

# 晶体表面畸变的 X 射线双晶衍射研究\*

朱南昌 李润身 陈京一 许顺生

中国科学院上海冶金研究所, 上海, 200050

1989 年 7 月 7 日收到

本文介绍了表面畸变的晶体中 X 射线动力学衍射分层模型的计算原理和通过计算机模拟双晶摇摆曲线获得畸变层信息的方法, 讨论了不同的双晶排列方式对摇摆曲线和模拟计算的影响, 分析了畸变层内应变、损伤分布与摇摆曲线的关系, 并以 B<sup>+</sup> 注入 Si(100) 晶片为例, 给出了模拟结果.

PACC: 6110; 6170; 6820

## 一、引 言

利用双晶衍射仪测量晶体的反射能力与晶体的完整性已有 60 多年的历史<sup>[1,2]</sup>. 早期对畸变晶体的研究是比较粗略的, 仅能了解畸变层内的平均应变<sup>[3,4]</sup>, 或晶体完整性的定性数据(如双晶摇摆曲线的半峰宽). 60 年代, Takagi 和 Taupin 分别独立发展了 X 射线的畸变晶体动力学衍射理论<sup>[5,6]</sup>. 以后 Burgeat 等人首先用该理论模拟计算了经  $\alpha$  粒子轰击的 Si 单晶<sup>[7]</sup>, 但由于计算过程复杂, 模拟结果并不令人满意. Speriosu 建立了处理晶体表面畸变的 X 射线运动学衍射理论<sup>[8,9]</sup>, 节省了计算时间, 并得到了比较好的结果. 近年来, 随着计算机的迅速发展和 X 射线动力学衍射理论计算方法的改进<sup>[10]</sup>, 利用模拟双晶摇摆曲线对畸变晶体进行研究的方法得到了很大的发展. Fukuhara 等人用该模型模拟了 B, P 在 Si 中的扩散<sup>[11]</sup>. Takenchi 等人研究了 GGG 中的离子注入<sup>[12]</sup>. Wie 等人则研究了经 MeV 离子轰击的 GaAs 晶片. 该方法同样也可应用于 III-V 族化合物的异质结构<sup>[13]</sup>、单层及多层外延膜结构的研究<sup>[14]</sup>, 为双晶衍射的应用开辟了一条新路.

本文从高木方程出发, 给出了 X 射线动力学衍射多层模型的迭代公式, 用该公式计算模拟了 Si(100) 晶片的完整及畸变摇摆曲线, 给出了 B<sup>+</sup> 注入所引起的应变及损伤分布, 讨论了不同双晶排列对摇摆曲线和计算过程的影响.

## 二、基本理论

### 1. 分层模型的动力学迭代公式

高木方程组是由 Takagi 和 Taupin 建立的畸变晶体 X 射线衍射动力学理论<sup>[5,6]</sup>,

\* 国家自然科学基金和中国科学院上海冶金研究所离子束开放研究实验室资助的课题.

$$\begin{aligned}\partial\phi_0/\partial S_0 &= -i\pi KCX_{-h}\phi'_{hh}, \\ \partial\phi_h/\partial S_h &= -i\pi KCX_h\phi'_0 + i2\pi K\beta'_h\phi'_h,\end{aligned}\quad (1)$$

式中  $\phi'_0, \phi'_h$  为畸变晶体中 X 射线的入射波和衍射波振幅,  $X$  为  $4\pi$  倍的介质极化率,  $C$  为偏振因子,  $K$  为 X 射线在真空中的波矢.  $S_0, S_h$  分别为平行于入射波矢  $k_0$  和衍射波矢  $k_h$  的单位矢量,  $\beta'_h = (|k'_h| - k)/K$ , 为同畸变量有关的参数 ( $\beta'_h$  同应变的关系推导见附录).

考虑  $\sigma$  偏振态时的 Bragg 非对称衍射, 并假定畸变量是垂直于表面的距离  $Z$  的单元函数, 即  $\phi'_0, \phi'_h$  只是  $Z$  的函数.

$$\frac{\partial}{\partial S_0} = \frac{\partial}{\partial Z} \cdot \frac{1}{\sin(\theta_B + \alpha)}, \quad \frac{\partial}{\partial S_h} = -\frac{\partial}{\partial Z} \cdot \frac{1}{\sin(\theta_B - \alpha)}, \quad (2)$$

式中  $\alpha$  为衍射晶面同表面的夹角, 代入(1)式可得

$$\begin{aligned}d\phi'_0/dZ &= -i\pi(K/\gamma_0)X_{-h}\phi'_h(Z), \\ d\phi'_h/dZ &= -i\pi(K/\gamma_h)X_h\phi'_0(Z) + i2\pi(K/\gamma_h)\beta'_h\phi'_h(Z),\end{aligned}\quad (3)$$

式中  $\gamma_0 = \sin(\theta_B + \alpha)$ ,  $\gamma_h = -\sin(\theta_B - \alpha)$ . 令  $b = \gamma_0/\gamma_h$ ,  $X = \phi'_h/(\sqrt{|b|} \cdot \phi'_0)$ , 和  $A = r_e|F_h|Z/(V_c K \sqrt{|\gamma_0\gamma_h|})$ ,  $r_e$  为经典电子半径,  $F_h$  为衍射晶面的结构因子,  $V_c$  为单位晶胞的体积, 利用关系式

$$X_h = -r_e\lambda^2 F_h/(\pi V_c), \quad (4)$$

(3)式可化简为

$$i dX/dA = -BX^2 - 2DX - B, \quad (5)$$

式中  $B = -F_h/|F_h|$ ,  $D = \frac{\sqrt{|b|}\pi V_c}{|F_h|r_e\lambda^2} \beta'_h$ .

(5)式为含复数的一阶微分方程. 由于  $B, D$  是  $A$  的函数, 不能直接用分离变量的方法求解. 但如果假定  $dA$  足够小, 使  $B, D$  在  $dA$  的范围内变化很小, 即按  $Z$  方向将畸变层分成若干层, 使  $B, D$  在每一层内近似为常数, 这就是分层模型, 此时由(5)式积分可得

$$X_J = \frac{S_J X_{J-1} + i(B_J + D_J X_{J-1}) \tan[S_J(A_J - A_{J-1})]}{S_J - i(D_J + B_J X_{J-1}) \tan[S_J(A_J - A_{J-1})]}, \quad (6)$$

式中  $X_J$  表示经第  $J$  层衍射后的衍射振幅比,  $S_J = iB_J \sqrt{1 - D_J^2/B_J^2}$ . 根据边界条件, 在无穷厚的完整晶体中,  $X_J = X_{J-1}$ , 令完整晶体的衍射振幅比为  $X_0$ , 由(6)式可得

$$X_0 = -D_0 \cdot (1 - \sqrt{1 - B_0^2/D_0^2})/B_0. \quad (7)$$

利用(6), (7)二式进行迭代, 可得到  $A = 0$  时样品表面出射的衍射振幅比  $X(0)$ . 上述公式同样也适用于  $\pi$  偏振的衍射光束, 只要将  $X_{-h}, X_h, F_h$  和  $F_{-h}$  乘以偏振因子  $\cos(2\theta_B)$  即可. 因此, 对于单一偏振态的单晶反射曲线  $R$  可表示为

$$R_{\sigma, \pi} = |X(0)|^2. \quad (8)$$

## 2. 单晶反射曲线 $R$ 与双晶摇摆曲线之间的关系

由(8)式给出的单晶反射曲线  $R$  只有在平行的单色 X 射线入射到晶体上时才能得到<sup>[2]</sup>. 但就一般衍射仪而言, 入射到样品表面的是一束有较大发散度的非单色 X 射线. 利用 DuMond 图<sup>[10]</sup>来分析仅有光栏限制的单晶衍射情形(如图 1), 经光栏后的 X 射线强度

分布一般为一等腰梯形,当转动晶体时,测量得到的是光栏强度分布曲线与单晶的入射  $R$  曲线的卷积曲线在  $\Delta\lambda$  波长范围内的叠加。由于光栏的发散度与  $R$  曲线的半峰宽相比很大,所以一般衍射曲线与  $R$  曲线有很大的区别,单晶反射曲线  $R$  中的信息被淹没。

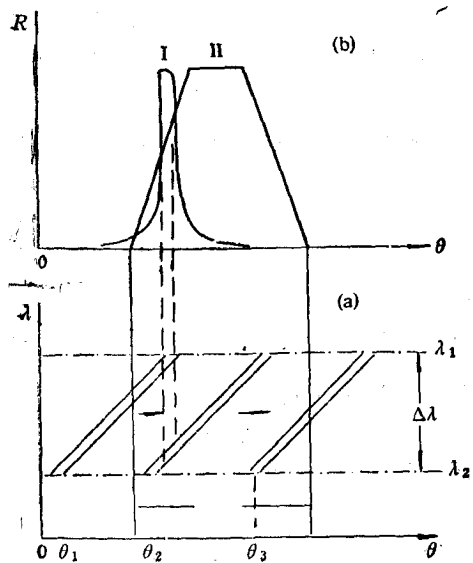


图 1

(a) 为仅有光栏限制时的单晶衍射 DuMond 图  $\theta_1, \theta_2, \theta_3$  为三个不同的衍射角度,  $\Delta\lambda$  为衍射波长范围,  $\Delta$  为光栏发散角, 涂黑区域为发生衍射的区域; (b) 为  $\theta_1$  位置时, 某波长  $\lambda$  的单晶衍射曲线 (I) 与光栏强度曲线 (II) 的交叠示意图

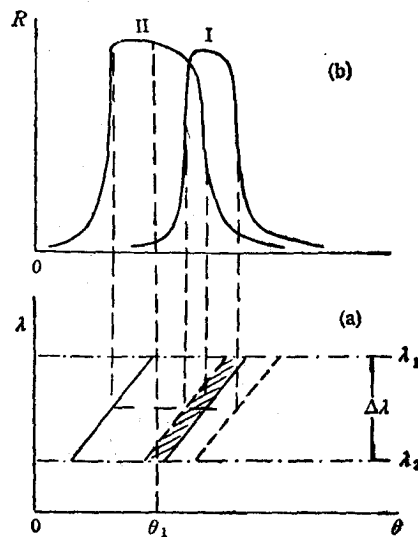


图 2

(a) 为  $(n^\circ, -n^\circ)$  双晶衍射 DuMond 图 阴影部分为发生衍射的区域,  $\Delta\lambda$  为衍射的波长范围; (b) 为当第二晶体在  $\theta_1$  位置时, 第一晶体的出射  $R$  曲线 (I) 与第二晶体的入射  $R$  曲线 (II) 的交叠示意图

以上的缺点在 X 射线双晶衍射中可以得到很大的克服。有关双晶的详细论述可参阅文献 [1, 2, 15]。双晶摇摆曲线与单晶反射曲线  $R$  之间的关系可通过 DuMond 图来分析。图

2 为  $(n^\circ, -n^\circ)$  排列的双晶衍射 DuMond 图和  $R$  曲线卷叠图。

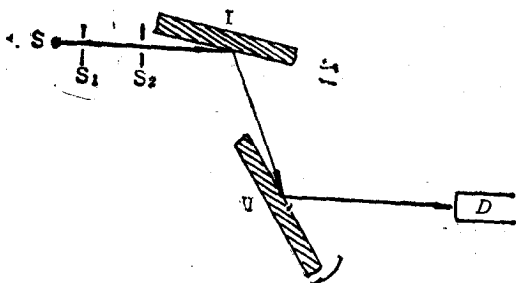


图 3  $(n^\circ, -n^\circ)$  双晶排列  $S$  为 X 射线源;  $S_1, S_2$  为光栏;  $D$  为探测器;  $I, II$  分别为第一、第二晶体

一般条件下,  $(n, -n)$  排列是无色散排列, 即两个晶体的“ $\lambda-\theta$ ”曲线相互平行, 在任一波长处的两条  $R$  曲线卷叠效果是相同的。测量得到的双晶摇摆曲线就是第一晶体的出射  $R$  曲线和第二晶体在不同衍射位置的入射  $R$  曲线的卷积。摇摆曲线的半峰宽取决于两条  $R$  曲线的半峰宽, 摇摆曲线  $RC$  是第二晶体角度偏离的函数

$$RC(\beta) = \eta \int R^I(\alpha) R^{II}(\alpha + \beta) d\alpha, \quad (9)$$

式中  $R^I, R^{II}$  分别为第一晶体的出射  $R$  曲线和第二晶体的入射  $R$  曲线,  $\beta$  为第二晶体入

射束偏离 Bragg 角的角度,  $\eta$  为常数. 如果  $R^1(\alpha)$  的半峰宽很窄, 即  $R^1(\alpha)$  近似于  $\delta$  函数时,  $RC$  曲线近似于第二晶体的人射  $R$  曲线, 对  $(n, -n)$  排列,  $R^I$  和  $R^{II}$  的半峰宽有如下的关系:

$$\Delta\theta_{1/2}^I / \Delta\theta_{1/2}^{II} = |\gamma_0 / \gamma_h|. \quad (10)$$

当  $|\gamma_0| \ll |\gamma_h|$  时, 忽略(9)式所示的卷积是可行的, 这样的双晶排列为  $(n^0, -n^0)$ , 如图 3 所示. 在一般的  $(n, -n)$  对称排列时, 必须考虑(9)式的卷积关系.

一般的 X 射线源引出的 X 射线是非偏振的, 假定  $\sigma$  态和  $\pi$  态这两种偏振态在人射光线中所占比例相等, 即 50% 的  $\sigma$  态和 50% 的  $\pi$  态. 经第一晶体衍射后的光束得到部分偏振, 令偏振后的  $\sigma$  偏振态组成为  $x$ , 则  $\pi$  态的组成为  $(1-x)$ , 它们由下式求得:

$$x / (1-x) = S_\sigma / S_\pi, \quad (11)$$

式中  $S_\sigma, S_\pi$  分别为第一晶体的出射  $R$  曲线在  $\sigma$  态和  $\pi$  态时的面积. 由于在实验条件下难以得到纯  $\sigma$  和  $\pi$  偏振的 X 射线衍射, 并考虑到第一晶体是完整晶体, 所以  $S_\sigma$  和  $S_\pi$  可由理论计算得到. 粗略地有  $S_\pi / S_\sigma \approx |\cos 2\theta_B|$ . 由于  $\sigma, \pi$  两种偏振态的 X 射线互不干涉, 所以经第二晶体衍射后的摇摆曲线是两种偏振态的简单叠加, 总的  $RC$  曲线  $RC_T$  为

$$RC_T = (S_\sigma \cdot RC_\sigma + S_\pi \cdot RC_\pi) / (S_\sigma + S_\pi), \quad (12)$$

式中  $RC_\sigma, RC_\pi$  表示单纯  $\sigma$  态和  $\pi$  态时的双晶摇摆曲线. 当  $\theta_B$  接近  $45^\circ$  时,  $S_\pi \approx 0$ ,  $\pi$  偏振态可忽略不计.

### 三、实验、计算与讨论

#### 1. 完整晶体

样品为高阻 Si(100) 晶片,  $CuK\alpha_1$  辐射, 测量了掠入射衍射 (Si113, -Si113) 的摇摆曲线(图 4). 考虑了偏振和卷积影响的理论计算曲线与实验曲线能很好地符合, 两种不同偏振状态下的摇摆曲线有较大区别, 如图 5, 综合的摇摆曲线中  $\sigma$  偏振态所占成分为

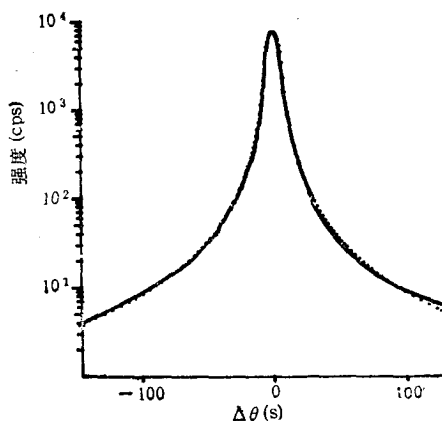


图 4  $CuK\alpha_1$  辐射, (Si113, -Si113) 衍射的双晶摇摆曲线 .....为实验曲线; ——为理论计算曲线

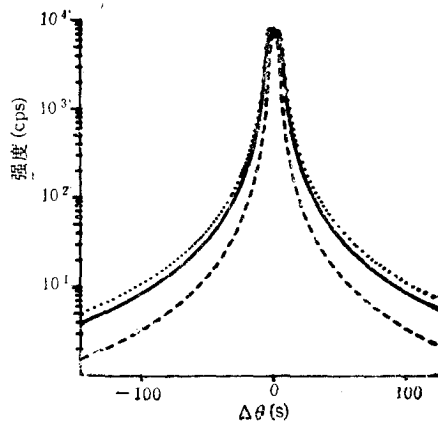


图 5  $CuK\alpha_1$  辐射, (Si113, -Si113) 衍射的理论计算双晶摇摆曲线 .....为  $\sigma$  偏振态摇摆曲线; ---为  $\pi$  偏振态摇摆曲线; ——为理论计算的  $\sigma$  偏振态和  $\pi$  偏振态的综合摇摆曲线

0.68,  $\pi$  偏振态则占了 0.32. 对 (Si400, -Si400) 对称衍射,  $\sigma$  和  $\pi$  偏振态的组成分别为 0.79 和 0.21. 当 Bragg 衍射角  $\theta_B = 45^\circ$  时,  $\pi$  偏振态的比例减小至零.

### 2. 畸变晶体

样品为  $n$  型 Si(100) 晶片, 电阻率为 5.6—7.1  $\Omega/\text{cm}$ , 经 350keV 的  $B^+$  常温注入, 剂量为  $2.5 \times 10^{15}/\text{cm}^2$ , 分别测量了 (Si400, -Si400) 和 (Si113, -Si113) 衍射的摇摆曲线, 如图 6 和图 7 所示. 模拟是根据 (Si400, -Si400) 摇摆曲线进行的, 得到的应变和

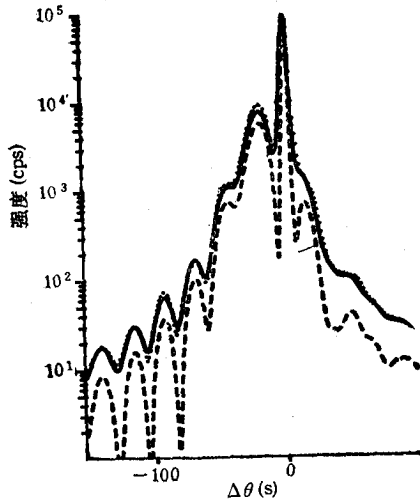


图 6  $\text{CuK}\alpha_1$  辐射, (Si400, -Si400) 对称衍射 (畸变晶体) 的双晶摇摆曲线 .....为实验摇摆曲线; ——为理论计算摇摆曲线; ---为未经卷积的第二晶体入射 R 曲线

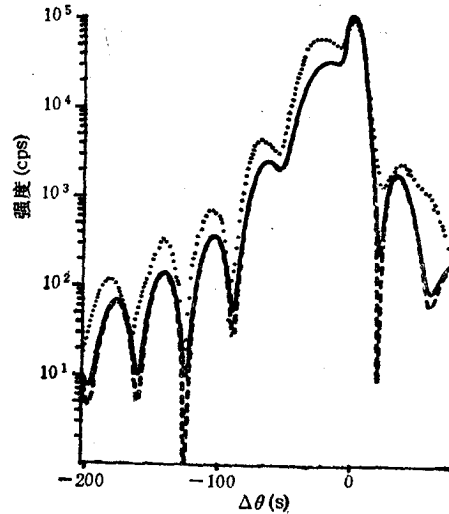


图 7  $\text{CuK}\alpha_1$  辐射, (Si113, -Si113) 掠入射衍射 (畸变晶体) 的摇摆曲线 曲线说明同图 6

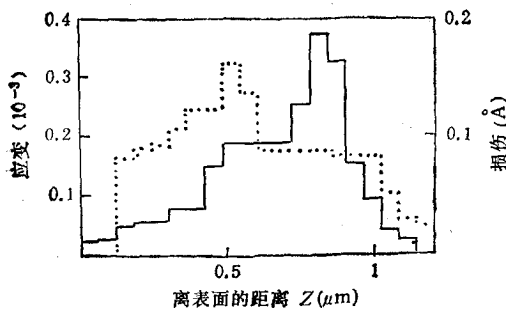


图 8 经  $B^+$  注入 (能量为 350keV; 剂量为  $2.5 \times 10^{15}/\text{cm}^2$ ) 的 Si(100) 晶片在注入态时的应变和损伤分布曲线 ——为应变分布曲线; .....为损伤分布曲线

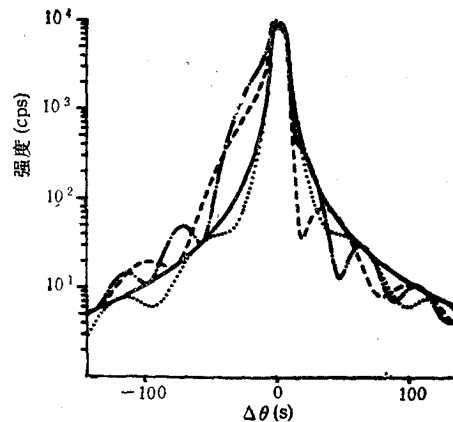


图 9 不同条件下的 (Si113, -Si113) 衍射理论计算双晶摇摆曲线 ——为完整晶体; ---为晶体表层  $0.5\mu\text{m}$  厚度内有  $1 \times 10^{-4}$  均匀应变; .....为在  $0.75\mu\text{m}$  厚度内有  $1 \times 10^{-4}$  应变; -·-·-·为在  $0.5\mu\text{m}$  厚度内有  $0.15\text{Å}$  的损伤

损伤分布如图 8 所示, 用该分布计算了 (Si113, -Si113) 的摇摆曲线 (见图 7)。对 (Si400, -Si400) 衍射, 未经卷积的摇摆曲线与经卷积的摇摆曲线有很大的区别 (见图 6), 而对 (Si113, -Si113) 衍射, 卷积的作用较小, 仅在峰谷处有差别 (见图 7), 因此, 对于 (Si113, -Si113) 衍射, 有时可忽略卷积以减少计算量。

### 3. 应变、损伤与摇摆曲线的关系

应变、损伤与摆动曲线的关系是不同的, 应变通过畸变参量  $\beta'_h$  与摇摆曲线相联系 (见附录), 而损伤则与结构因子  $F_h$  有关

$$F_h = F_h^0 \cdot \exp(-M), \quad (13)$$

式中  $F_h^0$  为无损伤时的结构因子,  $M = 8\pi^2 U^2 \sin^2 \theta / \lambda^2$ ,  $U^2$  为晶体中原子中心与其平衡位置在垂直于反射晶面方向上的位移平方的平均值 (均方位移),  $U$  被定义为损伤。损伤对结构因子的影响随着衍射角的增加而增大。单纯的应变将引起摇摆曲线不对称的振荡, 而损伤引起摇摆曲线对称的振荡, 如图 9 所示。振荡周期与损伤和应变的深度有很大的关系, 振荡周期愈小, 畸变分布的深度就愈深。摇摆曲线的形状与畸变分布线型也是分不开的, 同样的畸变大小, 不同的线型分布, 摇摆曲线形状有明显差别。非晶被认为仅产生吸收和漫散射。理论中忽略了热漫散射和缺陷漫散射对摇摆曲线的贡献。

## 四、结 论

鉴于近完整晶体的双晶摇摆曲线对应变、损伤有较高的灵敏度, 虽然模拟工作比较繁琐, 但与电子显微镜、SIMS 等测量手段相比, 优点是明显的。首先不需要复杂的样品制备, 测试对试样是非破坏性的。摇摆曲线对应变有很高的灵敏度, 同时也受到晶体中的空位、间隙及替代原子等点缺陷的影响, 通过对摇摆曲线的模拟能明确它们的分布情况和总体效应, 而电子显微镜仅能观测到尺寸较大的缺陷如位错聚集、杂质聚集等。X 射线双晶摇摆曲线测量的方法基本上不受杂质分布深度和原子质量大小的影响。该方法不但适用于离子注入材料的研究, 也可以对外延单晶膜和超晶格样品进行测试和模拟计算。

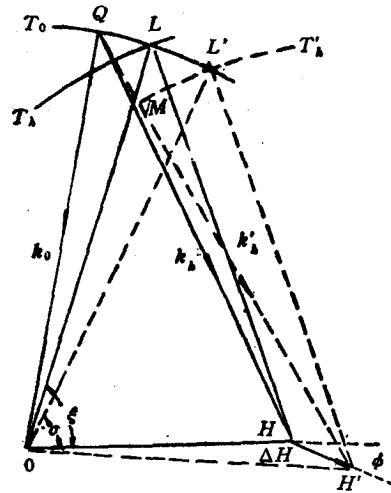
总之, X 射线双晶衍射测试和摇摆曲线计算机模拟为近完整晶体的测试和研究提供了一种新的方法。

本工作使用了关安民研究员和澳大利亚 James S. Williams 教授提供的样品, 在此表示感谢。

## 附 录

### $\beta'_h$ 与微小应变量的关系

$\beta'_h$  与畸变量  $\Delta H$  的几何关系如附录图 1 所示。假定  $\Delta H$  垂直于晶体表面,  $\Delta H$  与衍射面倒易矢量  $OH$  成  $\phi$  角。由于  $\beta'_h = (|k'_h| - k)/K$ , 对微小畸变, 由附录图 1 可知  $\beta'_h \approx QM/K$ , 而  $QM = (QL + LL') \cdot \sin(2\theta_b)$ , 其中  $QL$  与入射波矢  $k_0$  偏离完整晶体 Bragg 角  $\theta_b$  的角度有关, 而  $\Delta\theta_1 = \angle LOL'$  是由畸变量  $\Delta H$  引起的衍射角偏离,  $k = nK$ ,



附录图 1  $\beta'_k$  与应变的几何关系  $T_0, T_k, T'_k$  为以晶体中的波矢  $k$  为半径,  $O, H, H'$  为圆心的圆弧;  $L, L'$  为完整晶体和畸变晶体的 Lorentz 点

$n$  为晶体对 X 射线的折射率,  $n \approx 1$ , 所以  $k \approx K$ ,  $\beta'_k = \angle QOL \cdot \sin(2\theta_B)$ .  $\angle QOL = \theta_B - \theta$ ,  $\theta$  为入射 X 射线与衍射晶面的夹角. 令  $\angle LOH = 90^\circ - \theta_B = \xi$ ,  $\angle L'OH' = \delta$ ,  $\angle HOH' = \alpha$ , 则  $\angle LOL' = \xi - \delta + \alpha = \Delta\theta_\perp$ , 在三角形  $OHH'$  中,  $\alpha \approx \tan \alpha = \Delta H \cdot \sin \phi / OH$ , 而  $\varepsilon = -\Delta H \cdot \cos \phi / OH = \varepsilon_\perp \cdot \cos^2 \phi$ , 因此  $\alpha \approx -\varepsilon_\perp \cdot \sin \phi \cdot \cos \phi$ . 由于  $OH' = \sqrt{OH^2 + \Delta H^2 + 2OH \cdot \Delta H \cos \phi}$ ,  $\cos \xi = \sin(\theta_B) = OH / (2 \cdot k)$ ,  $\cos \delta = OH' / (2 \cdot k)$ , 所以  $\cos \delta = \cos \xi \cdot OH' / OH \approx \sin \theta_B (1 + \Delta H \cdot \cos \phi / OH) = \sin \theta_B \cdot (1 - \varepsilon_\perp \cdot \cos^2 \phi)$ . 由三角公式可得:  $\cos \delta = \cos(\xi - \delta - \xi) = \cos(\xi - \delta) \cdot \cos \xi + \sin(\xi - \delta) \cdot \sin \xi$ , 对微小畸变,  $(\xi - \delta)$  是一个小量, 因此  $\cos \delta \approx \sin(\theta_B) + (\xi - \delta) \cos(\theta_B) = \sin \theta_B (1 - \varepsilon_\perp \cos^2 \phi)$ , 等式两边移项合并可得  $(\xi - \delta) = -\varepsilon_\perp \tan \theta_B \cos^2 \phi$ , 因此

$$\Delta\theta_\perp \approx -\varepsilon_\perp \tan \theta_B \cos^2 \phi - \varepsilon_\perp \sin \phi \cos \phi, \quad (\text{A.1})$$

式中等号右端第一项为晶面间距变化引起的角度偏离, 第二项为应变引起的晶面偏转角. 在掠入射时  $\phi$  取正值. 在仅有垂直应变时,  $\beta'_k \approx (\theta_B - \theta + \Delta\theta_\perp) \cdot \sin(2\theta_B)$ .

用上述的方法可同样地推导在仅有平行于晶体表面的畸变时的情况. 令平行于晶体表面的应变为  $\varepsilon_\parallel$ , 则

$$\Delta\theta_\parallel \approx -\varepsilon_\parallel \tan \theta_B \sin^2 \phi + \varepsilon_\parallel \sin \phi \cos \phi. \quad (\text{A.2})$$

考虑折射校正后, Bragg 角  $\theta_B$  应改为  $\theta_B + (1 - b)\lambda_0 / (2b \sin 2\theta_B)$ , 当垂直应变和平行应变同时存在时,  $\beta'_k$  与应变的关系可表示为

$$\beta'_k \approx (\theta_B - \theta + \Delta\theta_\perp + \Delta\theta_\parallel) \sin(2\theta_B) + (1 - b)\lambda_0 / (2b). \quad (\text{A.3})$$

[1] W. H. Zachariasen, "Theory of X-Ray Diffraction in Crystals", NGBEMBER, (1951), p. 147—155.

[2] R. W. James, The Crystalline State, Vol. II, "The Optical Principles of the Diffraction of X-Rays", (1954), p. 305—322.

[3] B. G. Cohen, Solid State Electronics, 10(1967), 33.

[4] K. Yagi et al., Jap. J. Appl. Phys., 9(1970), 246.

- [ 5 ] S. Takagi, *Acta Cryst.*, 15(1962), 1311.
- [ 6 ] D. Taupin, *Bull. Soc. Fr. Miner. Crist.*, 87(1964), 469.
- [ 7 ] J. Burgeat *et al.*, *J. Appl. Phys.*, 40(1969), 3505.
- [ 8 ] V. S. Speriosu *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, 34(1979), 539.
- [ 9 ] V. S. Speriosu, *J. Appl. Phys.*, 52(1981), 6094.
- [10] C. R. Wie *et al.*, *J. Appl. Phys.*, 59(1986), 3743.
- [11] A. Fukuhara *et al.*, *Acta Cryst.*, A33(1977), 137.
- [12] T. Takeuchi *et al.*, *J. Appl. Phys.*, 54(1983), 715.
- [13] S. Bensoussan *et al.*, *J. Appl. Cryst.*, 20(1987), 222.
- [14] M. A. G. Halliwell *et al.*, *J. Cryst. Growth*, 68(1984), 523.
- [15] 许顺生、冯端主编, X 射线衍射衬貌相学, 科学出版社, (1987), 158—173 页.
- [16] J. W. M. DuMond, *Phys. Rev.*, 52(1937), 872.

## INVESTIGATION OF THE SURFACE DISTORTED CRYSTALS BY DYNAMICAL X-RAY DOUBLE-CRYSTAL DIFFRACTION

ZHU NAN-CHANG LI RUN-SHEN CHEN JING-YI XU SHUN-SHENG

*Shanghai Institute of Metallurgy, Academia Sinica, Shanghai, 200050*

(Received 7 July 1989)

### ABSTRACT

A lamellar X-ray dynamic diffraction theory of the surface distorted crystals and the simulation method for obtaining information in distorted layers are presented. Influence of different double crystals' arrangement upon rocking curves(RCs) and simulation procedure are discussed. The relation between RCs and the depth distributions of strain and damage in distorted crystals is analysed. As an example, the simulation results of the B<sup>+</sup> implanted Si(100) wafers are given.

**PACC:** 6110; 6170; 6820