

Application de la Théorie Dynamique de S. Takagi au Contraste d'un Défaut Plan en Topographie par Rayons X. II. Franges de Moiré

PAR D. SIMON ET A. AUTHIER

Laboratoire de Minéralogie-Cristallographie associé au C.N.R.S., Faculté des Sciences de Paris, 1, rue Victor Cousin, Paris 5e, France

(Reçu le 1 mars 1968)

A particular moiré fringe pattern is observed on X-ray topographs in silicon crystals irradiated by protons. The kinematical theory of X-ray diffraction explains very well the geometry of these fringes on traverse topographs. Takagi's dynamical theory of X-ray diffraction is used to calculate the fringe contrast on section topographs. There is a good agreement between theory and experiment.

1. Historique

Les franges de moiré ont été observées depuis longtemps en microscopie électronique (Basset, Menter & Pashley, 1958; Gevers, 1962, 1963; Hashimoto, Mannami & Naiki, 1961). A l'aide des rayons X, leur mise en évidence est beaucoup plus récente. Elle s'est faite essentiellement par deux méthodes. D'une part, Bonse & Hart (1966) ont créé un interféromètre à trois cristaux permettant l'observation de telles franges. D'autre part, Chikawa (1965) et Lang & Miuscov (1965) ont examiné par topographies aux rayons X des cristaux où une interface s'était créée près de la surface, entraînant la formation de franges de moiré (épitaxie sur un cristal de CdS et fissure dans un cristal de quartz, respectivement). Enfin, par cette même méthode, Brádlér & Lang (1968) ont observé tout récemment des franges de moiré à l'aide de deux cristaux séparés de silicium, expérience extrêmement délicate car les désorientations mises en évidence à l'aide des rayons X sont très faibles.

2. Description de l'expérience

Nous avons étudié par topographies aux rayons X des franges de moiré dans du silicium irradié par des protons (Authier, Lallemand & Pfister, 1963; Authier & Montenay-Garestier, 1964). Les conditions expérimentales de cette irradiation sont les suivantes: la température varie entre 800°C et 900°C, l'énergie des deutons est de 700 keV et les doses sont comprises entre $5 \cdot 10^{17}$ et $5 \cdot 10^{18}$ H_2^+ cm^{-2} . Les zones irradiées se présentent sous forme de bandes ayant 1 mm de largeur et 5 mm de longueur environ (Fig. 1). La profondeur de pénétration des deutons dans le cristal ne dépend que de leur énergie. Pour une énergie de 700 keV, elle est environ de 10 μm . L'étude de l'interaction des protons avec les atomes du réseau (Lallemand, 1962) a montré que la plupart des défauts créés par l'irradiation sont situés à l'intérieur d'une couche de 1 à 2 μm d'épaisseur, à la limite de pénétration des protons. Dans cette région, la densité de défauts est grande et il peut se former des précipités. Cette zone de défauts

créée des contraintes, donc des déformations, dans le reste du cristal mais surtout dans sa partie supérieure qui a une épaisseur beaucoup plus faible que la partie inférieure. Cette déformation est en première approximation homogène et conserve aux deux parties du cristal leur caractère de cristaux parfaits. Nous obtenons donc une superposition de deux cristaux parfaits, ayant des paramètres légèrement différents et dont les plans réticulaires ont subi une légère rotation l'un par rapport à l'autre. Les franges de moiré sont la conséquence de cette superposition de deux cristaux non identiques, séparés par une couche très mince de cristal imparfait, parallèle aux faces du cristal.

3. Nature des franges observées

(i) Rappel de la théorie géométrique

Pour un cristal parfait, la théorie géométrique donne l'expression de l'amplitude diffractée, sous la forme:

$$A = F_{hkl} \sum_j \exp(-2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r}_j),$$

F_{hkl} étant le facteur de structure, \mathbf{h} le vecteur du réseau réciproque correspondant à la réflexion considérée et \mathbf{r}_j un vecteur repérant la position de la maille j .

Considérons maintenant deux cristaux superposés et appelons $d\mathbf{h}$ la variation du vecteur du réseau réciproque entre ces deux cristaux; $d\mathbf{h}$ est un vecteur indépendant de la position si les deux cristaux sont parfaits. Soit $\mathbf{h} \cdot \mathbf{r} = N$ l'équation de la famille de plans réflecteurs utilisée. En différentiant cette relation, on obtient:

$$\mathbf{h} \cdot d\mathbf{r} + d\mathbf{h} \cdot \mathbf{r} = 0 \quad (3-1)$$

où $d\mathbf{r} = \mathbf{u}$ est le vecteur déplacement des atomes de l'un des cristaux par rapport à l'autre. Pour ce cristal, l'amplitude diffractée est:

$$A' = F_{hkl} \sum \exp\{-2\pi i \mathbf{h} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{u})\} = A \exp(-2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{u}) \\ = A \exp(2\pi i d\mathbf{h} \cdot \mathbf{r})$$

Il existe donc entre ces deux amplitudes un déphasage égal à $2\pi d\mathbf{h} \cdot \mathbf{r}$. Nous verrons plus loin que c'est ce déphasage qui entraîne la formation de franges de moiré. Dans ces conditions, les lieux des points d'égalé

intensité sont tels que $\mathbf{dh} \cdot \mathbf{r} = \text{constante}$. Ce sont donc des plans perpendiculaires à \mathbf{dh} . Les franges observées sur les topographies sont les intersections de ces plans avec la face de sortie du cristal. Elles sont équidistantes et, si nous appelons dh_{\parallel} la composante de \mathbf{dh} sur le plan de l'interface, l'interfrange est égal à $1/dh_{\parallel}$.

(ii) *Les franges observées sont bien des franges de moiré*

Nous avons montré expérimentalement que l'interfrange était indépendant de la longueur d'onde du rayonnement utilisé et qu'il était inversement proportionnel à l'ordre de la réflexion (voir Fig. 1). Ces deux propriétés sont caractéristiques des franges de moiré.

(iii) *Propriétés géométriques des franges observées*

Des observations faites en modifiant la dose de l'irradiation et en utilisant des plans réflecteurs variés, nous avons conclu que la direction des franges ne dépendait pas du plan réflecteur utilisé et que l'interfrange était inversement proportionnel à $(\mathbf{h} \cdot \mathbf{n})$ (voir Tableau 1), \mathbf{n} étant un vecteur unitaire suivant la normale aux faces du cristal.

Tableau 1. *Variation du nombre de franges en fonction du produit $\mathbf{h} \cdot \mathbf{n}$ pour une irradiation donnée*

hkl	$\beta = (\mathbf{h}, \mathbf{n})$	$\mathbf{h} \cdot \mathbf{n} = \cos \beta / \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$	N	$\frac{\mathbf{h} \cdot \mathbf{n}}{N}$
$\bar{1}11$	$70^\circ 30'$	0,578	3	0,193
$1\bar{1}\bar{3}$	80	0,577	3	0,192
115	38 57	4,042	21	0,192
220	35 20	2,308	12	0,192
333	0	5,196	27	0,192
$3\bar{3}\bar{1}$	48 42	2,877	15	0,192
$\bar{3}33$	70 30	1,734	9	0,193
$2\bar{2}0$	90	0	0	-

Remarque: La topographie 333 est obtenue par réflexion; les autres le sont par transmission.

En particulier, en choisissant des plans réflecteurs perpendiculaires aux faces du cristal et à l'interface, c'est-à-dire tels que $\mathbf{h} \cdot \mathbf{n} = 0$, nous avons constaté la disparition des franges [voir la Fig. 3(c) de l'article de Authier, Lallemand & Pfister (1963)]. Ceci nous a amenés à supposer que le vecteur \mathbf{u} était parallèle à \mathbf{n} , et à poser $\mathbf{u} = n\mathbf{u}(\mathbf{r})$. Ceci correspond à un déplacement des atomes normal à la surface du cristal ce qui est tout à fait vraisemblable, le faisceau de protons étant également normal à la surface. Si on remplace \mathbf{u} par cette valeur dans l'expression (3-1), on obtient:

$$\mathbf{dh} = -\nabla(\mathbf{h} \cdot \mathbf{u}) = -(\mathbf{h} \cdot \mathbf{n})\nabla u. \quad (3-2)$$

On voit bien que la direction des franges ne dépend que de la direction de ∇u donc de la déformation et que l'interfrange est inversement proportionnel à $(\mathbf{h} \cdot \mathbf{n})$ (voir Tableau 1). On peut ajouter que, dans ce cas, les franges de moiré sont également des franges d'égalité de déformation ($|\nabla u| = \text{constante}$).

Ainsi, nous avons montré que les franges observées étaient des franges de moiré ayant des caractéristiques

géométriques particulières dues à la nature du vecteur déplacement \mathbf{u} . Leur origine est à la fois une rotation des plans réticulaires et une variation de paramètre du réseau.

4. Théorie dynamique appliquée au contraste des franges de moiré

(i) *Rappel de la théorie dynamique dans le cas du cristal parfait sans absorption*

Dans un précédent article concernant les fautes d'empiement (Authier & Simon, 1968)* nous avons développé la théorie de Takagi (1962) et nous avons donné les solutions de l'équation de propagation dans les cas d'ondes incidentes quelconques, plane et sphérique. Ces solutions se présentent sous forme de fonctions complexes lentement variables de la position, auxquelles nous avons donné le nom de pseudo-amplitudes. Pour une onde incidente quelconque, les pseudo-amplitudes dans les directions réfléchie et réfractée sont respectivement (A.S. 2-5, 2-7).

$$D_h(P) = \frac{-i\pi k \chi_h \gamma_0}{\sin 2\theta} C \int_{AB} D_0^{(\omega)}(x) J_0(B\sqrt{l^2 - x^2}) dx \quad (4-1)$$

$$D_0(P) = D_0^{(\omega)}(A) - \frac{B}{2} \int_{BA} D_0^{(\omega)}(x) \sqrt{\frac{l+x}{l-x}} J_1(B\sqrt{l^2 - x^2}) dx. \quad (4-2)$$

l , x , et le domaine d'intégration sont définis dans la légende de la Fig. 2;

$$B = \frac{2\pi k \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}} C |\sqrt{\gamma_0 \gamma_h}}{\sin 2\theta}$$

$k = 1/\lambda$ est le nombre d'ondes dans le vide $\chi_h, \chi_{\bar{h}}$ sont les termes de rang hkl et $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$ du développement en série de Fourier de la susceptibilité électrique du cristal.

* Pour faire référence à une équation de ce premier article, nous écrirons 'A.S.' suivi du numéro de l'équation (ex. A.S. 2-5).

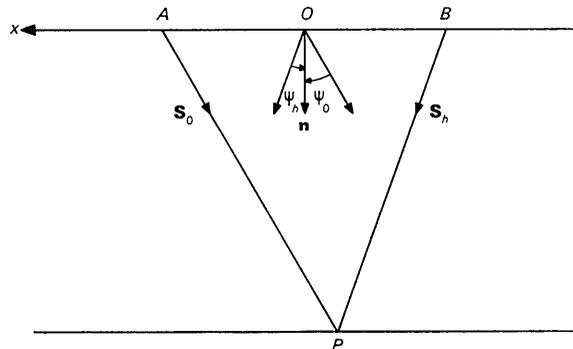


Fig. 2. S_0 et S_h sont les vecteurs unitaires dans les directions incidente et réfléchie respectivement. \mathbf{n} est le vecteur unitaire perpendiculaire à la face d'entrée du cristal $OA = OB = l$, x est l'abscisse par rapport à O d'un point quelconque de AB .

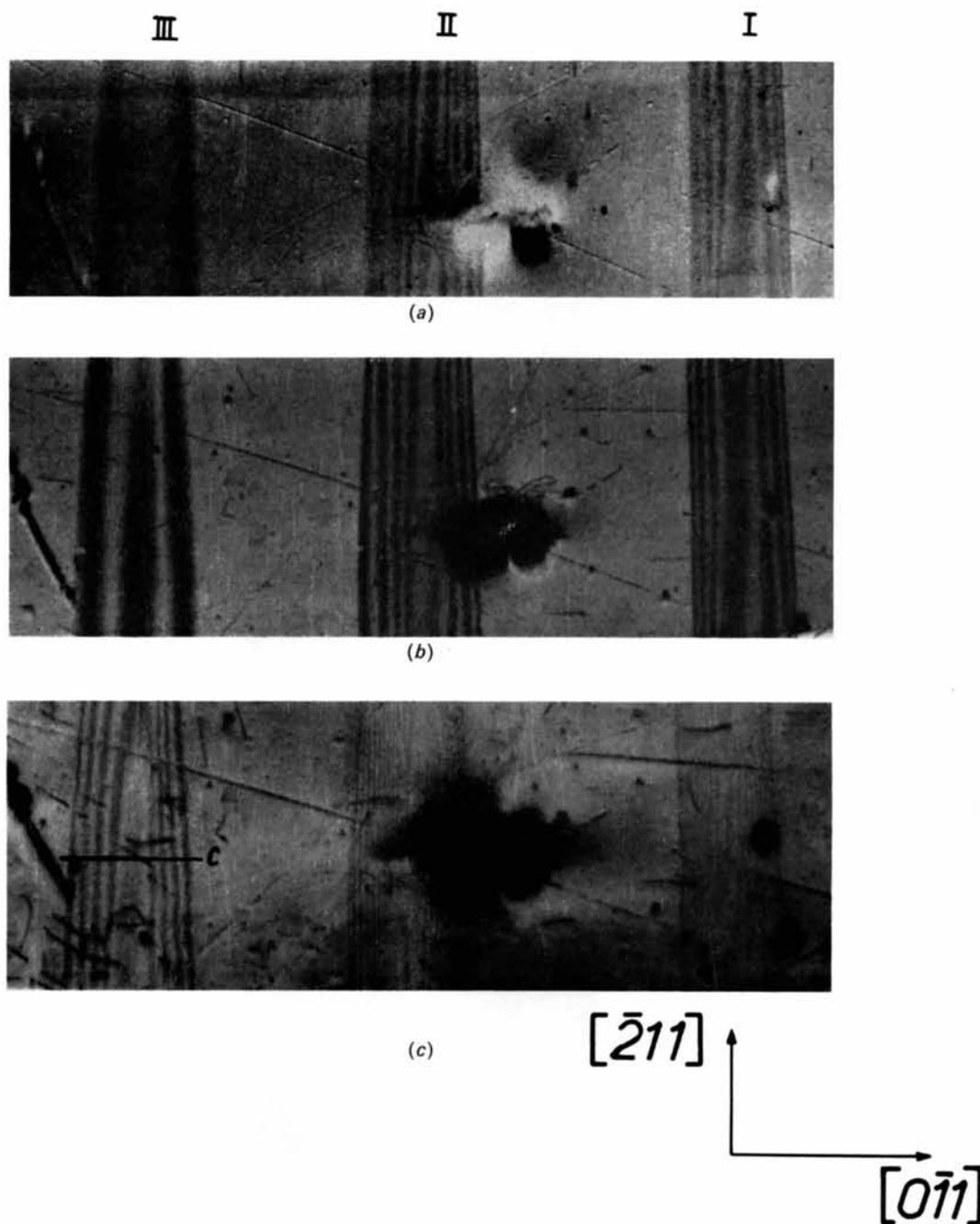


Fig. 1. Topographies d'un cristal de silicium irradié par des protons. Trois bandes ont été irradiées (I, II, III). Les doses reçues sont respectivement de 10^{18} , 10^{18} , $5 \cdot 10^{17}$, $H_2^+ \text{ cm}^{-2}$. Des franges de moiré apparaissent dans chaque bande. (a) Réflexion $(\bar{1}11)$, $\lambda \text{ Cu } K\alpha_1$, $G=18$, (b) Réflexion $(\bar{1}11)$, $\lambda \text{ Mo } K\alpha_1$ $G=18$, (c) Réflexion (333) , $\lambda \text{ Mo } K\alpha_1$ $G=18$. L'interfrange est le même sur les topographies (a) et (b), trois fois plus petit sur la topographie (c).



Fig. 6. Section $(\bar{3}33)$ correspondant à la coupe c de la Fig. 1(c),
 λ Mo $K\alpha_1$, $G = 185$.

$$\begin{aligned} \psi_0 &= (\mathbf{S}_0, \mathbf{n}) & \gamma_0 &= \cos \psi_0 & \alpha_0 &= \sin \psi_0 \\ \psi_h &= (\mathbf{S}_h, \mathbf{n}) & \gamma_h &= \cos \psi_h & \alpha_h &= \sin \psi_h \end{aligned}$$

θ est l'angle de Bragg.

Pour une onde incidente sphérique, les pseudo-amplitudes sont (A.S. 2-14, 2-15):

$$D_h(x_0) = -i \frac{D_0^{(a)}}{4r_0} \sqrt{kr_0} \frac{C\chi_h}{\sin 2\theta} \times \exp(-i\pi/4) J_0(B\sqrt{l^2 - x_0^2}) \quad (4-3)$$

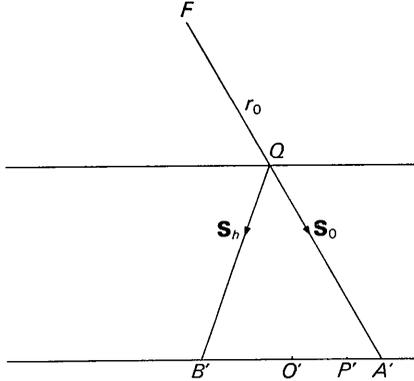


Fig.3. Triangle de Borrmann. F est le foyer, $FQ=r_0$ et $O'P'=x_0$.

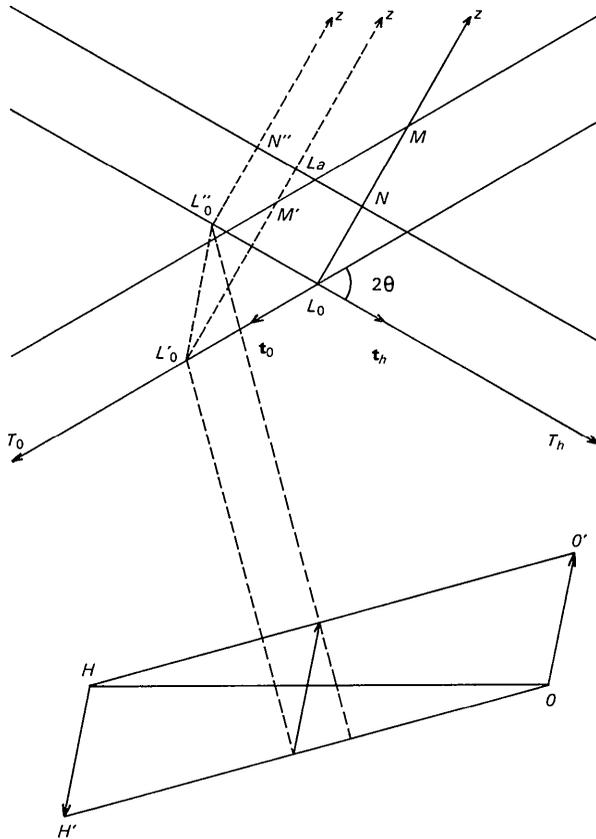


Fig.4. Surfaces de dispersion pour les deux cristaux superposés.

$$D_0(x_0) = \frac{D_0^{(a)}}{4\pi r_0} \left\{ \exp \left[-\pi i \frac{k\gamma_0^2}{r_0} (l-x_0)^2 \right] - \exp(-i\pi/4) \frac{\pi \sqrt{kr_0} \sqrt{\chi_h \chi_h}}{\sin 2\theta} \times \sqrt{\frac{\gamma_h}{\gamma_0}} \sqrt{\frac{l+x_0}{l-x_0}} J_1(B\sqrt{l^2 - x_0^2}) \right\}. \quad (4-4)$$

r_0, x_0 sont définis à la légende de la Fig.3.

De plus, dans le cas de l'onde plane, les pseudo-amplitudes se déduisent des précédentes par une transformation de Fourier.

(ii) *Théorie dynamique appliquée à l'étude des franges de moiré*

Dans l'article précédent, nous avons étudié le cas d'une faute d'empilement séparant deux régions de cristal parfait non désorientées. Nous allons maintenant nous intéresser au cas où il y a une désorientation entre deux cristaux parfaits.

Comme dans le cas de la faute d'empilement, le premier cristal donne une onde réfractée D_0^I et une onde réfléchie D_h^I . Ces deux ondes sont incidentes sur le second cristal. Chacune, à son tour, engendre deux ondes $D_0^{II}(O^I), D_h^{II}(O^I)$ pour l'onde D_0^I et $D_0^{II}(h^I), D_h^{II}(h^I)$ pour l'onde D_h^I . Sur les topographies, nous observons dans la direction réfléchie l'interférence des ondes $D_h^{II}(O^I)$ et $D_0^{II}(h^I)$.

(a) *Ondes incidentes sur le second cristal. Choix des vecteurs d'onde*

Les expressions (4-1) et (4-2) montrent que les pseudo-amplitudes des ondes réfractée et réfléchie par le second cristal dépendent de l'état de l'onde incidente sur sa face d'entrée. Elles font intervenir, d'autre part, des fonctions dont le calcul analytique n'est possible que si les extrémités des vecteurs d'onde \mathbf{K}_0 et \mathbf{K}_h , fixés arbitrairement, se trouvent au point de Lorentz, point d'intersection des asymptotes de la surface de dispersion relative au cristal considéré. Dans ces conditions, le calcul montre que ces fonctions sont des fonctions de Bessel qui apparaissent dans les expressions (4-1) et (4-2).

Voyons, tout d'abord, comment s'expriment les ondes à la sortie du premier cristal. Si nous supposons que la mince couche de défauts qui sépare les deux cristaux est équivalente, du point de vue de la diffraction des rayons X, à une couche de vide, nous aurons après sa traversée:

$$D_h^I = D_h^I(x^I) \exp \left(-2\pi i \frac{k\chi_0}{2\gamma_h} z^I \right) \exp(-2\pi i \mathbf{k}_h^I \cdot \mathbf{r}^I)$$

où $\mathbf{k}_h^I = \overrightarrow{HN}$ (voir Fig.4) est un vecteur d'onde dans le vide, \mathbf{r}^I un vecteur de position sur la face de sortie du premier cristal et $D_h^I(x^I)$ est donné par l'expression (4-3). Pour l'onde réfractée, on a de même:

$$D_0^I = D_0^I(x^I) \exp \left(-2\pi i \frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z^I \right) \exp(-2\pi i \mathbf{k}_0^I \cdot \mathbf{r}^I)$$

où $\mathbf{k}_0^I = \overrightarrow{OM}$ et $D_0^I(x^I)$ est donné par l'expression (4-4). Dans le premier cristal, la surface de dispersion est repérée par les trois points O, H, L_0 .

Le vecteur du réseau réciproque correspondant à la réflexion considérée est $\overrightarrow{HO} = \mathbf{h}$. Dans le second cristal, si nous prenons le même direction incidente que dans le premier cristal, le vecteur du réseau réciproque est $\mathbf{h}' = \overrightarrow{H'O} = \overrightarrow{HO} + \overrightarrow{H'H} = \mathbf{h} - \mathbf{dh}$. Mais, si nous prenons comme direction incidente la direction du vecteur d'onde de l'onde réfléchie par le premier cristal, le vecteur du réseau réciproque est: $-\mathbf{h}' = \overrightarrow{O'H} = \overrightarrow{OH} + \overrightarrow{O'O} = -\mathbf{h} + \mathbf{dh}$. Dans le premier cas (onde transmise-réfléchie), il a été montré (Authier, 1966) que L_0 devient L'_0 tel que:

$$\overrightarrow{L'_0 L_0} = \left(\frac{\mathbf{dh} \cdot \mathbf{s}_h}{\sin 2\theta} \right) \mathbf{t}_0.$$

L'_0 est défini par l'intersection de T_0 avec la médiatrice de OH' . La surface de dispersion est donc déterminée à partir des points O, H', L'_0 . Dans le second cas (onde réfléchie-transmise) L_0 devient L''_0 tel que:

$$\overrightarrow{L''_0 L_0} = - \left(\frac{\mathbf{dh} \cdot \mathbf{s}_0}{\sin 2\theta} \right) \mathbf{t}_h.$$

L''_0 est défini par l'intersection de T_h avec la médiatrice de HO' . La surface de dispersion est alors déterminée à partir des points H, O', L''_0 . Le vecteur d'onde dans le second cristal correspondant à $D_h^{II}(O^I)$ est $\mathbf{K}_h^{II} = \overrightarrow{H'L'_0}$ et celui correspondant à $D_0^{II}(h^I)$ est $\mathbf{K}_0^{II} = \overrightarrow{HL''_0}$. Or, nous avons la relation:

$$\begin{aligned} \overrightarrow{L''_0 L'_0} &= \overrightarrow{L'_0 L_0} + \overrightarrow{L_0 L''_0} \\ &= - \left[\frac{(\mathbf{dh} \cdot \mathbf{s}_h) \mathbf{t}_0 + (\mathbf{dh} \cdot \mathbf{s}_0) \mathbf{t}_h}{\sin 2\theta} \right] = \mathbf{dh}, \end{aligned}$$

on en déduit:

$$\mathbf{K}_h^{II} = \mathbf{K}'_h{}^{II}. \quad (4-5)$$

Nous devons choisir comme vecteurs d'onde incidents dans le vide, ayant même composante tangentielle que \mathbf{K}_h^{II} et $\mathbf{K}'_h{}^{II}$:

$$\mathbf{k}_0^{II} = \overrightarrow{OM'} \quad \text{et} \quad \mathbf{k}_h^{II} = \overrightarrow{HN''}.$$

Nous mettrons donc les ondes incidentes sur le second cristal sous la forme:

$$\begin{aligned} D_0^I &= D_0^I(x^I) \exp \left(-2\pi i \frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z^I \right) \\ &\quad \times \exp [-2\pi i (\mathbf{k}_0^I - \mathbf{k}_0^{II}) \mathbf{r}^I] \exp (-2\pi i \mathbf{k}_0^{II} \cdot \mathbf{r}^I) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} D_h^I &= D_h^I(x^I) \exp \left(-2\pi i \frac{k\chi_0}{2\gamma_h} z^I \right) \\ &\quad \times \exp [-2\pi i (\mathbf{k}_h^I - \mathbf{k}_h^{II}) \mathbf{r}^I] \exp (-2\pi i \mathbf{k}_h^{II} \cdot \mathbf{r}^I) \end{aligned}$$

et nous poserons:

$$\begin{aligned} D_0^I(x^I, z^I) &= D_0^I(x^I) \exp \left(-2\pi i \frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z^I \right) \\ &\quad \times \exp [-2\pi i (\mathbf{k}_0^I - \mathbf{k}_0^{II}) \mathbf{r}^I] \quad (4-6) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} D_h^I(x^I, z^I) &= D_h^I(x^I) \exp \left(-2\pi i \frac{k\chi_0}{2\gamma_h} z^I \right) \\ &\quad \times \exp [-2\pi i (\mathbf{k}_h^I - \mathbf{k}_h^{II}) \mathbf{r}^I]. \quad (4-7) \end{aligned}$$

Ce sont ces expressions qui tiennent lieu de pseudo-amplitudes incidentes sur le second cristal.

Le Tableau 2 résume l'ensemble des résultats obtenus dans ce paragraphe. Les relations

$$\mathbf{K}_h^{II} = \mathbf{K}_0^{II} + \mathbf{h}$$

$$\mathbf{K}'_h{}^{II} = \mathbf{K}_0^{II} + \mathbf{h}$$

et

$$|\mathbf{K}_h^{II}| = |\mathbf{K}_0^{II}| = |\mathbf{K}'_h{}^{II}| = |\mathbf{K}_0^{II}|$$

montrent que nous sommes bien dans le cas où les fonctions des formules (4-1) et (4-2) sont des fonctions de Bessel.

(b) *Calcul de la pseudo-amplitude à la sortie du second cristal*

Comme les vecteurs d'onde \mathbf{K}_h^{II} et $\mathbf{K}'_h{}^{II}$ sont égaux, la pseudo-amplitude de l'onde réfléchie après traversée des deux cristaux est:

$$D_h = D_h^{II}(O^I) + D_0^{II}(h^I).$$

Exprimons tout d'abord $D_0^I(x^I)$ et $D_h^I(x^I)$ en calculant les expressions

$$(\mathbf{k}_0^I - \mathbf{k}_0^{II}) \mathbf{r}^I \quad \text{et} \quad (\mathbf{k}_h^I - \mathbf{k}_h^{II}) \mathbf{r}^I.$$

Posons

$$\overline{M'M} = k(\Delta\theta)_0 = \mathbf{dh} \cdot \mathbf{s}_h / \sin 2\theta$$

et

$$\overline{N''N} = k(\Delta\theta)_h = -\mathbf{dh} \cdot \mathbf{s}_0 / \sin 2\theta.$$

En projetant \mathbf{r}^I sur les axes O_1x^I et O_1z (voir Fig. 5), on obtient:

Tableau 2. *Tableau récapitulatif des différents vecteurs d'onde dans les deux cristaux*

	Onde réfractée	Onde réfléchie
Ondes après le premier cristal	$D_0^I(x^I), \mathbf{k}_0^{II} = \overrightarrow{OM}$	$D_h^I(x^I), \mathbf{k}_h^I = \overrightarrow{HN}$
Ondes incidentes sur le second cristal	$D_0^I(x^I), \mathbf{k}_0^{II} = \overrightarrow{OM}$	$D_h^I(x^I), \mathbf{k}_h^{II} = \overrightarrow{HN''}$
Ondes dans le second cristal	$D_h^{II}(O^I), \mathbf{K}_h^{II} = \overrightarrow{H'L'_0}$	$D_0^{II}(h^I), \mathbf{K}_0^{II} = \overrightarrow{HL''_0}$
	$D_0^{II}(O^I), \mathbf{K}_0^{II} = \overrightarrow{OL''_0}$	$D_h^{II}(h^I), \mathbf{K}_0^{II} = \overrightarrow{O'L''_0}$

$$D_0^I(x^I, z^I) = D_0^I(x^I) \exp[-2\pi i k(\Delta\theta)_0 \gamma_0 x^I] \\ \times \exp[2\pi i k(\Delta\theta)_0 \alpha_0 z^I] \exp\left(-2\pi i \frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z^I\right) \\ = D_0^I(x^I) \exp[2\pi i k(\Delta\theta)_0 \alpha_0 z^I] \exp\left(-2\pi i \frac{k\chi_0}{2\gamma_0} z^I\right) \quad (4-8)$$

$$D_h^I(x^I, z^I) = D_h^I(x^I) \exp[2\pi i k(\Delta\theta)_h \gamma_h x^I] \\ \times \exp[2\pi i k(\Delta\theta)_h \alpha_h z^I] \exp\left(-2\pi i \frac{k\chi_0}{2\gamma_h} z^I\right) \\ = (D_h^I(x^I) \exp[2\pi i k(\Delta\theta)_h \alpha_h z^I]) \exp\left(-2\pi i \frac{k\chi_0}{2\gamma_h} z^I\right) \quad (4-9)$$

Les pseudo-amplitudes $D_h^{II}(0^I)$ et $D_0^{II}(h^I)$ s'écrivent d'après (4-1) et (4-2):

$$D_h^{II}(0^I) = \frac{-i\pi k \chi_h^{II} \gamma_0}{\sin 2\theta} \int_{A_2 B_2} D_0^I(x^I) J_0(B' \sqrt{l^{II2} - x^{II2}}) dx^{II}$$

$$D_0^{II}(h^I) = D_h^I(x^I = X + l^{II}) - \frac{B'}{2} \int_{A_2 B_2} D_h^I(x^I) \\ \times \sqrt{\frac{l^{II} + x^{II}}{l^{II} - x^{II}}} J_1(B' \sqrt{l^{II2} - x^{II2}}) dx^{II}$$

$$\text{où } B' = \frac{2\pi k \sqrt{\chi_h^{II} \chi_h^{II}} \sqrt{\gamma_0 \gamma_h}}{\sin 2\theta}$$

Si nous posons:

$$D_h^I(x^{II}) = \frac{-i\pi k \chi_h^{II} \gamma_0}{\sin 2\theta} J_0(B' \sqrt{l^{II2} - x^{II2}}), \quad (4-10)$$

$$D_0^{II}(x^{II}) = \gamma_0 \sqrt{\frac{k}{r_0}} \exp\left[-\pi i \frac{k\gamma_0^2}{r_0} (l^{II} - x^{II})^2 + i \frac{\pi}{4}\right] \\ - \frac{B'}{2} \sqrt{\frac{l^{II} + x^{II}}{l^{II} - x^{II}}} J_1(B' \sqrt{l^{II2} - x^{II2}}), \quad (4-11)$$

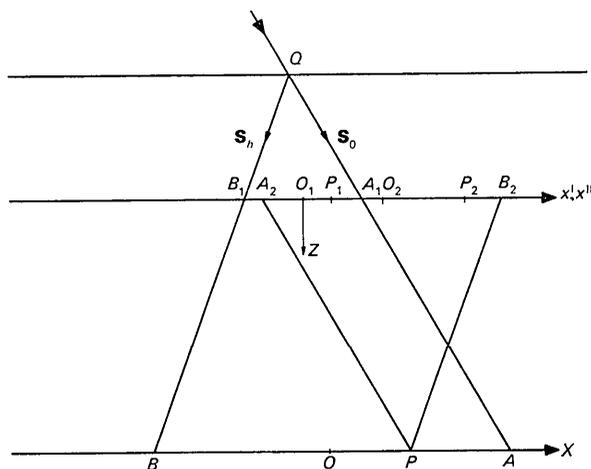


Fig. 5. $O_1 A_1 = O_1 B_1 = l^I$, $\overline{O_1 P_1} = X^I$; $O_2 A_2 = O_2 B_2 = l^{II}$, $\overline{O_2 P_2} = X^{II}$; $OA = OB = l$, $OP = X$.

ces deux quantités étant proportionnelles à celles calculées par les formules (4-3) et (4-4). Si nous définissons une fonction

$$\mathcal{D}_h^I(x^I) = \begin{cases} D_h^I(x^I) & \text{si } |x^I| \leq l^I \\ 0 & \text{si } |x^I| > l^I \end{cases} \\ i = I \text{ ou } II$$

et de même pour $\mathcal{D}_0^I(x^I)$, nous pourrions écrire $D_h^{II}(0^I)$ et $D_0^{II}(h^I)$ sous forme de produits de composition:

$$D_h^{II}(0^I) = \mathcal{D}_h^I(X) * \mathcal{D}_h^{II}(X) \\ \times \exp\left\{-2\pi i \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_0} - k(\Delta\theta)_0 \alpha_0\right] z^I\right\} \quad (4-12)$$

$$D_0^{II}(h^I) = \mathcal{D}_h^I(X) * \mathcal{D}_0^{II}(-X) \\ \times \exp\left\{-2\pi i \left[\frac{k\chi_0}{2\gamma_h} - k(\Delta\theta)_h \alpha_h\right] z^I\right\} \quad (4-13)$$

avec $x^I = X + x^{II}$.

Finalement, la pseudo-amplitude de l'onde réfléchie peut se mettre sous la forme:

$$D_h(X) \propto \mathcal{D}_0^I(X) * \mathcal{D}_h^{II}(X) + \mathcal{D}_h^I(X) * \mathcal{D}_0^{II}(-X) \\ \times \exp\left[\left(-2\pi i \frac{k\chi_0}{2}\right) z^I \left(\frac{1}{\gamma_h} - \frac{1}{\gamma_0}\right)\right] \\ \times \exp[-2\pi i d h_{\perp} z^I], \quad (4-14)$$

dh_{\perp} étant la composante du vecteur dh suivant la normale à l'interface.

Comme pour la faute d'empilement, nous constatons que $D_h(X)$ est la transformée de Fourier de l'expression de la pseudo-amplitude dans le cas d'une onde plane incidente.

(c) Cas particulier: l'un des cristaux a une épaisseur faible vis-à-vis de l'autre

Supposons que le cristal I ait une épaisseur très faible par rapport au cristal II. Dans ce cas, $X + x^{II} \approx 0$. Les fonctions $\mathcal{D}_0^I(x^I)$ et $\mathcal{D}_h^I(x^I)$ n'ont de valeurs non nulles qu'au voisinage de $x^I = 0$, c'est-à-dire de $X = -x^{II}$. Dans ce voisinage, les fonctions

$$J_0(B' \sqrt{l^{II2} - x^{II2}}) \text{ et } \sqrt{\frac{l^{II} + x^{II}}{l^{II} - x^{II}}} J_1(B' \sqrt{l^{II2} - x^{II2}})$$

peuvent être considérées comme constantes. On peut donc écrire:

$$D_h^{II}(0^I) = \frac{-i\pi k C \chi_h^{II} \gamma_0}{\sin 2\theta} J_0(B' \sqrt{l^{II2} - X^2}) \int_{-l}^{+l} \mathcal{D}_0^I(x^I, z^I) dx^I$$

$$D_0^{II}(h^I) = \mathcal{D}_h^I(x^I = X + l^{II}, z^I) - \frac{B'}{2} \sqrt{\frac{l^{II} - X}{l^{II} + X}} \\ \times J_1(B' \sqrt{l^{II2} - X^2}) \int_{-l}^{+l} \mathcal{D}_h^I(x^I, z^I) dx^I$$

Calculons maintenant χ_h^{II} en fonction de $\chi_h^{\text{I}} = \chi_h$. Takagi a montré qu'on pouvait exprimer la composante de Fourier de la susceptibilité électrique χ_h^{II} d'un cristal perturbé en fonction de celle du cristal parfait correspondant χ_h sous la forme:

$$\chi_h^{\text{II}} = \chi_h \exp(2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{u}) = \chi_h \exp(-2\pi i \mathbf{d} \mathbf{h} \cdot \mathbf{r}).$$

Dans ces conditions, on a:

$$\sqrt{\chi_h^{\text{II}} \chi_h^{\text{II}}} = \sqrt{\chi_h \chi_h} \quad \text{et} \quad B' = B.$$

Finalement, l'intensité du faisceau réfléchi s'écrit:

$$\begin{aligned} I_h = |D_h(X)|^2 = & \frac{\pi^2 k^2}{\sin^2 2\theta} \chi_h^2 I_0 \left| J_0(B\sqrt{I^{\text{II}} - X^2}) \right. \\ & \times \exp(-2\pi i \mathbf{d} \mathbf{h} \cdot \mathbf{r}) A_0 + \sqrt{\frac{r_0}{k}} \\ & \times \exp\left[-\pi i k \chi_0 \left(\frac{1}{\gamma_0} - \frac{1}{\gamma_h}\right) z^{\text{I}}\right] \exp(-2\pi i d h_{\perp} z^{\text{I}}) \\ & \times \left\{ J_0(B\sqrt{I^{\text{II}} - (X + I^{\text{II}})^2}) \exp[2\pi i k (\Delta\theta)_h \gamma_h (X + I^{\text{II}})] \right. \\ & \left. - \frac{B}{2} \sqrt{\frac{I^{\text{II}} - X}{I^{\text{II}} + X}} J_1(B\sqrt{I^{\text{II}} - X^2}) A_h \right\}^2, \quad (4-15) \end{aligned}$$

avec:

$$\begin{aligned} A_0 = & \int_{-l^{\text{I}}}^{+l^{\text{I}}} \left\{ \exp\left[-\frac{\pi i k \gamma_0^2}{r_0} (l^{\text{I}} - x^{\text{I}})^2 + i \frac{\pi}{4}\right] \right. \\ & \left. - \frac{\pi \sqrt{k r_0} \sqrt{\chi_h \chi_h}}{\sin 2\theta} \sqrt{\frac{\gamma_h}{\gamma_0}} \sqrt{\frac{l^{\text{I}} + x^{\text{I}}}{l^{\text{I}} - x^{\text{I}}}} J_1(B\sqrt{l^{\text{II}} - x^{\text{I}2})} \right\} \\ & \times \exp(-2\pi i k (\Delta\theta)_0 \gamma_0 x^{\text{I}}) dx^{\text{I}}, \\ A_h = & \int_{-l^{\text{I}}}^{+l^{\text{I}}} J_0(B\sqrt{l^{\text{II}} - x^{\text{I}2})} \exp(2\pi i k (\Delta\theta)_h \gamma_h x^{\text{I}}) dx^{\text{I}}, \end{aligned}$$

et

$$I_0 = \left| \frac{D_0^{(\Phi)}}{4\pi r_0} \right|^2.$$

La fonction $\mathcal{D}_h^{\text{I}}(x^{\text{I}} = X + I^{\text{II}})$, z^{I} n'a de valeur non nulle que si X est compris entre $-l^{\text{II}} - l^{\text{I}}$ et $-l^{\text{II}} + l^{\text{I}}$, c'est-à-dire lorsque X est voisin de $-l$. Nous allons donc étudier la distribution d'intensité du faisceau réfléchi lorsque X n'est pas voisin de $-l$. Ceci revient à négliger le faisceau direct provenant de l'onde réfléchie-transmise. Dans ce cas, l'intensité I_h s'écrit:

$$\begin{aligned} I_h = & \frac{\pi^2 k r_0}{\sin^2 2\theta} \chi_h^2 \left[I_0^2 J_0^2(B\sqrt{I^{\text{II}} - X^2}) + I_h^{\text{I}} \frac{I^{\text{II}} - X}{I^{\text{II}} + X} \right. \\ & \times J_1^2(B\sqrt{I^{\text{II}} - X^2}) - 2\sqrt{I_0^{\text{I}} I_h^{\text{I}}} J_0(B\sqrt{I^{\text{II}} - X^2}) \\ & \left. \times \sqrt{\frac{I^{\text{II}} - X}{I^{\text{II}} + X}} J_1(B\sqrt{I^{\text{II}} - X^2}) \cos\Phi \right] \quad (4-16) \end{aligned}$$

avec:

$$I_0^{\text{I}} = I_0 \left\{ 1 - \frac{B^2 \sin^2 [l^{\text{I}} \sqrt{[2\pi k \gamma_h (\Delta\theta)_h]^2 + B^2}]}{[2\pi k \gamma_h (\Delta\theta)_h]^2 + B^2} \right\},$$

$$I_h^{\text{I}} = I_0 B^2 \frac{\sin^2 [l^{\text{I}} \sqrt{[2\pi k \gamma_0 (\Delta\theta)_0]^2 + B^2}]}{[2\pi k \gamma_0 (\Delta\theta)_0]^2 + B^2},$$

$$\Phi = 2\pi \mathbf{d} \mathbf{h} \cdot \mathbf{r} - \pi k \chi_0 \left(\frac{1}{\gamma_h} - \frac{1}{\gamma_0} \right) z^{\text{I}} - 2\pi d h_{\perp} z^{\text{I}} + \varphi$$

$$\text{tg } \varphi = \frac{2\pi k \gamma_0 (\Delta\theta)_0}{\sqrt{[2\pi k \gamma_0 (\Delta\theta)_0]^2 + B^2}} \text{tg} [l^{\text{I}} \sqrt{[2\pi k \gamma_0 (\Delta\theta)_0]^2 + B^2}].$$

(d) Étude expérimentale

Nous avons calculé les valeurs de I_h pour différentes valeurs de $\cos \Phi$ en supposant que $\cos \Phi$ est constant dans le plan d'incidence, c'est-à-dire que la trace du plan réflecteur sur les faces du cristal est perpendiculaire aux franges.

La Fig. 6 est une topographie en pose fixe d'un cristal de silicium dans lequel cette condition est approximativement satisfaite. (Réflexion 333; l'orientation de l'axe de la bande irradiée et des franges est pratiquement la direction $[\bar{2}11]$.)

Sur la Fig. 7, nous avons représenté schématiquement les courbes d'égale intensité calculées à l'aide de (4-16) pour les mêmes conditions de réflexion que celles de la topographie Fig. 6 et pour une valeur de $I_h^{\text{I}}/I_0^{\text{I}}$ choisie arbitrairement égale à 1/16.

On peut remarquer un bon accord qualitatif entre la topographie et le diagramme calculé. Nous allons décrire les traits caractéristiques des franges de moiré.

Tout d'abord, nous constatons que, du côté de l'image directe du défaut, les franges de solution pendulaire sont modulées par les franges de moiré et que leur intensité devient très grande. Au contraire, lorsque X tend vers l , l'interaction des franges de solution pendulaire et des franges de moiré est de plus en plus faible. La modulation des franges de solution pendulaire entraînée par le moiré se retrouve dans les topographies par translation.

La période de ces franges de moiré est donnée, d'après (4-16), par:

$$\Phi = 2\pi \mathcal{N} \quad (\mathcal{N} \text{ entier}),$$

c'est-à-dire, si z^{I} est constant, par

$$\mathbf{d} \mathbf{h} \cdot \mathbf{r} = \mathcal{N}.$$

Si le cristal est une lame à faces parallèles, la période est $1/dh_{\parallel}$ et ne dépend que de la composante tangentielle de la déformation. Pour atteindre la composante normale, il faut utiliser un cristal taillé en forme de coin. Comme notre cristal est taillé suivant une lame à faces parallèles, l'existence de franges parallèles à l'axe de l'irradiation montre que celle-ci n'est pas uniforme latéralement. De plus, il existe une légère variation longitudinale qui montre que l'irradiation n'est pas non plus tout à fait uniforme dans la longueur.

Nous avons représenté sur la Fig. 8(a) la variation de l'interfrange en fonction de la distance à l'axe de l'irradiation représentée par une coordonnée y pour la coupe c de la Fig. 1(c) correspondant à la section de la Fig. 6. De là, nous pouvons déduire les variations

de du/dy et u en fonction de y . Celles-ci sont représentées sur les Figs. 8(b) et (c).

D'après la formule (4-16), le contraste des franges de moiré dépend de la quantité $\sqrt{I_0^i I_h^i} \cos \Phi$. Pour une irradiation donnée, la frange centrale, qui correspond à $du/dy=0$, a un contraste variable suivant le plan réflecteur choisi et la longueur d'onde du rayonnement utilisé. Lorsque la dose de l'irradiation varie, le contraste de cette même frange est modifié car Φ dépend de dh , donc de la déformation. On peut constater l'influence de tous ces facteurs sur la Fig. 1.

La théorie précédente est encore valable localement tant que $|Vu|$ est sensiblement constant. Nous avons étudié des cristaux irradiés pour lesquels la déformation n'est pas homogène et nous avons constaté, pour ces cristaux, une variation de l'interfrange dans la largeur de la bande irradiée. Evidemment, il est nécessaire que la variation de la déformation soit faible pour pouvoir encore observer des franges.

Le calcul précédent a été fait dans le cas où le défaut plan est voisin de la face d'entrée du cristal. Lorsque celui-ci est voisin de la face de sortie du cristal, il suffit de changer X en $-X$ dans la formule (4-16). La répartition de l'intensité subit simplement une symétrie par rapport à l'axe de la section et l'image directe du défaut est située alors dans la région où X est voisin de l .

Il est donc évident que l'image sur une topographie par translation sera inchangée.

5. Conclusion

Nous obtenons des franges de moiré lorsque les plans réflecteurs de deux cristaux accolés sont légèrement désorientés l'un par rapport à l'autre (moiré de rotation) ou lorsque les paramètres de ces deux cristaux sont très peu différents (moiré parallèle). Pour ces deux cas, ou leur combinaison, le facteur important est dh variation du vecteur du réseau réciproque entre les deux cristaux. Le déphasage dû à dh est le même pour des champs d'onde correspondant à des points caractéristiques situés sur les deux branches de la surface de dispersion. La théorie de Takagi qui considère globalement tous les champs d'onde est donc particulièrement bien adaptée à ce problème.

Le calcul a été effectué, pour simplifier, sans tenir compte de l'absorption, mais les franges de moiré seraient visibles même avec des cristaux absorbants, le déphasage que nous avons calculé s'appliquant alors aux champs d'ondes appartenant à la branche 1 de la surface de dispersion.

Nous avons appliqué, dans cet article, la théorie de Takagi au calcul du contraste des franges de moiré

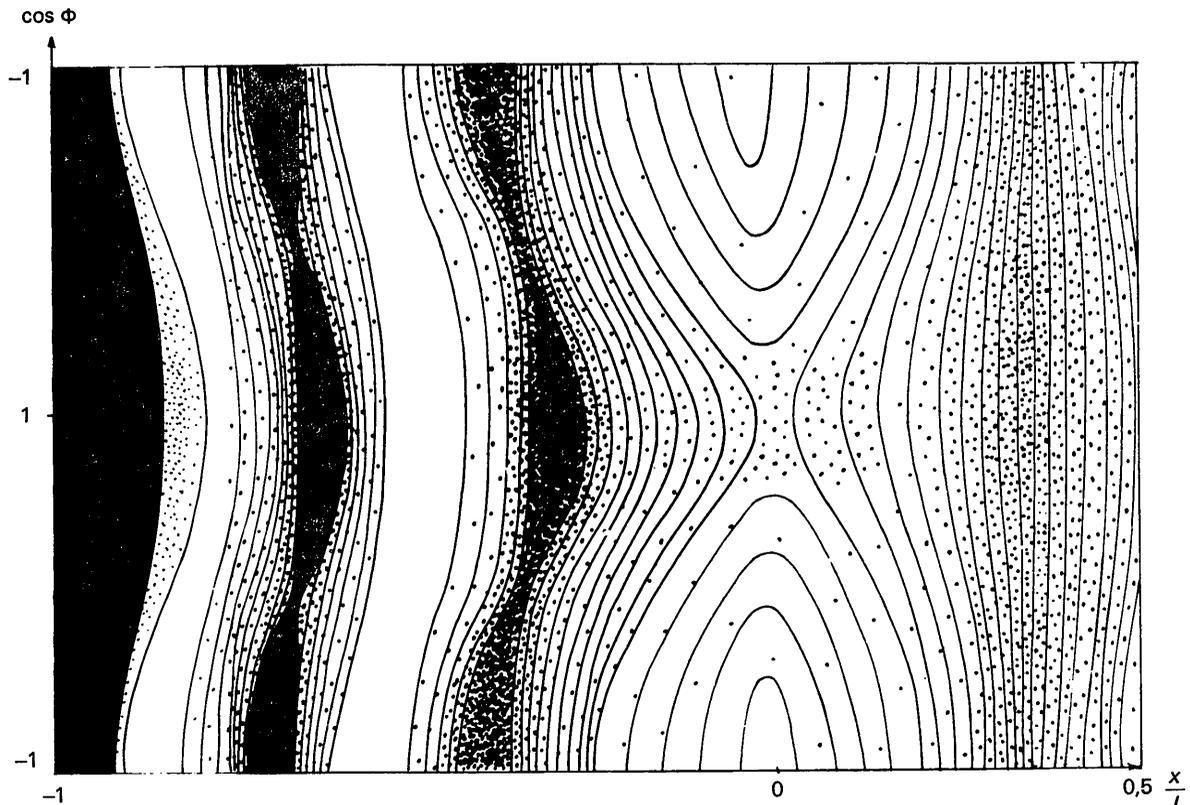


Fig. 7. Lieux des points d'égalité intensité calculée.

dans le cas où l'un des cristaux a une épaisseur faible par rapport à l'autre. Il est possible également de calculer le contraste de franges de moiré obtenus avec deux cristaux d'épaisseur quelconque. La méthode de calcul dans ce cas serait la même que celle employée dans l'article précédent pour le calcul du contraste d'une faute d'empilement.

Références

- AUTHIER, A. (1966). *J. de Physique*, **27**, 57.
 AUTHIER, A., LALLEMAND, P. & PFISTER, J. C. (1963). *J. de Physique*, **24**, 467.
 AUTHIER, A. & MONTENAY-GARESTIER, M. T. (1965). *Effets des rayonnements sur les semi-conducteurs* (Paris-Royaumont, 1964), page 79. Paris: Dunod.
 AUTHIER, A. & SIMON, D. (1968). *Acta Cryst.* **A24**, 517.
 BASSET, G. A., MENTER, J. W. & PASHLEY, D. W. (1958). *Proc. Roy. Soc. A* **246**, 345.
 BONSE, U. & HART, M. (1966). *Z. Physik*, **190**, 455.
 BRÁDLER, J. & LANG, A. R. (1968). *Acta Cryst.* **A24**, 246.
 CHIKAWA, J. I. (1965). *Applied Physics Letters*, **7**, 193.
 GEVERS, R. (1962). *Phys. Stat. Sol.* **3**, 1672.
 GEVERS, R. (1963). *Phys. Stat. Sol.* **3**, 2289.
 HASHIMOTO, H., MANNAMI, M. & NAIKI, T. (1961). *Phil. Trans.* **A253**, 459.
 LALLEMAND, P. (1962). Diplôme d'Études Supérieures, Paris.

Acta Cryst. (1968). **A24**, 534

The Analog Computation of Dynamic Electron Diffraction Intensities

BY A. W. S. JOHNSON

Division of Chemical Physics, C.S.I.R.O., Chemical Research Laboratories, Melbourne, Australia

(Received 18 December 1967)

The Cowley-Moodie slice formulation of n -beam electron diffraction has been manipulated to give a set of linear first order differential equations, one per beam, the coefficients of which are proportional to the Fourier coefficients of the crystal potential. The analog solution of these equations gives a vivid demonstration of the interacting processes involved in dynamic scattering and, with modern analog computers, allows an extremely rapid solution, at least two orders of magnitude faster than comparable digital computer calculations. The advantages and disadvantages of the method are discussed and practical example calculations and applications described.

1. Introduction

The use of analogies as an aid to the quantitative or qualitative interpretation of dynamic diffraction theory was clearly envisaged by Ewald, when he described the 'Pendellösung' solution, and was freely invoked by Brillouin (1946). In addition, Heidenreich (1950) constructed a useful analogy by utilizing the correspondence between the dispersion equations and those of a suitable electrical network. However, since the dispersion equations are the result of formal mathematics invoked solely for the purpose of calculation and

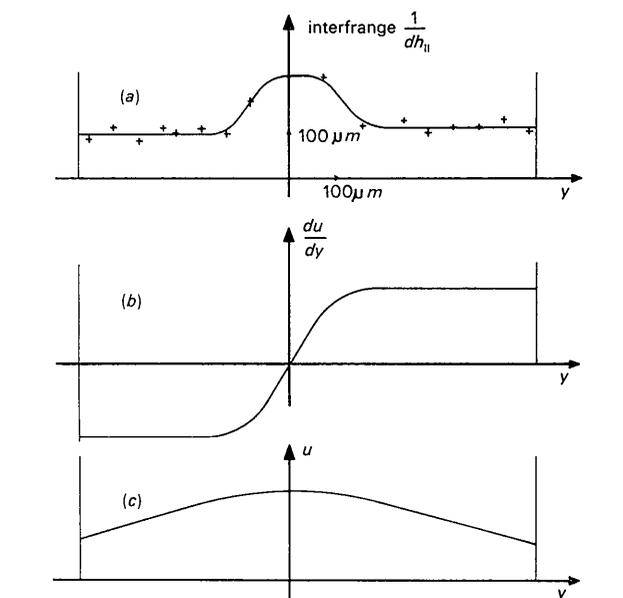


Fig. 8. Courbes représentant $1/dh$, du/dy et u en fonction de y .

- LANG, A. R. & MIUSCOV, V. F. (1965). *Applied Physics Letters*, **7**, 214.
 TAKAGI, S. (1962). *Acta Cryst.* **15**, 1311.

are not essential to the solution of the diffraction problem, the analogy is of limited value and only indirectly connected with experimentally observed quantities.

The direct solution of the differential equation formulation of the diffraction theory (Tournarie, 1961; Takagi, 1962) has the advantage, in common with the multislice calculation of Goodman & Moodie (1968), of avoiding the unnecessary solution of the dispersion equations, the wave functions external to the crystal being calculated directly. Consequently the electrical network resulting from programming an electronic analog computer to solve these differential equations