в 6H-SiC.

Экспериментальные изображения краевых дислокаций в карбиде кремния в отражённом пучке лучей приведены на рис. 8, 9. Краевая дислокация с вектором Бюргерса \vec{b} , ориентированным вдоль направления $[\bar{1}010]$, и плоскостью скольжения $[\bar{1}2\bar{1}0]$ формирует при углах между \vec{g} и \vec{b} $\frac{\pi}{6}$ или $\frac{5\pi}{6}$ несимметричную четырехлепестковую розетку интенсивности, линия нулевого контраста которой соот-

ветствует плоскости скольжения дислокации (рис. 8, а) В случае $\vec{g} \cdot \vec{b} = 2$ краевая дислокация с вектором Бюргера $\vec{b} = \frac{a}{3} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ и плоскостью скольжения $\{1\bar{1}00\}$ создаёт на топограмме шестилепестковую розетку чёрно-белого контраста, плоскость антисимметрии которой совпадает с плоскостью скольжения дислокации (рис. 9). Особенности изображений на прямом и отражённом пучках полностью соответствуют расчётным (рис. 1, в). При выполнении критерия $\vec{g} \cdot \vec{b} = 1$ дислокации данного типа формируют характерную крестообразную розетку интенсивности (рис. 8, б), основная зона контраста которой соответствует теоретической топограмме на рис. 2, б.

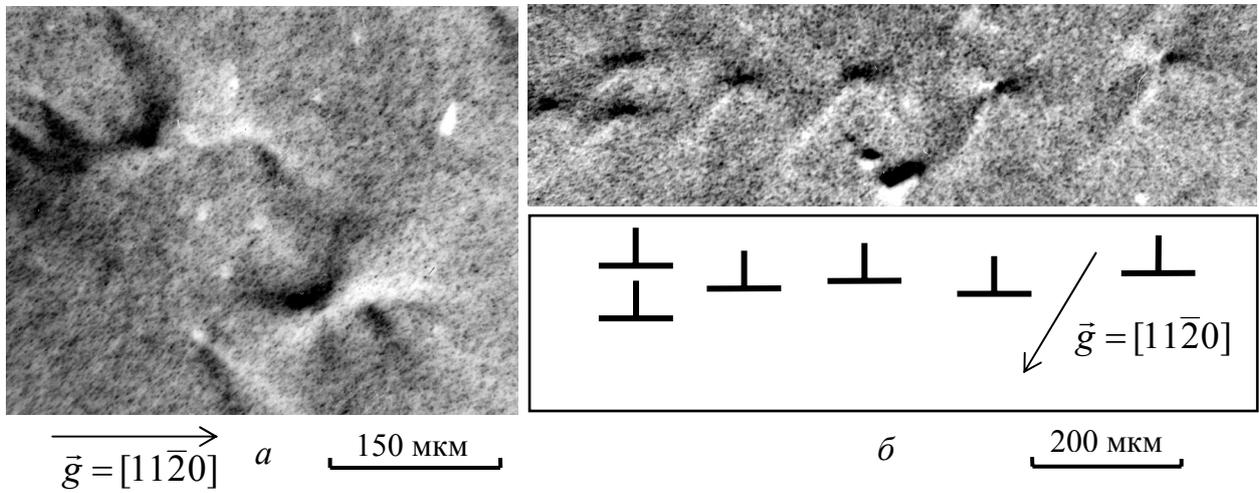


Рис. 8. Изображения краевых дислокаций системы скольжения $(\bar{1}2\bar{1}0)[\bar{1}010]$ (вектор \vec{g} составляет с плоскостью скольжения угол 30°) (а) и краевых дислокаций с вектором Бюргера $\vec{b} = \frac{a}{3} [1\bar{2}10]$ в случае $\vec{g}\vec{b} = 1$ (вектор \vec{g} составляет с плоскостью скольжения угол 60°) в 6H-SiC (б) (позитивный контраст).

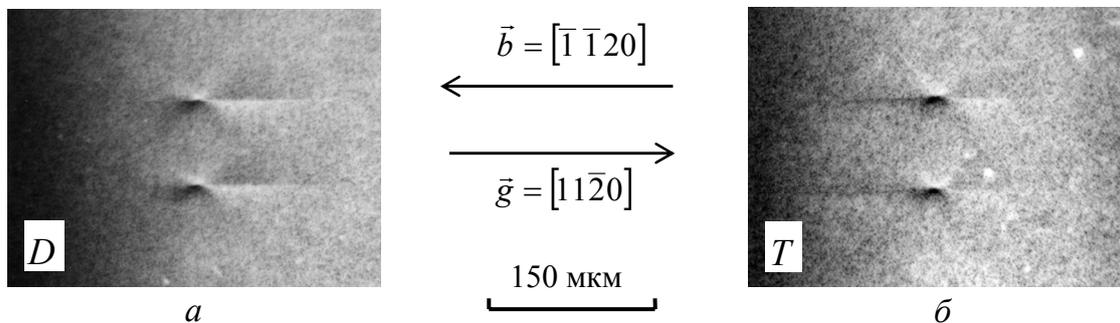


Рис. 9. Краевые дислокации в 6H-SiC с осью $[0001]$ и вектором Бюргера $\vec{b} = \frac{a}{3} [\bar{1}\bar{1}\bar{2}0]$, зафиксированные в отражённом (а) и прямом (б) пучках рентгеновских лучей (позитивный контраст).

Для расширения возможностей интерпретации экспериментальных топограмм исследовано и описано изменение контраста от дислокаций системы скольжения $\{\bar{1}010\} < \bar{1}2\bar{1}0 >$ при углах между осью дислокации и направлением распространения волнового рентгеновского поля в кристалле $0 - 30^\circ$.

Проведено сравнение топограмм, полученных различными рентгенотопографическими методами. На примере погасания на топограмме по Лангу, снятой на при использовании отражения $11\bar{2}0$, изображений дислокаций, имеющих вектор Бюргерса $[2\bar{1}\bar{1}0]$, показана меньшая достоверность результатов, полученных методом погасаний с использованием экстинкционного контраста, чем «розеточной» методики. Прямолинейные дислокации, расположенные перпендикулярно и наклонно к поверхности (0001) образца и формирующие розетки контраста на рентгенотопограммах, полученных методом РТБ, не фиксировались методом двухкристалльной рентгеновской топографии в геометрии Брэгга (на отражение) по схеме (n,-m). Этим методом регистрировались дислокации, расположенные параллельно поверхности кристалла, а также контраст, обусловленный микрорельефом поверхности кристалла (образовавшимся при удалении нарушенного слоя химическим травлением или испарением в вакууме).

Проведенные методами РТБ и поляризационно-оптического анализа исследования показывают, что дислокационная структура карбида кремния политипа 6Н в значительной мере подобна дислокационной структуре вюрцита; идентифицировано восемь типов полных дислокаций из одиннадцати теоретически предсказанных.

Исследовались эпитаксиальные слои 6Н-SiC, выращенные сублимационным вариантом «сэндвич-метода» на подложках карбида кремния политипа 6Н в Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе РАН. Эпитаксиальные слои имели *n*-тип проводимости и концентрацию нескомпенсированной донорной примеси $(0,5-2) \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Толщина слоев составляла ~ 20 мкм. Методом РТБ выявлена упругая деформация гомоэпитаксиальной структуры, вызванная различием параметров подложки и пленки. Основными классами дефектов в эпитаксиальных слоях являются дислокации и дефекты упаковки. В гомоэпитаксиальных слоях 6Н-SiC выявлены дислокации, обусловленные механическими дефектами подложки (царапинами) и крупными включениями второй фазы, расположенными вблизи поверхности подложки. Дефекты упаковки на топограммах, полученных методом РТБ, имели вид незамкнутых треугольников без контраста внутри. Одна из сторон этих треугольников ориентирована приблизительно вдоль направления $[11\bar{2}0]$, другая составляет с ней углы, близкие к 60° , 150° , или 30° .

Сопоставление экспериментальных и теоретических топограмм дислокаций в GaAs показало их полное соответствие. Применение розеточной методики позволило выявить в кристалле GaAs(In) и исследовать особенности контраста от дисло-

каций с осями $[001]$ и векторами Бюргерса $\vec{b} = \frac{a}{2}[110]$ (указаны цифрами 4–8 на рис. 10) и векторами Бюргерса $\vec{b} = a[\bar{1}00]$ (1–3).

Методами рентгеновской топографии и селективного травления была исследована дефектная структура монокристаллических сплавов (Bi+Sb+Sn) с различным содержанием Sb и Sn. Так как технология выращивания монокристаллов (Bi+Sb+Sn) в полностью запаянных кварцевых трубочках с монокристаллической затравкой позволяет получить относительно совершенный материал (плотность дислокаций $N_d < 10^3 \text{ см}^{-2}$), то впервые для изучения дефектов структуры в таких кристаллах был применён метод РТБ. В монокристаллах сплавов (Bi+Sb+Sn), содержащих до 20 ат. % Sb, методом РТБ были обнаружены полосы скольжения, сформированные 60-градусными дислокациями системы скольжения $\langle 101 \rangle \{111\}$. Интерпретированы изображения индивидуальных краевых, винтовых и 60-градусных дислокаций с осями $\langle 101 \rangle$, $\langle 010 \rangle$ и $\langle \bar{1}2\bar{1} \rangle$.

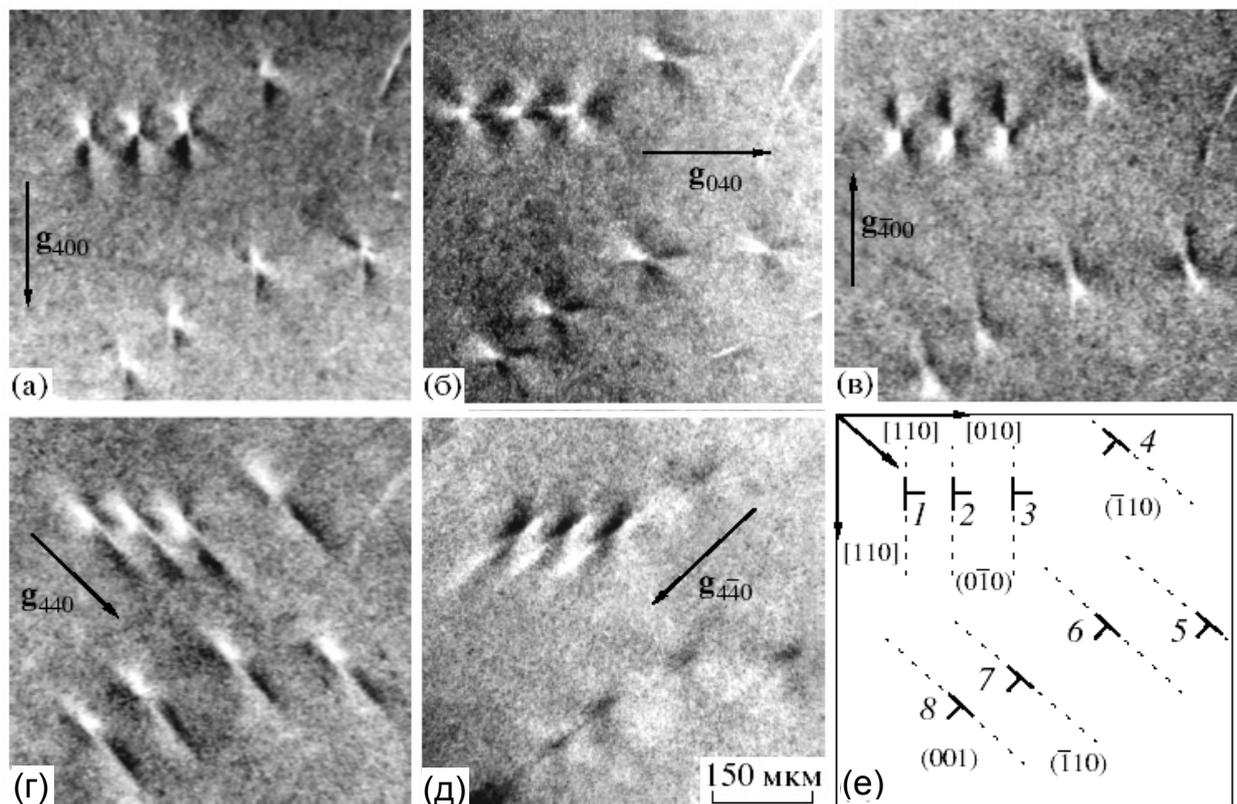


Рис. 10. Топограммы краевых дислокаций в малодислокационном кристалле GaAs (a – d), полученные в отражённом пучке лучей (метод РТБ) и схема расположения дислокаций в кристалле (e). Масштабная метка одинакова для всех топограмм.

Для исследования монокристаллов (Bi+Sb), выращенных методом зонной перекристаллизации в лодочках с монокристаллическими затравками и содержащих повышенную плотность ростовых дефектов ($N_d \leq 5 \cdot 10^5 \text{ см}^{-2}$), использован метод на отражение в установке кристаллов ($n, -n$). Выявлены и интерпретированы

дефекты кристаллической решётки всех четырёх классов: квазиточечные (микродефекты *A*- и *B*-типа), линейные (дислокации), плоскостные (простые и сложные дефекты упаковки), объёмные (макрополя упругих и термоупругих напряжений), сегрегационные полосы, ступеньки скола и ряд других. Сопоставление результатов исследования монокристаллов Bi+Sb , выращенных методами зонной перекристаллизации в лодочках и в трубках, показывает, что последний метод обеспечивает более высокое качество монокристаллов.

В п. 4.2 экспериментально и теоретически исследован контраст от частичных дислокаций, входящих в состав ростовых дефектов упаковки (ДУ) в монокристаллах Si , выращенных методом Чохральского. Представлены результаты анализа возможных структур простых и сложных ростовых ДУ в монокристаллах с решёткой типа алмаза (простые ДУ типа вычитания и внедрения, барьеры Ломера–Коттрелла и Хирта). При рассмотрении теоретических моделей ДУ мы исходим из того, что ДУ ограничен разноимёнными частичными дислокациями, у которых сумма векторов Бюргерса равна нулю (т.е. рассматриваем наиболее вероятный тип дефекта упаковки). Из анализа структур ДУ следует, что природа простых и сложных ДУ жёстко связана с природой ограничивающих их частичных и вершинных дислокаций. Идентифицировав природу частичных дислокаций, можно определить природу ДУ. Для моделирования изображений частичных дислокаций был применён тот же подход, который описан в главе 3 для полных дислокаций. Исходя из теоретических моделей дефектов, построены атласы теоретических топограмм простых и сложных дефектов упаковки.

Экспериментально исследованы дефекты упаковки и ограничивающие их частичные и вершинные дислокации в бездислокационных монокристаллах Si , выращенных по методу Чохральского в направлении $[111]$, в которых на определённом этапе осуществлялся срыв бездислокационного роста и генерировались гигантские ДУ, проходящие по плоскостям $\{111\}$ через весь монокристалл.

Экспериментально зафиксированы простые ДУ типа вычитания и внедрения, ограниченные частичными краевыми дислокациями Франка и Шокли с осями $\langle 211 \rangle$, $\langle \bar{1}01 \rangle$ и барьер Хирта типа внедрения с вершинной дислокацией, имеющей вектор Бюргерса $\vec{b} = \frac{a}{3}[0\bar{1}0]$.

В п. 4.3. проведён анализ экспериментальных изображений микродефектов в кристаллах Si , выращенных методом Чохральского, SiC , GaAs и монокристаллических сплавах (Bi+Sb). Показано, что выявляемые методами топографии и ИК-микроскопии ростовые микродефекты в этих материалах являются когерентными включениями второй фазы и могут быть классифицированы по размеру и знаку деформации как микродефекты $+A-$, $-A-$, $+B-$, $-B-$ типов.

Для анализа контраста от микродефектов (МД) в методе РТБ были исследованы

монокристаллы технического бездислокационного кремния марок КЭФ-20 и КДБ-10, выращенные по методу Чохральского в направлении [001], в которых селективным травлением были обнаружены повышенные концентрации МД *A*- и *B*-типов. Сопоставление измеренных в ИК-микроскопе истинных размеров включений и размеров их изображений в методе РТБ с результатами моделирования даёт значения параметра ε для этих дефектов, находящиеся в диапазоне $1,8 \cdot 10^{-5}$ – $2,0 \cdot 10^{-4}$. Статистические данные о концентрации микродефектов приведены в таблице 1.

+*A*- и +*B*-микродефекты в кремнии, выращенном по методу Чохральского, являются в основном выделениями SiO_2 в фазе β -кристобалита с добавкой β -SiC, а –*A*- и –*B*- микродефекты состоят преимущественно из β -SiC с добавкой, по видимому, SiO_2 .

Таблица 1

Классификация ростовых микродефектов в монокристаллах кремния, выращенных методом Чохральского

Характеристики микродефектов	Типы микродефектов			
	+ <i>A</i>	– <i>A</i>	+ <i>B</i>	– <i>B</i>
Форма	Сфера или удлинённый многогранник			
Размеры, мкм	10–100	10–100	1–10	1–10
Концентрация, см ^{–3}	10^4 – 10^5	10^2 – 10^3	10^6 – 10^7	10^4 – 10^5
Природа	меж-узельная	вакансионная	межузельная	вакансионная

При исследовании методом РТБ относительно совершенных (плотность дислокаций $N_d < 10^3 \text{ см}^{-2}$) кристаллов 6H-SiC, выращенных по методу Лели, на топограммах выявлены розетки интенсивности недислокационной природы (рис. 11). Сопоставление экспериментальных розеток интенсивности с теоретическими топограммами показало, что данный контраст сформирован когерентными включениями второй фазы, деформирующими кристалл как по типу «внедрения», так и по типу «вакансии». По геометрическому критерию данные включения классифицированы как микродефекты *A*- и *B*-типов. Плотность микродефектов *A*-типа на малодислокационных участках пластин составляла $\sim 10 \text{ см}^{-2}$, плотность микродефектов *B*-типа достигала $\sim 10^2 \text{ см}^{-2}$. Включения типа «внедрений» встречались приблизительно в 100 раз чаще, чем включения типа «вакансий».

Выявленные по розеткам интенсивности в 6H-SiC дефекты типа «внедрений» могут представлять собой микроостровки политипов SiC с малой степенью некогерентности и гексагональности, т.е. 3C-SiC, 8H-SiC, 21R-SiC, а также выделения кремния, который всегда присутствует в паровой фазе.

На топограммах, полученных методом Ланга, фиксировались только вклю-

чения типа «внедрения», формировавшие в зависимости от глубины залегания дефекта в кристалле контраст в виде пятен или двух полукругов положительного (чёрного) контраста. Размер рентгенотопографических изображений включений в этом случае был существенно меньше, чем в методе РТБ.

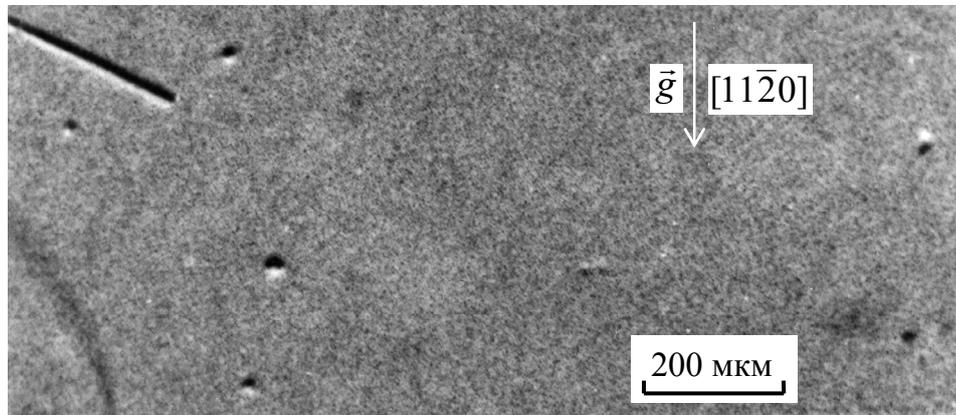


Рис. 11. Рентгеновские топограммы с *B*-микродефектов типов «внедрений» и «вакансий» в кристаллах 6H-SiC (позитивный контраст).

Изображения микродефектов в кристаллах GaAs и (Bi+Sb) аналогичны изображениям в Si и SiC, отличаясь от них размерами и скоростью изменения формы розетки при увеличении глубины залегания дефекта z . Исследован и систематизирован контраст интенсивности от когерентных выделений второй фазы в GaAs(In), составлен атлас экспериментальных изображений. Предполагается, что включения типа «внедрений» обусловлены присутствием химического соединения InAs, а включения типа «вакансий» – химического соединения VAs.

На рис. 12 приведены топограммы монокристалла (Bi₈₀+Sb₂₀), полученные методом РТБ и зарегистрированные в отражённом (рис. 12, *a*) и в прямом (рис. 12, *б*) пучках лучей. На топограммах зафиксирована одна и та же группа микродефектов, которые по геометрическому критерию относятся к *A*-микродефектам. Двойной чёрно-белый контраст интенсивности от этих микродефектов указывает на то, что они лежат в кристалле вблизи поверхности выхода рентгеновских лучей на глубинах $z \approx 1-3r_0$, где r_0 – радиус микродефекта. Сопоставление экспериментально зарегистрированных розеток интенсивности с расчётными (рис. 13), показывает, что эти МД являются дефектами вакансионного типа.

Применение цифровой обработки экспериментального контраста позволило устранить наиболее часто встречающиеся проблемы при расшифровке топограмм и фотонегативов: слабый контраст, фоновую неоднородность, влияние на качество анализируемых изображений зернистости и дефектов фотоэмульсии, а также выявить особенности экспериментального контраста, определить границы полей деформаций, характер изменения интенсивности в изображении дефекта, зарегистрировать микродефекты *B*-типа с размерами 2–5 мкм, которые ранее методом РТБ не выявлялись. Цифровой обработкой повышена чувствительность метода РТБ и ро-

зеточных методик на его основе, надёжность идентификации дефектов структуры монокристаллов.

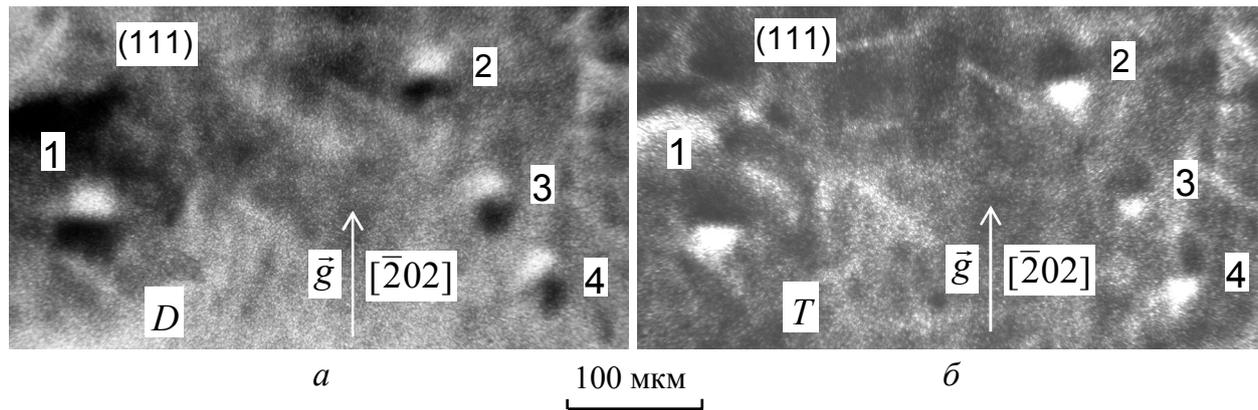


Рис. 12. Микродефекты типа вакансий в монокристалле $Bi_{80}Sb_{20}$, зарегистрированные методом РТБ в отражённом (а) и прямом (б) пучках лучей.

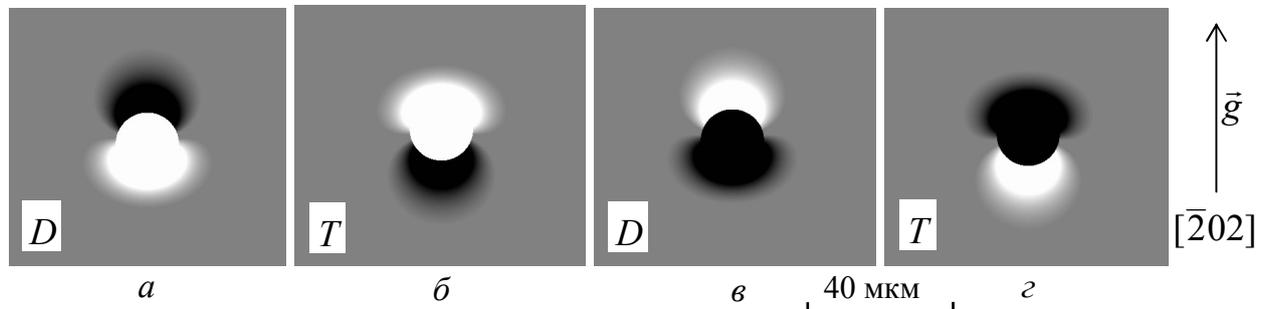


Рис. 13. Расчётные изображения микродефектов типа «внедрений» в отражённом (а) и прямом (б) пучках лучей и микродефектов типа «вакансий» в отражённом (в) и прямом (г) пучках лучей, расположенных на глубине $z = 2r_0$ в монокристалле ($Bi+Sb$).

В п. 4.4. описаны предложенные методики и результаты определения чувствительности метода РТБ к упругим деформациям. Первая методика основана на измерении границ розетки контраста, формируемой сосредоточенной силой, нормальной отражающим плоскостям кристалла. Измеренное по этой методике минимальное относительное изменение межплоскостного расстояния отражающих плоскостей $\{220\}$, приводящее к контрасту интенсивности в случае эффекта Бормана в германии при использовании CuK_{α} -излучения и тонкослойных ядерных

фотопластинок с эмульсией МР, имеет значение $\left(\frac{\Delta d}{d_{220}}\right)_{\min} = 1,1 \cdot 10^{-6}$.

Вторая методика основана на измерении размеров основной зоны розетки интенсивности от краевой дислокации и вычислении значения соответствующих фиксируемых деформаций по известной величине поля смещений вокруг дислокации.

Получены значения $\beta = \left(\frac{\Delta d}{d_{11\bar{2}0}}\right)_{\min} = 8 \cdot 10^{-7}$ для SiC (при использовании

CuK_α -излучения и отражения $11\bar{2}0$), $\beta \approx 8,9 \cdot 10^{-7}$ (отражение 400) и $\beta \approx 1,6 \cdot 10^{-7}$ (отражение 440) для GaAs.

В пятой главе «Рентгеновский контраст от дислокаций в условиях слабого поглощения» изложены результаты исследований контраста от дислокаций и микродефектов в монокристаллах SiC в приближении «тонкого» кристалла (методы секционной и проекционной топографии Ланга). Детально изучены особенности контраста от краевых и винтовых дислокаций, лежащих в плоскости рассеяния перпендикулярно вектору дифракции. Проведено сопоставление эффективности компьютерной обработки топограмм, полученных методами РТБ и Ланга.

П. 5.1. Отмечена важность исследования контраста от дефектов при контролируемой геометрии съёмки в наиболее простых случаях дифракции (в частности, при расположении дислокации в плоскости рассеяния перпендикулярно вектору дифракции). Для изучения процессов дифракции рентгеновских лучей в неоднородных полях деформаций, создаваемых дефектами кристаллической решётки, были проведены специальные эксперименты, направленные на изучение контраста от индивидуальных дефектов при различных условиях дифракции в методе СТП. Для анализа контраста от индивидуальных дислокаций были использованы монокристаллы 6H-SiC с низкой плотностью дислокаций ($N_d < 10^2 \text{ см}^{-2}$), выращенные методом Лели. Кристаллы предварительно были исследованы методами РТБ и ПОА и содержали прямолинейные краевые и смешанные дислокации системы скольжения $\{1\bar{1}00\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ с плотностью $10^1 - 10^2 \text{ см}^{-2}$, а также винтовые дислокации с осью $[0001]$ (плотность $1 - 6 \text{ см}^{-2}$). В разделе приведены параметры применяемой экспериментальной установки и даны примеры секционных топограмм дислокаций, наклонных и параллельных поверхности кристаллов SiC.

В п. 5.2. рассмотрены особенности контраста прямолинейных дислокаций, перпендикулярных поверхности образцов. На рис. 14, а показана топограмма, полученная методом СТП от кристалла SiC с перпендикулярными и наклонными к поверхности краевыми и смешанными дислокациями системы скольжения $\{1\bar{1}00\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$, а также микровключениями второй фазы. Расшифровка типов дефектов проводилась по топограмме, полученной методом РТБ (рис. 14, б). Дислокации **1** и **2**, расположенные вблизи биссектрисы треугольника рассеяния, формируют на рис. 14, а характерные изображения, содержащие яркий короткий лепесток, расположенный со стороны экстраполуплоскости и маркирующий область сжатия решётки и длинный узкий лепесток, вытянутый вдоль вектора дифракции. Дислокация **3** имеет противоположный знак, но пересекает прямой пучок и формирует яркое «прямое» изображение. В этом случае контраст лишён особенностей, позволяющих определить знак (направление вектора Бюргерса) дислокации. Сопоставление с результатами моделирования контраста в методе РТБ показывает,

что выявленные микродефекты расположены вблизи выходной для рентгеновских лучей поверхности кристалла и деформируют решётку по типу «внедрения». На секционной топограмме (рис. 14, а) изображения микродефектов имеют вид светлых кругов без видимых деталей.

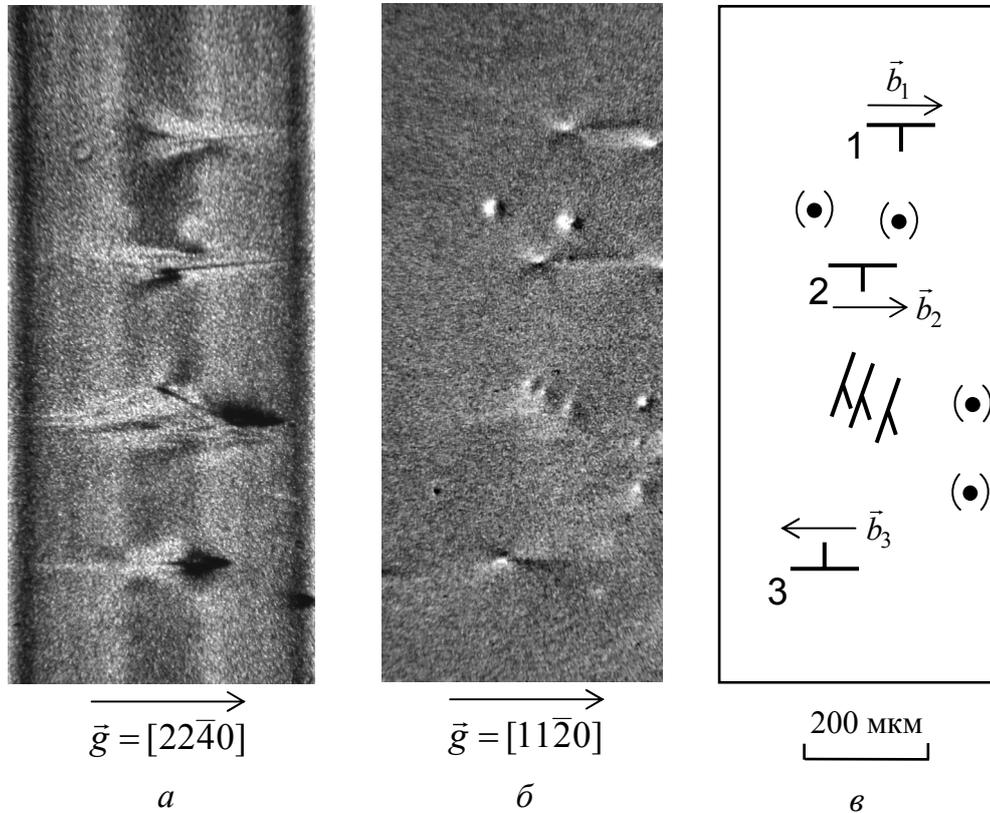


Рис. 14. Топограммы кристалла 6H-SiC, полученные методом СТП (а), методом РТБ (б), и схема расположения дефектов в кристалле (в).

Проведённые эксперименты показали, что выявленные особенности изображений характерны для краевых дислокаций с вектором Бюргерса, коллинеарным вектору дифракции, и сохраняются для дислокаций, оси которых отклонены от плоскости рассеяния на небольшие (до 20°) углы. В этих случаях, а также для угла между вектором дифракции и плоскостью скольжения дислокации 60° , однозначно определяется знак краевой дислокации. В случае $\vec{g}\vec{b} = 0$ (вектор дифракции перпендикулярен плоскости скольжения) основные особенности изображения краевой дислокации, расположенной вблизи биссектрисы треугольника Бормана, соответствуют розетке эффективной разориентации отражающих плоскостей, но изображение существенно (до обращения контраста) меняется при небольшом смещении оси дислокации и определение знака дислокации затруднено (рис. 15).

На рис. 16, а, б приведены топограммы от ряда однотипных дислокаций, оси которых меняют направление с $[\bar{1}\bar{1}20]$ на $[0001]$. Секционное изображение перпендикулярного поверхности кристалла краевого участка дислокации представляет собой розетку контраста более сложной формы, чем в методе РТБ. Наиболее яркими деталями изображения дислокации, расположенной вблизи биссектрисы тре-

угольника Бормана, являются четыре лепестка вблизи оси дислокации: два лепестка в области сжатия решётки вблизи экстраполуплоскости и два лепестка более слабого контраста, расположенные по другую сторону плоскости скольжения. Такая форма изображения может быть объяснена образованием волноводов для блоховских волн разных типов в областях с различными знаками кривизны функции локальных разориентаций. При этом контраст формируется дальним полем

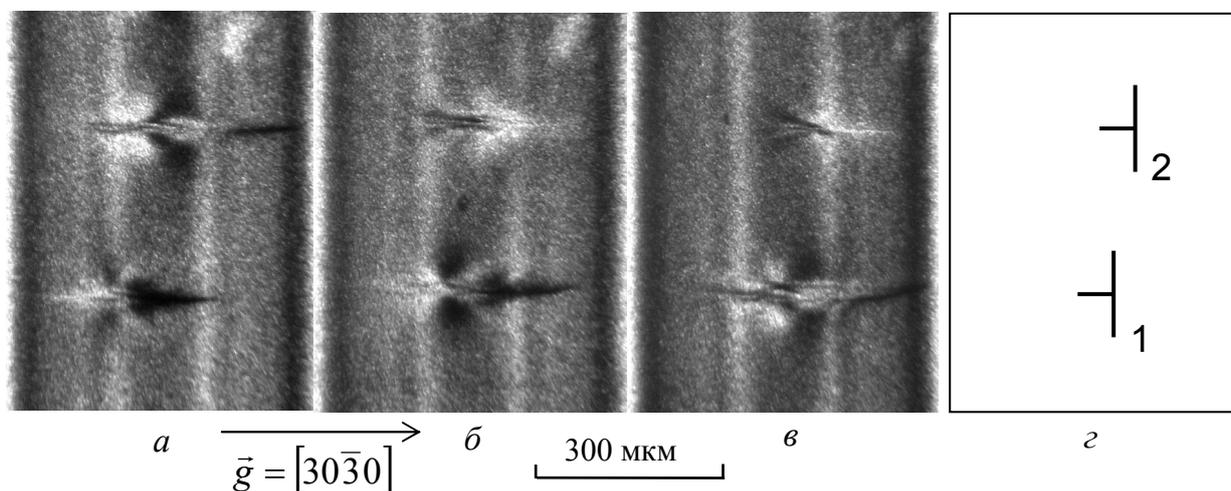


Рис. 15. Секционные топограммы ряда краевых дислокаций в 6H-SiC, лежащих в плоскости рассеяния перпендикулярно вектору дифракции (угол между вектором дифракции и плоскостью скольжения дислокации 90°) (а–в), и схема расположения дислокаций в кристалле (г).

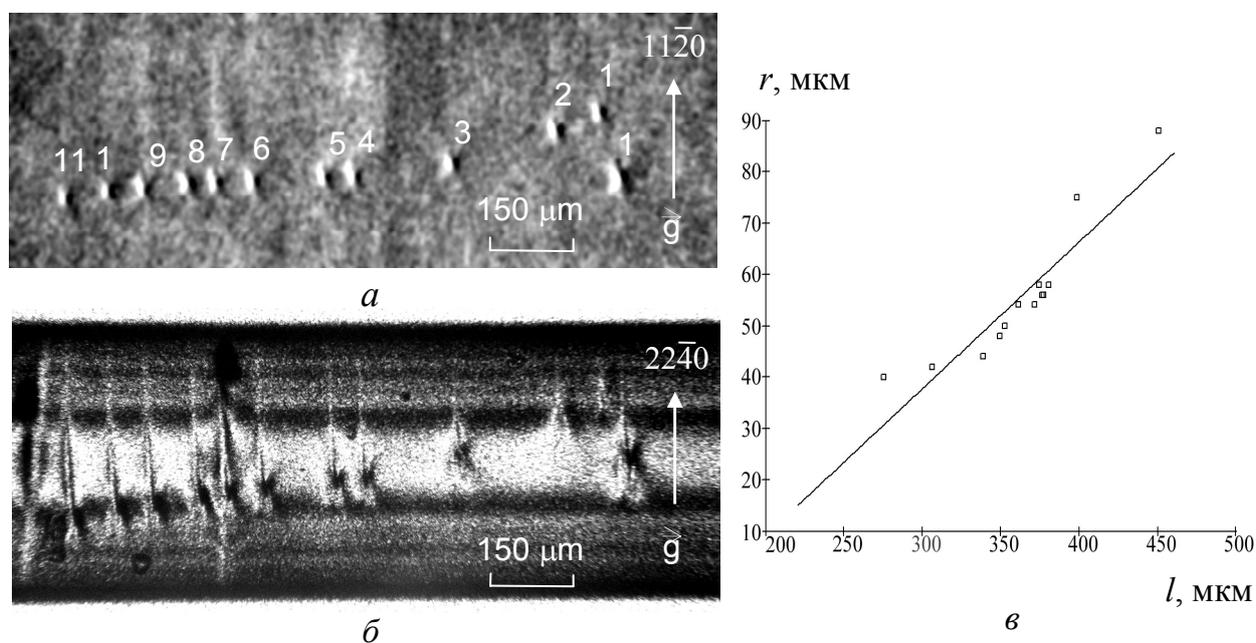


Рис. 16. Топограммы перпендикулярных поверхности участков дислокаций, полученные методами РТБ (а) и СТП (б); экспериментально установленная зависимость диаметра r розетки контраста краевой дислокации в 6H-SiC (метод РТБ) от длины l линии дислокации (в).

дислокации, где градиенты деформаций невелики, и волновое поле успевает подстраиваться под изменения решётки. В случае «тонкого» кристалла волновые поля обоих типов достигают выходной для рентгеновских лучей поверхности кристалла и повышенная интенсивность будет наблюдаться в областях как с пониженным, так и повышенным значением β_{hkil} .

Размер розеток контраста на топограмме, полученной методом РТБ (рис. 16, *a*), зависит от длины параллельного оси $[0001]$ краевого участка дислокации. По прямым изображениям глубинных винтовых участков дислокаций была определена зависимость диаметра розетки контраста в методе РТБ от длины краевого участка, формирующего изображение (рис. 16, *в*). Показано, что существует минимальная длина краевого участка l (для 6H-SiC $l \geq 240$ мкм), при которой может быть зарегистрирована розетка контраста и определены все основные характеристики дислокации.

На рис. 17, *a–e* приведены секционные топограммы кристалла SiC с левовинтовой дислокацией и группой краевых дислокаций, перпендикулярных поверхности образца, демонстрирующие изменение контраста при перемещении этих дефектов в пределах треугольника Бормана. Винтовая дислокация имеет минимально возможное для кристаллов 6H-SiC значение вектора Бюргерса $|\vec{b}| = 1,51$ нм. Группа краевых дислокаций состоит из 7 близко расположенных дислокаций с плоскостью скольжения $(01\bar{1}0)$ и векторами Бюргерса, направленными вдоль оси $[\bar{2}110]$. Проведённое сопоставление экспериментальных топограмм показало их хорошее соответствие розеткам эффективной разориентации отражающих плоскостей. Изображение группы краевых дислокаций в основном описывается четырёхлепестковой розеткой положительного (чёрного) контраста и, как для индивидуальных дислокаций (рис. 16, *б*), может быть объяснено в рамках геометрической оптики.

Наибольший вклад в изображение винтовой дислокации вносит релаксационное поле деформаций вблизи поверхности выхода рентгеновских лучей из кристалла. Двухлепестковая розетка положительного (чёрного) контраста, повторяющая по форме розетку эффективной разориентации отражающих плоскостей, формируется тогда, когда дислокация пересекает прямой или дифрагированный пучок вблизи выходной для рентгеновских лучей поверхности кристалла. Знак вектора Бюргерса дислокации однозначно определяется по интенсивности лепестков розетки, формируемых релаксационным полем на поверхности выхода лучей вблизи прямого пучка, т.е. расположенных на изображении со стороны начала вектора дифракции. Дислокация является правовинтовой, если из этой пары лепестков интенсивность выше у лепестка, который расположен слева, если смотреть вдоль вектора дифракции. И наоборот, дислокация является левовинтовой, если больше интенсивность лепестка, расположенного справа. Зависимость формы и яркости лепест-

ков от знака дислокации можно объяснить в рамках представления об амплитудном контрасте. Как и для изображения винтовой дислокации в методе РТБ, контраст в рассматриваемом случае образуется за счёт изменения плотности траекторий волн и, следовательно, определяется изменением амплитуды волнового поля.

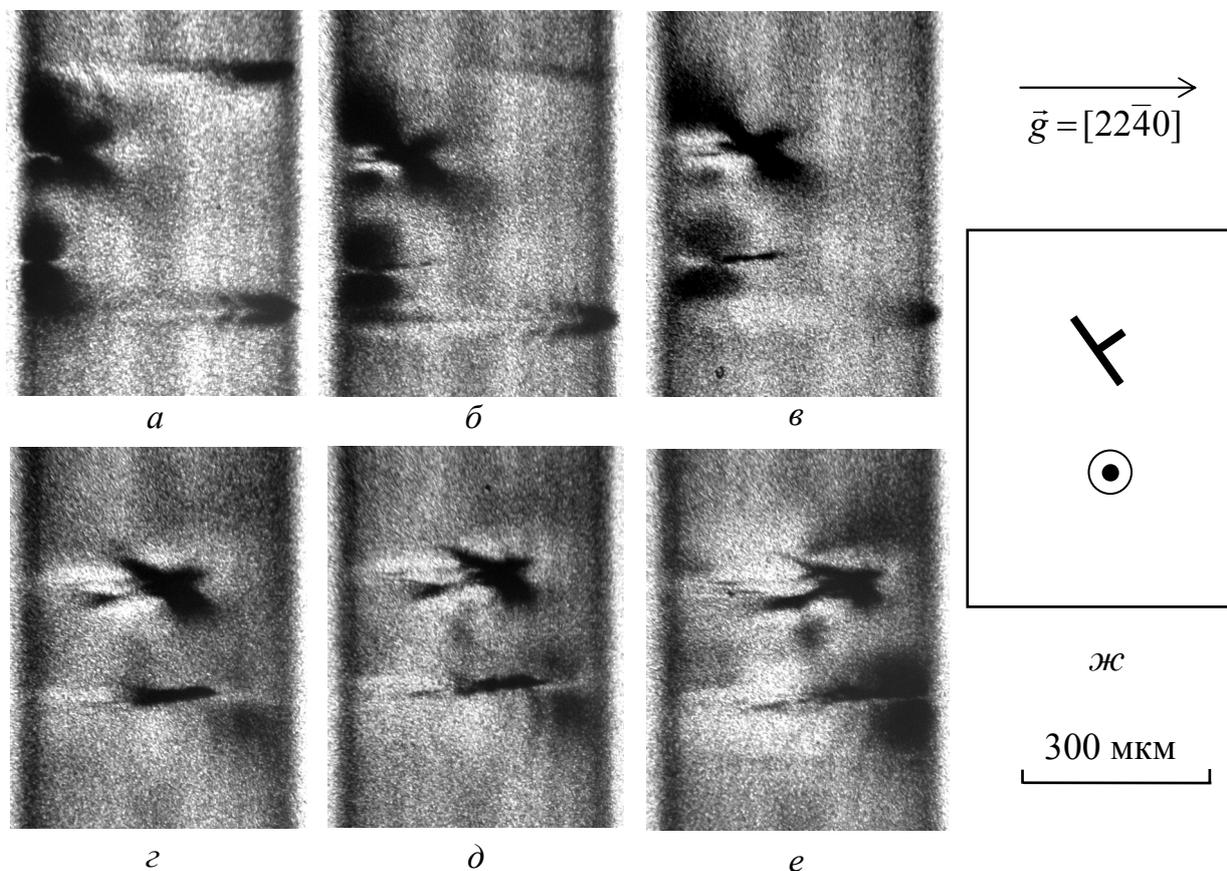


Рис. 17. Секционные изображения группы краевых дислокаций и винтовой дислокации, перпендикулярных поверхности образца 6H-SiC (а–е), и схема их расположения в кристалле (ж).

П. 5.3. В методе Ланга наиболее сильным является «прямое», или «кинематическое», изображение дефекта, формирующееся при пересечении падающего пучка с областью сильных деформаций кристаллической решётки вблизи дефекта и проектирующееся на выходную поверхность кристалла вдоль направления отражённого пучка. В силу этого краевые и смешанные дислокации с большой краевой компонентой вектора Бюргера, оси которых составляют с поверхностью (0001) кристалла углы, близкие к 90° , формируют в методе Ланга изображения в виде отрезков положительного контраста, ориентированных вдоль вектора дифракции. В отличие от метода РТБ контраст от дислокаций в этом случае лишён особенностей, позволяющих определить направления векторов Бюргера. По длине и ориентации изображений в методе Ланга можно определить величину отклонения линий дислокаций от перпендикуляра к поверхности кристалла. Проведённый анализ позволил установить зависимость изображений краевых дислокаций в методе РТБ от угла отклонения их осей от направления $[0001]$ как в плоскости рассеяния, так и в

перпендикулярной к ней плоскости.

На топограмме, полученной методом Ланга, винтовая дислокация, перпендикулярная поверхности кристалла, создаёт изображение исключительно положительного контраста более сложной формы, чем в методе РТБ, основными деталями которого являются две двухлепестковых розетки, расположенные на противоположных концах изображения (рис. 18, *а*). Механизм формирования контраста от винтовой дислокации может быть объяснён при сопоставлении с изображениями на секционных топограммах (рис. 16). При сканировании ось винтовой дислокации последовательно пересекает прямой и отражённый пучок, при этом релаксационное поле напряжений вблизи выходной для рентгеновских лучей поверхности кристалла приводит к формированию двух двухлепестковых розеток интенсивности. Линия нулевого контраста розеток совпадает с плоскостью рассеяния. При переходе от секционных топограмм к проекционным, т.е. при сканировании кристалла и фотопластины, происходит сложение контраста и формируется интегральное изображение (рис. 18, *б*). Общая длина изображения винтовой дислокации на проекционной топограмме соответствует длине основания треугольника Бормана. Сопоставление экспериментальных изображений винтовых дислокаций различного вращения позволило сформулировать правило определения знака винтовой дислокации по топограмме, полученной методом Ланга. Если из двух лепестков, расположенных на изображении со стороны начала вектора дифракции, большую интенсивность имеет левый лепесток (если смотреть вдоль вектора \vec{g}), то дислокация правовинтовая, а если правый – то левовинтовая.

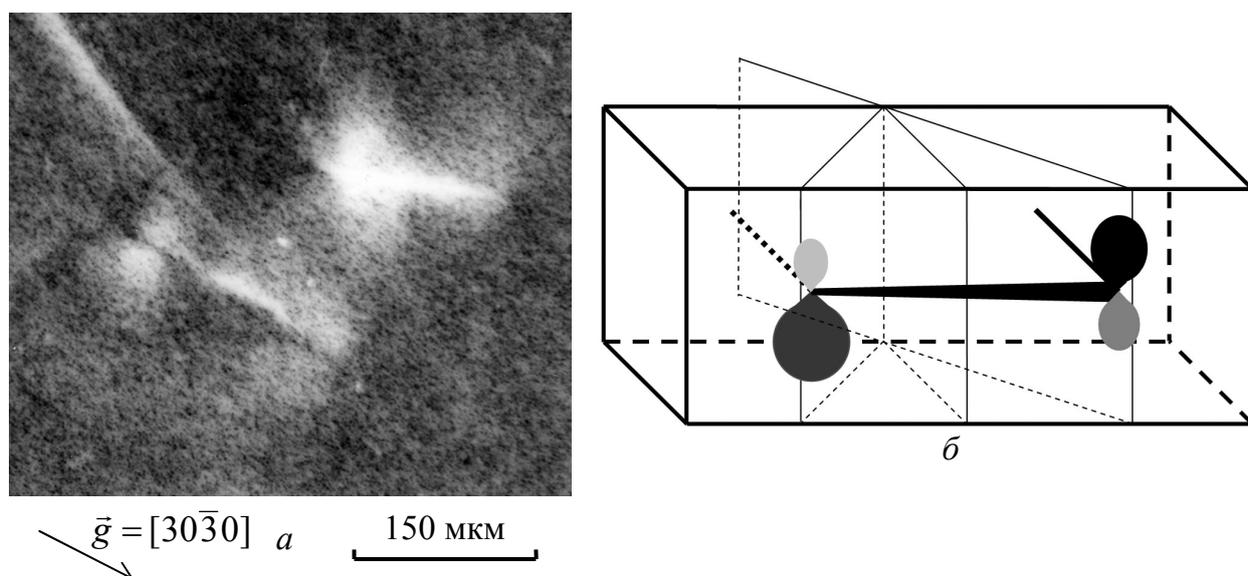


Рис. 18. Изображения левовинтовой дислокации и группы краевых дислокаций на топограмме, полученной методом Ланга (положительный контраст) (*а*); схема формирования изображения правовинтовой дислокации в методе Ланга (*б*).

Проведенный анализ экспериментального контраста, полученного методами РТБ, СТП и Ланга свидетельствует, что изображения дефектов в методе РТБ явля-

ются более простыми и удобными для идентификации и сохраняют больше характерных черт при использовании одинаковых процедур цифровой обработки, чем в методе Ланга. В отличие от метода РТБ, выявление особенностей экспериментального контраста методом Ланга и эффективность цифровой обработки в значительной степени определяются выбором отражающих плоскостей.

В шестой главе «Исследование дислокаций поляризационно-оптическим методом» приводятся результаты исследования методом ПОА линейных дефектов в кристаллах SiC.

П. 6.1. Выявлены особенности фигур двойного лучепреломления от индивидуальных дислокаций в монокристаллах 6H-SiC, выращенных методом Лели. Применение обработки изображения методом, основанным на прямом изменении амплитудного спектра изображения, позволяет выявить тонкую структуру контраста оптической розетки, обусловленную релаксационным полем напряжений и не описываемую существующей теорией контраста (рис. 19, б). Удаление мешающего фона и усиление слабого контраста позволили обнаружить в дополнение к четырём лепесткам, соответствующим лепесткам расчётной розетки, ещё шесть лепестков, расположенных за пределами основной зоны контраста. Рис. 19, б демонстрирует наличие светлого лепестка, расположенного за двумя тёмными лепестками основной зоны контраста, и тёмного – за двумя светлыми. Кроме того, каждая розетка обладает ещё четырьмя лепестками, вытянутыми вдоль плоскости скольжения дислокации. Таким образом, изображение краевой дислокации для угла между плоскостью скольжения и плоскостями колебаний николей $\alpha = 45^\circ$ представляет собой десятилепестковую розетку и аналогично по форме изображению краевой дислокации в методе РТБ при коллинеарности вектора Бюргерса и вектора дифракции.

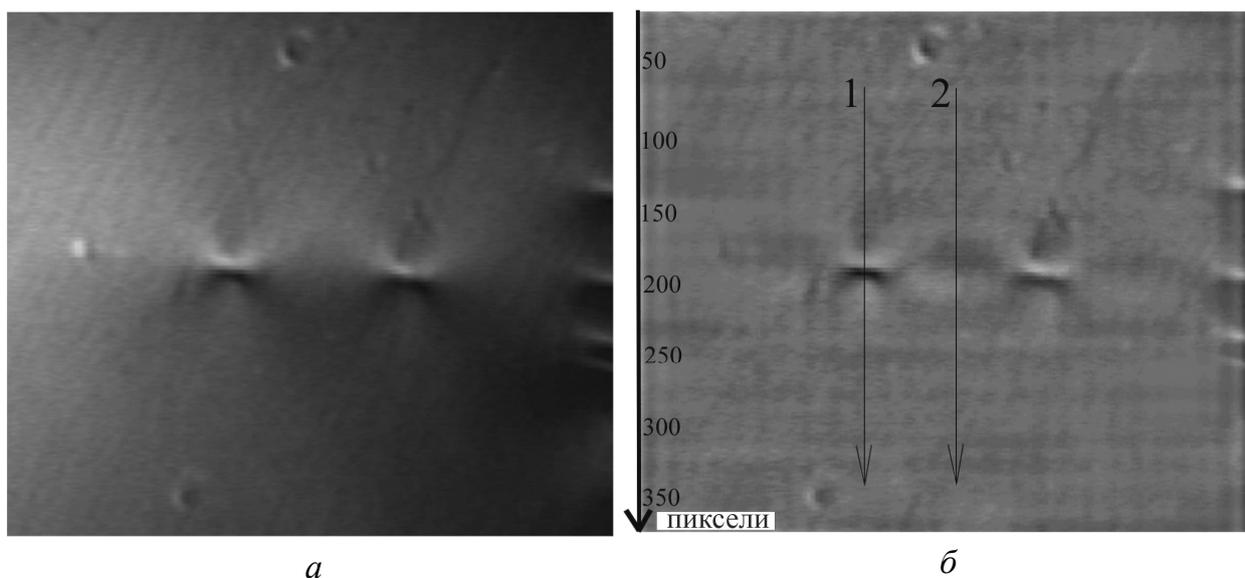


Рис. 19. Поляризационно-оптические изображения краевых дислокаций системы скольжения $\{1\bar{1}00\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ в 6H-SiC до (а) и после цифровой обработки (б).

Для кристаллов, полученных методом Лели, по розеткам фотоупругости были идентифицированы краевые и смешанные дислокации систем скольжения $\{\bar{1}010\} <\bar{1}2\bar{1}0>$ и $\{\bar{2}110\} <0\bar{1}10>$, расположенные перпендикулярно и наклонно к базисной плоскости кристалла, а также дислокации, относящиеся к не предсказанным теоретически системам скольжения.

В кристаллах, выращенных методами Лели и ЛЭТИ, выявлены и с помощью моделирования интерпретированы фигуры двойного лучепреломления в виде отрезков чёрно-белого контраста, расположенных вдоль направлений $<11\bar{2}0>$, создаваемые смешанными дислокациями с осями $<11\bar{2}\ell>$, наклоненными к поверхности образца под различными углами, и имеющими вектор Бюргерса типа $<11\bar{2}0>$ (рис. 20). Специально проведённый анализ показал, что этим методом в кристаллах карбида кремния фиксируются дислокации описанного типа, имеющие углы наклона к оси $[0001]$ до 60° .

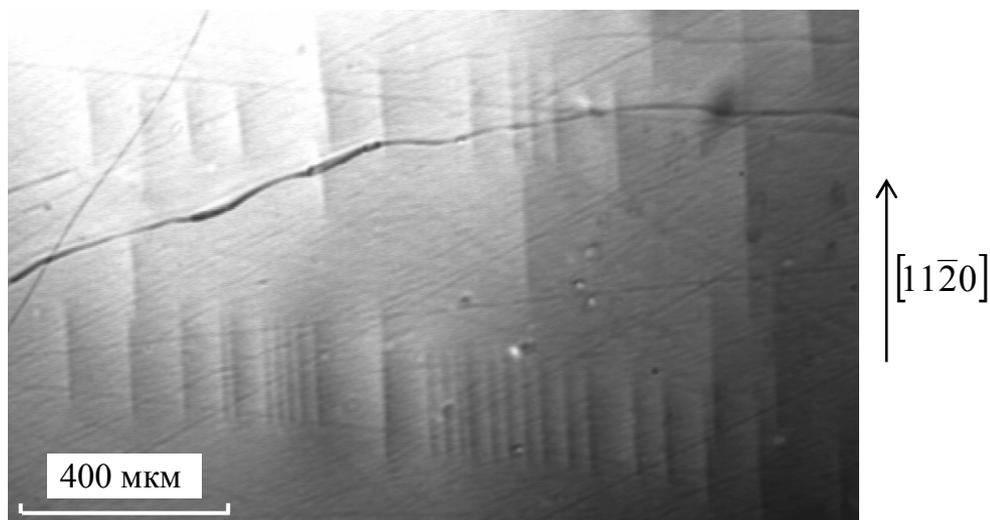


Рис. 20. Фигуры двойного лучепреломления от смешанных дислокаций с векторами Бюргерса $\vec{b} = \frac{a}{3}[11\bar{2}0]$ и осями $[11\bar{2}\ell]$ в кристалле, выращенном методом Лели.

П. 6.2. Исследованы особенности контраста от специфических дефектов кристаллов, выращенных модифицированным методом Лели, которые представляют собой вытянутые вдоль направления роста слитка поры микронного и субмикронного размера и носят название дислокационных микротрубок (ДМТ). Проведённые методом ПОА исследования показывают, что поля напряжений вокруг ДМТ полностью подобны полям напряжений вокруг краевых дислокаций (значительно превосходя их по величине), т.е. демонстрируют наличие плоскости сдвига $\{\bar{1}100\}$ или $\{11\bar{2}0\}$ (рис. 21). Проведённое с помощью компенсатора Сенармона определение мощности ДМТ показало, что сдвиг, связанный с микротрубками различной мощности, в 50–150 раз больше, чем для элементарных краевых дислокаций. Таким образом, большие деформации кристаллической решётки вокруг микротрубок обу-

словлены краевой составляющей вектора Бюргерса этих дефектов. Исследования объёмных кристаллов 6H-SiC методом рентгеновской топографии на отражение также демонстрируют отсутствие осевой симметрии дальнедействующих полей деформаций вокруг таких дефектов, что было бы характерно для чисто винтовых дислокаций. Специальными экспериментами показано, что обычные винтовые дислокации в SiC не формируют контраста в методе ПОА. Полученные результаты противоречат традиционной интерпретации микротрубок как чисто винтовых дислокаций с большим вектором Бюргерса и полым ядром. Возможно, гигантские розетки фотоупругости от ДМТ обусловлены суммарными полями дислокаций с большой краевой компонентой вектора Бюргерса, ассоциированных с ядром ДМТ.

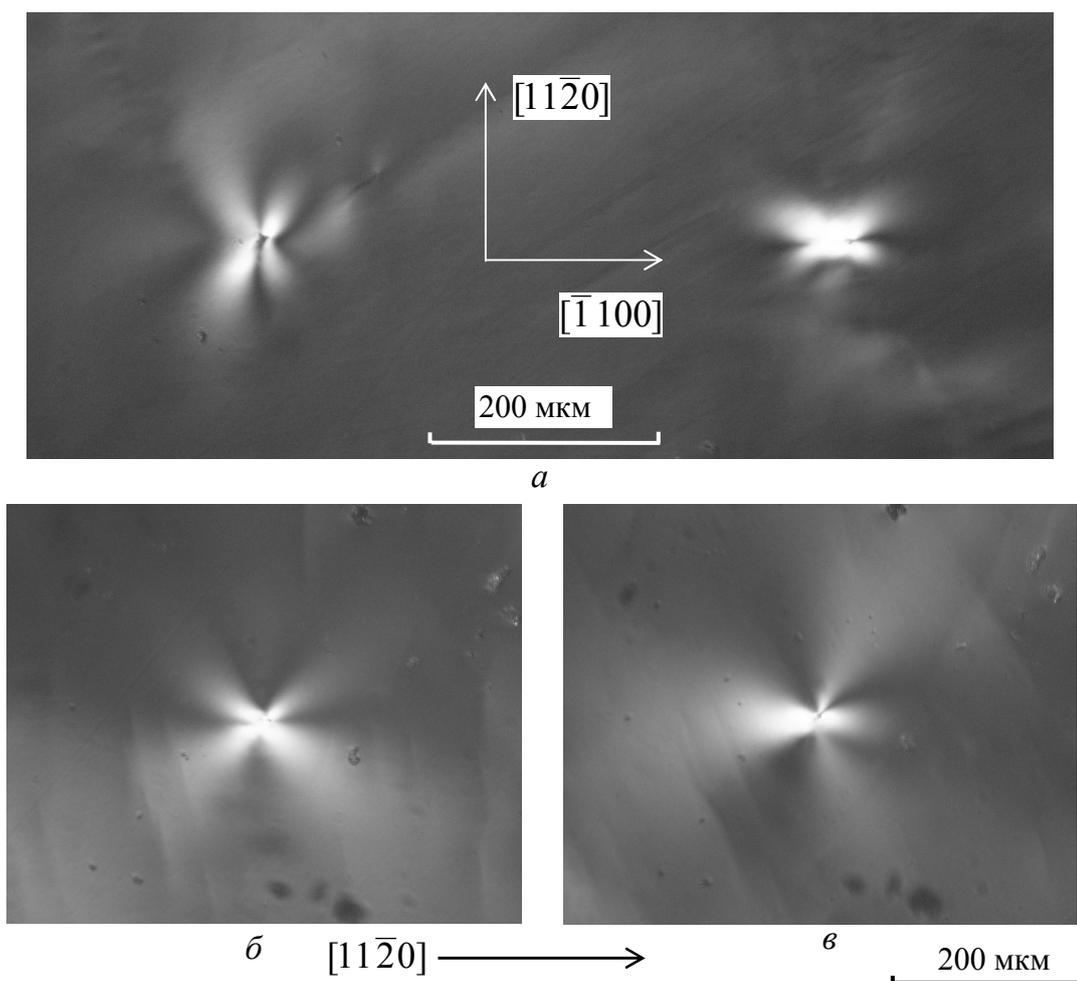


Рис. 21. Поляризационно-оптические изображения микротрубок различного типа в кристалле SiC, выращенном модифицированным методом Лели (а); изображения микротрубки, отличающиеся поворотом кристалла на угол 45° относительно скрещенных николей (б, в).

Проведено сопоставление эффективности методов РТБ, Ланга и ПОА при выявлении дислокаций, выходящих на поверхность образца и показаны преимущества метода ПОА при анализе кристаллов с высокой плотностью дислокаций ($N_d \sim 10^3 - 10^4 \text{ см}^{-2}$). Однако, по сравнению с методом РТБ метод фотоупругости требует более высокого качества подготовки поверхности образцов. Показано, что

информативность метода ПОА можно существенно увеличить применением компьютерной обработки изображений дефектов, оцифрованных непосредственно с фотонегатива.

В заключении сделаны выводы по работе и даны рекомендации по дальнейшему развитию методов рентгеновской топографии и поляризационно-оптического анализа, цифровой обработки изображений, приведён перечень основных научных публикаций – статей, расширенных тезисов, монографий.

В приложении приведен пример программы расчёта розеток эффективной разориентации и контраста интенсивности от дефектов структуры для методов РТБ и поляризационно-оптического анализа.

Основные результаты и выводы

Прямые и неразрушающие методы исследования дефектов кристаллической решётки, в которых регистрируются изображения розеточного типа (метод РТБ и метод поляризационно-оптического анализа) показали свою высокую эффективность при исследовании широкого класса полупроводниковых материалов, от широкозонных полупроводников (SiC) до полуметаллов (Bi+Sb). Розеточные методики позволяют по одному изображению дефекта однозначно определить все его основные характеристики. В работе впервые проведено систематическое исследование экспериментального и расчётного контраста рентгенотопографических изображений в виде розеток интенсивности от структурных дефектов в кристаллах с различной кристаллической решёткой. Анализ экспериментального контраста, полученного методами Ланга, СТП и РТБ, свидетельствует, что изображения дефектов в методе РТБ являются более простыми и удобными для идентификации.

Несмотря на свою простоту, полуфеноменологическая теория бормановского контраста, основанная на модифицированных уравнениях Инденбома–Чамрова, позволила получить качественные и количественные данные о дефектах структуры исследованных полупроводников.

Для выявления особенностей экспериментальных изображений дефектов в данной работе была использована цифровая обработка топограмм и оптических снимков, расширяющая возможности и увеличивающая чувствительность методов рентгеновской топографии и поляризационно-оптического анализа при исследовании дефектов структуры монокристаллов. Применение цифровой обработки обусловлено необходимостью получения наиболее полной информации о дефектах при ограниченном выборе отражений и анализе малых по размеру изображений на фоне зернистости (гранулярности) фотоматериала, что характерно для методов рентгеновской топографии. В методе ПОА цифровая обработка позволила уменьшить влияние на экспериментальный контраст сильной фоновой неоднородности, обусловленной особенностями метода. Полученные в данной диссертационной ра-

боте научные и практические результаты свидетельствуют о высокой перспективности разработанных и апробированных методик цифровой обработки экспериментального контраста (особенно вейвлет-анализа).

В ходе выполнения диссертационной работы автором были получены следующие **основные результаты**.

1. Выявлены общие закономерности формирования изображений розеточно-го типа в кристаллах различной физико-химической природы и разработаны методики исследования дислокаций, выделений второй фазы и дефектов упаковки в монокристаллах на основе анализа изображений, полученными РТБ и ПОА.

2. Анализ экспериментальных данных показывает, что бормановский контраст в виде розеток интенсивности от дислокаций и микродефектов в кристаллах различной физико-химической природы (Si, SiC, GaAs, монокристаллические сплавы (Bi+Sb)) имеет общий механизм формирования. Для всех исследованных материалов составлен атлас расчётных и экспериментальных изображений от включений и дислокаций при различных условиях дифракции.

3. В случае эффекта Бормана контраст от дефектов (дислокаций и квазиточечных дефектов) с медленно изменяющимися полями деформации в исследованных материалах (Si, SiC, GaAs, сплавы (Bi+Sb)) формируется в основном зоной слабых искажений отражающих плоскостей вокруг этих дефектов и для расчёта контраста можно эффективно использовать модифицированные уравнения Инденбома–Чамрова. Получены аналитические формулы для контраста и выполнено компьютерное моделирование розеток интенсивности от краевых, винтовых, смешанных дислокаций и микродефектов различного типа в исследованных кристаллах при различных условиях дифракции.

4. Расчётное изображение винтовой дислокации в упругоизотропном приближении (GaAs) и с учётом анизотропии гексагонального кристалла (SiC) описывается двухлепестковой розеткой чёрно-белого контраста. Если ось дислокации совпадает с направлением преимущественного распространения энергии волнового рентгеновского поля, то плоскость антисимметрии розетки перпендикулярна отражающим плоскостям. Расположение лепестков определяется знаком дислокации (правовинтовая или левовинтовая) и типом рефлекса (отражённый или прошедший). Размер розетки определяется модулем вектора Бюргерса дислокации \vec{b} , длиной экстинкции Λ и модулем вектора дифракции \vec{g} .

При отклонении оси дислокации от направления преимущественного распространения энергии в кристалле происходит закономерное изменение формы розетки. Теоретический контраст от наклонной винтовой дислокации многообразен и является сложной функцией, зависящей от \vec{b} , Λ , \vec{g} и положения оси дислокации в кристалле. По изменению формы розетки может быть определён угол наклона оси дислокации к поверхности кристалла. Основные особенности дифракционных ро-

зеток от винтовых и 30-градусных дислокаций в SiC и GaAs хорошо соответствуют расчётным изображениям.

Компьютерная обработка экспериментальных топограмм позволяет выявить дополнительные лепестки розеток от винтовых дислокаций, вытянутые вдоль вектора дифракции и в противоположном направлении, и уточнить особенности экспериментальных изображений дислокаций.

5. Теоретически показано, что топографический контраст, обусловленный основным полем краевой дислокации, представляет собой четырёх- или шестилепестковую розетку и определяется углом между вектором Бюргера дислокации \vec{b} и вектором дифракции \vec{g} . Рассчитаны теоретические розетки интенсивности, обусловленные основным полем деформаций вокруг краевых дислокаций в исследованных кристаллах при различном взаимном положении векторов \vec{b} и \vec{g} . Размер розеток от краевой дислокации зависит от модуля вектора Бюргера \vec{b} , длины экстинкции Λ , модуля вектора дифракции \vec{g} , а также длины дислокации.

Теоретически и экспериментально показано, что краевые дислокации в SiC и GaAs при коллинеарности векторов \vec{b} и \vec{g} формирует в общем случае восьмилепестковую розетку интенсивности, линия нулевого контраста которой совпадает с плоскостью скольжения дислокации. Четыре ближних к ядру дислокации лепестка сформированы основным полем деформаций вокруг дислокации, при этом тёмные лепестки соответствуют зоне сжатия вблизи экстраполуплоскости. Четыре дальних лепестка обусловлены релаксационным полем деформаций. Контраст от краевой дислокации зависит от её знака и не зависит от типа рефлекса. Переход от отражения $hkil$ к отражению $\bar{h}\bar{k}\bar{i}\bar{l}$ не влияет на контраст розеток. Диаметр розетки определяется величинами $|\vec{b}|$, $|\vec{g}|$, Λ и коэффициентом Пуассона ν .

При неколлинеарности вектора Бюргера \vec{b} и вектора дифракции \vec{g} дислокации с большой краевой компонентой вектора Бюргера (краевая дислокация в SiC системы скольжения $\{\bar{1}2\bar{1}0\} <\bar{1}010>$ и шестидесятиградусная дислокация системы скольжения $\langle 101 \rangle \{111\}$ в Bi+Sb) при распространении энергии волнового поля внутри кристалла вдоль их осей формируют несимметричные четырёхлепестковые розетки интенсивности, по положению линии нулевого контраста которых определяется положение плоскостей скольжения дислокаций.

Экспериментально установлено, что в случае $\vec{g} \cdot \vec{b} = 1$ краевая дислокация в SiC с вектором Бюргера $\vec{b} = \frac{a}{3} <11\bar{2}0>$ и плоскостью скольжения $\{1\bar{1}00\}$ формирует крестообразную розетку интенсивности, узкие лепестки положительного контраста которой вытянуты вдоль вектора \vec{g} и перпендикулярно ему.

Краевая дислокация в GaAs в случае $\vec{g} \cdot \vec{b} = 0$ формирует шестилепестковую розетку чередующегося чёрно-белого (положительно-отрицательного) контраста, формируемую, в основном, собственным полем деформации вокруг дислокации. Плоскость симметрии розетки совпадает со следом экстраполуплоскости.

6. Определена зависимость размера розетки контраста от длины участка краевой дислокации, формирующего изображение. Проведены оценки минимальной длины дислокации, при которой дислокация может быть идентифицирована на топограмме.

7. Результаты рентгенотопографического исследования дефектов структуры методом РТБ использованы для оценки глубины зоны формирования контраста и величины эффективной деформации отражающих плоскостей вокруг дислокации. Разработана методика определения чувствительности метода в различных материалах по размерам розеток контраста от краевых дислокаций. Показано, что методом РТБ могут регистрироваться относительные деформации атомных плоскостей порядка $10^{-6} - 10^{-7}$.

8. Дислокационная структура монокристаллов 6H-SiC, выращенных методом Лели, в значительной мере подобна дислокационной структуре вюрцита; идентифицировано восемь типов полных дислокаций из одиннадцати теоретически предсказанных.

Исследована пластическая деформация гомоэпитаксиальных слоёв 6H-SiC, обусловленная механическими дефектами подложки (царапинами) и крупными включениями второй фазы, расположенными вблизи её поверхности.

9. Экспериментально показано, что реальная дислокационная структура монокристаллического арсенида галлия богаче теоретических представлений, изложенных в работах Хорнстры и Хольта. Среди ростовых краевых дислокаций в решетке, сфалерита существуют дислокации, как с «малыми» ($\vec{b} = a/2 \langle 110 \rangle$), так и с «большими» векторами Бюргера ($\vec{b} = a \langle 100 \rangle$).

10. Предложена авторская классификация микродефектов (включений второй фазы), выявляемых методами топографии, основанная на чувствительности метода РТБ к знаку деформации кристаллической решётки и размерах дифракционных изображений.

Показано, что выявленные методами рентгеновской топографии и инфракрасной микроскопии (ИКМ) ростовые микродефекты в монокристаллах Si, выращенных методами Чохральского, SiC, GaAs, (Bi+Sb), являются когерентными включениями второй фазы и могут быть классифицированы по размеру и знаку деформации как микродефекты $+A-$, $-A-$, $+B-$, $-B-$ типов.

На основе теории бормановского контраста интенсивности от дефектов кристаллической решётки с медленно изменяющимися полями деформаций исследованы теоретические розетки интенсивности от микродефектов $A-$ и $B-$ типа в моно-

кристаллах Si, SiC, GaAs, (Bi+Sb). Форма и размер изображения зависят от типа включения, типа рефлекса (отражённый или прямой) и расстояния от дефекта до выходной для рентгеновских лучей поверхности кристалла. Показана принципиальная возможность регистрации микродефектов *B*-типа методом РТБ.

Теоретически показана возможность однозначного определения методом РТБ знака деформации матрицы, производимой микродефектом, т.е. физической природы микродефектов. Составлены атласы расчётных и экспериментальных рентгенотопографических изображений микродефектов *A*- и *B*-типа. Показана принципиальная возможность определения параметра несоответствия ϵ для микродефектов в кремнии. На основе методов РТБ и ИКМ проведена классификация микродефектов в монокристаллах Si(CZ), SiC, GaAs, Bi+Sb. Получены количественные данные о плотности микродефектов в этих материалах.

11. Разработана методика определения природы и структуры простых и сложных дефектов упаковки (ДУ) путём идентификации ограничивающих их частичных и вершинных дислокаций по розеткам контраста в методе РТБ.

Теоретически и экспериментально исследована природа частичных и вершинных дислокаций, ограничивающих ДУ в кремнии в случае эффекта Бормана. Составлены атласы теоретических и экспериментальных изображений частичных и вершинных дислокаций, входящих в ДУ. Сопоставление теоретических и экспериментальных изображений частичных и вершинных дислокаций в кристаллах Si показало их хорошее качественное совпадение.

Частичные краевые дислокации Франка с векторами Бюргерса $\vec{b} = \frac{a}{3}\langle 111 \rangle$, ограничивающие простой ростовой ДУ, в случае эффекта Бормана при распространении рентгеновских лучей вдоль оси дислокации и $\vec{g} \cdot \vec{b} = 4/3$ формируют несимметричные 4-лепестковые розетки интенсивности чёрно-белого контраста, совпадающие по профилю с изображением полных краевых дислокаций. При $\vec{g} \cdot \vec{b} = 0$ формируются несимметричные шестилепестковые розетки интенсивности чередующегося чёрно-белого контраста.

Вершинные краевые дислокации Томпсона с векторами Бюргерса $\vec{b} = \frac{a}{6}\langle 110 \rangle$, ограничивающие барьер Ломера–Коттрелла (БЛК), в случае эффекта Бормана при распространении рентгеновских лучей вдоль оси дислокации и $\vec{g} \cdot \vec{b} = 2/3$ формируют симметричные 4-лепестковые розетки интенсивности черно-белого контраста, а при $\vec{g} \cdot \vec{b} = 0$ – симметричные 6-лепестковые розетки чередующегося чёрно-белого контраста. Если БЛК ограничен вершинной дислокацией с $\vec{b} = \frac{a}{3}\langle 110 \rangle$, то формируются симметричные 4-лепестковые розетки чёрно-белого

контраста вдвое большего диаметра, а при $\vec{g} \cdot \vec{b} = 0$ – симметричные 6-лепестковые розетки чередующегося чёрно-белого контраста тоже вдвое большего диаметра. Плоскость симметрии розеток совпадает с положением экстраполуплоскости. Плоскость антисимметрии розеток совпадает с плоскостью скольжения, в которой лежит вектор Бюргерса.

Вершинные краевые дислокации с векторами Бюргерса $\vec{b} = \frac{a}{3}\langle 100 \rangle$ с тупым углом, ограничивающие ростовые барьеры Хирта, в случае эффекта Бормана при распространении рентгеновских лучей вдоль оси дислокации и при $\vec{g} \cdot \vec{b} = 0$ формируют симметричные 6-лепестковые розетки интенсивности чередующегося чёрно-белого контраста, а при $\vec{g} \cdot \vec{b} = 2/3$ – симметричные 4-лепестковые розетки чёрно-белого контраста. Плоскость симметрии розеток совпадает с положением экстраполуплоскости. Плоскость антисимметрии розеток совпадает с плоскостью скольжения, в которой лежит вектор Бюргерса.

Показана высокая информативность и достоверность метода РТБ в выявлении ростовых ДУ различной природы в монокристаллах кремния. Обнаружены ростовые дефекты упаковки, которые идентифицировались при сопоставлении теоретических и экспериментальных изображений, как ДУ типа вычитания и типа внедрения.

12. Проведено сопоставление рентгенотопограмм, полученных методами Ланга, РТБ и двухкристальной топографии в геометрии Брэгга, позволившее выявить преимущества метода РТБ при выявлении дислокаций, выходящих на поверхность пластин SiC и микровыделений второй фазы.

Выявлены особенности изображений дислокаций в SiC, лежащих в тонком кристалле вдоль биссектрисы треугольника Бормана. Контраст интенсивности от перпендикулярных поверхности дислокаций в методе секционной топографии в геометрии прохождения (СТП) в значительной степени определяется видом поля деформаций вокруг этих дислокаций, и большой вклад в изображение даёт область слабых искажений решётки вокруг дефекта.

Изучен механизм формирования контраста от винтовой дислокации в методах СТП и Ланга. Винтовая дислокация, лежащая в плоскости рассеяния перпендикулярно вектору дифракции, формирует на секционных топограммах изображение в виде двухлепестковой розетки контраста одинарного (положительного) контраста, если её ось пересекает прямой или отражённый пучок вблизи поверхности выхода рентгеновских лучей.

Основными деталями изображения винтовой дислокации на топограмме, полученной методом Ланга, являются двухлепестковые розетки контраста на обоих концах изображения. По интенсивности лепестков контраста на секционных и про-

екционных топограммах однозначно определяется знак винтовой дислокации.

Контраст от краевой дислокации, расположенной вблизи биссектрисы треугольника Бормана, зависит от того, пересекает ли ось дислокации входную для рентгеновских лучей поверхность кристалла. Если контраст формируется участком дислокации, не пересекающим входную поверхность, то основными деталями изображения являются четыре лепестка положительного (чёрного) контраста, два из которых, имеющие большую интенсивность, расположены со стороны экстраполуплоскости.

Характерными деталями изображения краевой дислокации, проходящей от одной поверхности кристалла до другой вблизи биссектрисы треугольника Бормана (углы между вектором дифракции \vec{g} и плоскостью скольжения 0 или 60°), являются тёмные лепестки, по которым однозначно определяется знак вектора Бюргера дислокации. В случае $\vec{g} \cdot \vec{b} = 0$ контраст от такой дислокации сильно зависит от позиции дислокации и определение знака вектора Бюргера по единичной топограмме затруднено.

Изображения краевых дислокаций, перпендикулярных поверхности кристалла, в методе Ланга имеют вид отрезков положительного контраста и лишены особенностей, позволяющих определить количественные параметры дислокаций.

13. Поляризационно-оптический метод (метод фотоупругости) может быть эффективно использован для исследования дислокационной структуры кристаллов SiC, выращенных различными методами, и определения типа дислокаций, включая краевые и смешанные с минимально возможным в решётке SiC вектором Бюргера $\vec{b} = \frac{a}{3} \langle 11\bar{2}0 \rangle$, но для этого требуется высокое качество подготовки поверхности образцов. Хорошо разработанная теория метода позволяет дать объективную характеристику наблюдаемых дислокаций.

При исследовании краевых дислокаций в монокристаллах 6H-SiC, параллельных направлению наблюдения, выявлены особенности их поляризационно-оптических изображений и установлено, что розетка имеет более сложную форму, чем предполагалось ранее для розеток двойного лучепреломления в монокристаллах. Кроме четырёх лепестков, обусловленных основным полем напряжений вокруг дислокации, выявлены еще шесть лепестков, сформированных релаксационным полем напряжений вблизи точки выхода дислокации на поверхность кристалла.

Установлено, что методом фотоупругости надёжно фиксируются дислокации, имеющие углы наклона к оси [0001] от 0 до 50°. Контраст фиксируется при углах между плоскостью скольжения и плоскостью колебаний в одном из николей от 10 до 45°.

Фиксируемые экспериментально деформации кристаллической решётки во-

круг дислокационных микротрубок в кристаллах SiC, выращенных модифицированным методом Лели, обусловлены, в первую очередь, сдвиговой составляющей. Розетки фотоупругости вокруг дислокационных микротрубок полностью подобны розеткам вокруг краевых дислокаций (значительно превосходя их по величине) и демонстрируют наличие плоскости сдвига $\{1\bar{1}00\}$ или $\{11\bar{2}0\}$. Связанный с микротрубками сдвиг (для исследованных образцов) в 50–150 раз больше, чем для элементарных краевых дислокаций.

Применение компьютерной обработки негативных фотоизображений дефектов позволяет значительно расширить возможности поляризационно-оптического метода и получить дополнительную количественную и качественную информацию о структурном совершенстве исследуемых монокристаллов.

14. Применение цифровой обработки топографического и поляризационно-оптического контраста, основанной на анализе яркостных и частотных характеристик изображений, позволило устранить на топограммах и оптических снимках факторы, мешающие идентификации дефектов структуры монокристаллов (слабый контраст, фоновую неоднородность и зернистость изображений), определить границы полей деформаций от дефектов, зарегистрировать микродефекты *B*-типа с размерами 2–5 мкм, которые ранее методом РТБ не выявлялись, выявить «тонкие» не регистрируемые ранее особенности экспериментального контраста.

Показана более высокая эффективность и информативность методов цифровой обработки при анализе изображений розеточного типа, полученных методом РТБ, чем при обработке топограмм, полученных методом Ланга. Идентификация дефектов, зарегистрированных по методу Ланга, и эффективность последующей цифровой обработки экспериментального контраста в большей степени зависят от выбора отражающих плоскостей (порядка отражения).

Частотный анализ экспериментального контраста, основанный на использовании вейвлетов, позволяет расширить возможности цифровой обработки и получить дополнительную количественную и качественную информацию о дефекте и его «тонкой» структуре. Сравнивая эффективность различных методов цифровой обработки, можно говорить о более высокой перспективности частотного анализа изображений по сравнению с цифровой обработкой, основанной на использовании линейной и нелинейной фильтрации.

Цифровой обработкой повышена чувствительность метода РТБ и розеточных методик на его основе, надёжность идентификации дефектов структуры монокристаллов.

Общее число публикаций диссертанта составляет более 80 наименований и включает в себя монографии, статьи и тезисы докладов.

Основные результаты диссертационного исследования опубликованы в следующих научных монографиях и статьях.

Монографии

1. *Данильчук Л.Н., Ткаль В.А., Окунев А.О., Дроздов Ю.А.* Цифровая обработка рентгенотопографических и поляризационно-оптических изображений дефектов структуры монокристаллов. НовГУ им. Ярослава Мудрого. Великий Новгород, 2004. 227 с.
2. *Данильчук Л.Н., Окунев А.О., Ткаль В.А.* Рентгеновская дифракционная топография дефектов структуры в кристаллах на основе эффекта Бормана. НовГУ им. Ярослава Мудрого. Великий Новгород, 2006. 493 с.
3. *Данильчук Л.Н., Окунев А.О., Ткаль В.А., Труханов Е.М., Фёдоров А.А., Василенко А.П.* Рентгеновская топография кремния на основе плёночной интерферометрии эпитаксиальных систем и эффекта Бормана. НовГУ им. Ярослава Мудрого. Великий Новгород, 2006. 351 с.
4. *Ткаль В.А., Окунев А.О., Емельянов Г.М., Петров М.Н., Данильчук Л.Н.* Вейвлет-анализ топографических и поляризационно-оптических изображений дефектов структуры монокристаллов. НовГУ им. Ярослава Мудрого. Великий Новгород, 2006. 397 с.
5. *Окунев А.О., Ткаль В.А., Данильчук Л.Н.* Исследование дефектов структуры монокристаллического карбида кремния прямыми физическими методами. НовГУ им. Ярослава Мудрого. Великий Новгород, 2006. 252 с.

Статьи

1. *Данильчук Л.Н., Окунев А.О.* Исследования дефектов структуры монокристаллического карбида кремния прямыми физическими методами // Вестн. Новгород. гос. ун-та. Сер. Естеств. и техн. науки. 1998. № 10. С. 13–18.
2. *Карачинов В.А., Окунев А.О., Дикун Д.Е.* Направленные эффекты пробоя в кристаллах карбида кремния // Физика и химия обработки материалов. 1999. № 6. С. 63–67.
3. *Анисимов В.Г., Буйлов А.Н., Окунев А.О., Ткаль В.А.* Подготовка монокристаллического карбида кремния для рентгенотопографических исследований. М., 1999. 14 с. Деп. в ВИНТИ 09.09.99, 2809–В99.
4. *Дроздов Ю.А., Окунев А.О., Ткаль В.А.* Компьютерная обработка рентгенотопографических изображений дефектов структуры монокристаллов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. - 2002. № 8. С. 6–11.
5. *Данильчук Л.Н., Дроздов Ю.А., Окунев А.О., Ткаль В.А., Шульпина И.Л.* Рентгеновская топография дефектов структуры монокристаллических полупроводников на основе эффекта Бормана (обзор) // Заводская лаб. Диагностика материалов. 2002. Т. 68, № 11. С. 24–33.
6. *Дроздов Ю.А., Окунев А.О., Ткаль В.А., Шульпина И.Л.* Применение компьютерной обработки рентгенотопографических изображений для идентификации дефектов структуры монокристаллов // Заводская лаб. Диагностика материалов. 2002. Т.

68, № 12. С. 30–36.

7. Дроздов Ю.А., **Окунев А.О.**, Ткаль В.А., Шульпина И.Л. Исследование дислокаций в монокристаллическом карбиде кремния поляризационно-оптическим методом // Заводская лаб. Диагностика материалов. 2003. Т. 69, № 1. С. 24–29.

8. Данильчук Л.Н., Дроздов Ю.А., **Окунев А.О.**, Ткаль В.А., Шульпина И.Л. Диагностика монокристаллов применением компьютерной обработки дифракционных и поляризационно-оптических изображений дефектов структуры // Заводская лаб. Диагностика материалов. 2003. Т. 69, № 11. С. 26–32.

9. Буйлов А.Н., Данильчук Л.Н., **Окунев А.О.** Особенности контраста от краевых дислокаций в арсениде галлия в случае эффекта Бормана // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2004. № 1. С. 25–31.

10. Ткаль В.А., **Окунев А.О.**, Дроздов Ю.А., Шульпина И.Л., Данильчук Л.Н. Компьютерная обработка и анализ топографических изображений краевых дислокаций в монокристаллах 6H-SiC // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2004. № 1. С. 32–38.

11. Дроздов Ю.А., Ткаль В.А., **Окунев А.О.**, Данильчук Л.Н. Устранение фоновой неоднородности и влияния зернистости фотоматериалов на топографические и поляризационно-оптические изображения дефектов структуры монокристаллов // Заводская лаб. Диагностика материалов. 2004. Т. 70, № 7. С. 25–34.

12. **Окунев А.О.**, Ткаль В.А., Дроздов Ю.А., Данильчук Л.Н. Топографический контраст винтовых дислокаций в монокристаллах 6H-SiC и его компьютерная обработка // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2004. № 9. С. 58–63.

13. Ткаль В.А., **Окунев А.О.**, Дроздов Ю.А., Данильчук Л.Н. Применение цифровой обработки для выявления топографических изображений микродефектов и дефектов фотоэмульсии // Заводская лаб. Диагностика материалов. 2004. Т. 70, № 11. С. 23–28.

14. Анисимов В.Г., Данильчук Л.Н., Дроздов Ю.А., **Окунев А.О.**, Ткаль В.А. Исследование сложных дефектов упаковки в монокристаллах кремния // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2004. № 11. С. 74–81.

15. **Окунев А.О.**, Данильчук Л.Н., Ткаль В.А., Дроздов Ю.А. Секционные топограммы дислокаций в 6H-SiC // Вестн. Новгород. гос. ун-та. Сер. Естеств. и техн. науки. 2004. № 28. С. 143–149.

16. **Окунев А.О.**, Шульпина И.Л. Рентгенотопографический контраст краевых дислокаций, перпендикулярных поверхности кристалла 6H-SiC // Письма в ЖТФ. 2005. Т. 31, вып. 12, с. 1–7.

17. Данильчук Л.Н., **Окунев А.О.**, Ткаль В.А., Дроздов Ю.А. Экспериментальное определение физической природы ростовых микродефектов в бездислокационном кремнии, выращенном методом Чохральского // Поверхность. Рентгеновские, син-

хротронные и нейтронные исследования. 2005. № 7. С. 13–22.

18. *Белехов Я.С., Ткаль В.А., Окунев А.О., Петров М.Н.* Устранение фоновой неоднородности поляризационно-оптических изображений // Электронный журнал «Исследовано в России», 142, стр. 1434–1441, 2005 г.

(<http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2005/142.pdf>)

19. *Ткаль В.А., Окунев А.О., Данильчук Л.Н., Белехов Я.С.* Фоновая неоднородность топографических и поляризационно-оптических изображений дефектов структуры монокристаллов (способы устранения) // Электронный журнал «Исследовано в России», 210, стр. 2171–2180, 2005 г.

(<http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2005/210.pdf>)

20. *Ткаль В.А., Окунев А.О., Белехов Я.С., Петров М.Н., Данильчук Л.Н.* Цифровая обработка топографических изображений дефектов структуры монокристаллов на основе вейвлет-анализа // Электронный журнал «Исследовано в России», 211, стр. 2181–2190, 2005 г.

(<http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2005/211.pdf>)

21. *Данильчук Л.Н., Окунев А.О., Тимофеева Ю.В., Анисимов В.Г., Ткаль В.А.* Изучение дефектов структуры монокристаллических сплавов $Bi+Sb$ методом двухкристальной топографии в геометрии Брэгга // Электронный журнал «Исследовано в России», 224, стр. 2307–2314, 2005 г.

(<http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2005/224.pdf>)

22. *Окунев А.О., Ткаль В.А., Данильчук Л.Н.* Изображения винтовых дислокаций, перпендикулярных поверхности монокристалла $6H-SiC$, в методе Ланга // Вестн. Новгород. гос. ун-та. Сер. Естеств. и техн. науки. 2005. № 34. С. 106–111.

23. *Окунев А.О., Данильчук Л.Н., Ткаль В.А.* Секционные изображения дислокаций, перпендикулярных поверхности монокристаллов $6H-SiC$ // Физика твёрдого тела. 2006. Т. 48, вып. 11. С. 1962–1969.

24. *Ткаль В.А., Окунев А.О., Белехов Я.С., Петров М.Н., Данильчук Л.Н.* Применение вейвлет-анализа для устранения фоновой неоднородности поляризационно-оптических изображений дефектов структуры монокристаллов // Заводская лаб. Диагностика материалов. 2006. Т. 72, № 7. С. 22–29.

35. *Ткаль В.А., Окунев А.О., Белехов Я.С., Петров М.Н., Данильчук Л.Н.* Устранение зернистости топографических изображений дефектов структуры монокристаллов с помощью вейвлет-анализа // Заводская лаб. Диагностика материалов. 2006. Т. 72, № 8. С. 27–32.

26. *Ткаль В.А., Окунев А.О., Белехов Я.С., Петров М.Н., Данильчук Л.Н.* Выявление особенностей экспериментального контраста при перемасштабировании изображений на основе вейвлет-анализа // Заводская лаб. Диагностика материалов. 2006. Т. 72, № 9. С. 25–33.

27. *Ткаль В.А., Окунев А.О., Белехов Я.С., Петров М.Н., Данильчук Л.Н.* Устранение

зернистости топографических изображений дефектов структуры монокристаллов различными вейвлет-базисами // Заводская лаб. Диагностика материалов. 2006. Т. 72, № 10. С. 23–30.

28. *Ткаль В.А., Окунев А.О., Белехов Я.С., Петров М.Н., Данильчук Л.Н.* Сопоставление результатов цифровой обработки топографического контраста на основе вейвлет-анализа и нелинейной фильтрации с рекурсивным накоплением // Заводская лаб. Диагностика материалов. 2007. Т. 73, № 2. С. 36–45.

29. *Ткаль В.А., Окунев А.О., Белехов Я.С., Петров М.Н., Данильчук Л.Н.* Устранение фоновой неоднородности изображений дефектов структуры монокристаллов различными вейвлетами // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2007. Т. 73, № 3. С. 28–37.

30. *Ткаль В.А., Окунев А.О., Петров М.Н., Данильчук Л.Н.* Вейвлет-обработка топографических изображений с расширенным динамическим диапазоном // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2007. № 5. С. 1–11.

31. *Данильчук Л.Н., Окунев А.О., Иванов К.Г., Тимофеева Ю.В.* Исследование дефектов структуры полуметаллов и полупроводников на основе монокристаллических сплавов (Bi+Sb) методами рентгеновской топографии // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2008. Т. 74, № 3. С. 25–32.

Работа над диссертацией проводилась в рамках:

1. гранта РФФИ № 02-02-17661-а;
2. программы «Научные исследования высшей школы по приоритетным направлениям науки и техники», программа: 202 Новые материалы, раздел 202.01 Материалы для микро- и нанoeлектроники, код Проекта 01.02.048.
3. гранта РФФИ № 06-02-16230-а.