

SIMULATION D'IMAGES EN TOPOGRAPHIE AUX RAYONS X
IMAGE SIMULATION IN X-RAY TOPOGRAPHY

Y. EPELBOIN et A. AUTHIER

Laboratoire de Minéralogie Cristallographie, associé au C.N.R.S., Universités P. et M. Curie et PARIS VII,
4 place Jussieu, 75230 PARIS CEDEX 05, France

La topographie aux rayons X est une technique d'imagerie qui permet de visualiser des défauts dans des matériaux cristallins presque parfaits. Son développement est lié à celui des matériaux semi-conducteurs pour la caractérisation desquels elle a été très largement employée. La plupart des fabricants de silicium monocristallin l'utilisent maintenant comme technique de contrôle. On étudie aussi de cette manière le quartz, les composés III-V ...

La simulation d'images est une méthode importante pour interpréter le contraste des défauts dans les images. Elle permet de déterminer complètement la nature des imperfections étudiées. De récentes améliorations dans la représentation des images, l'utilisation des techniques de fausse couleur, ont permis d'étudier l'influence de paramètres extrêmement variés sur la formation du contraste.

Ceci a été utilisé aussi bien dans les expériences pour caractériser entièrement des défauts comme les dislocations, que par les théoriciens pour comprendre l'origine de ce contraste.

X-Ray topography is an imaging technique to visualize defects in nearly perfect crystalline materials. It has been widely used in material characterization since the big development of semiconductors devices and most silicon manufacturers use it everyday. Other materials such as quartz, III-V ... are also studied by this means.

Image simulation is now an important method to interpret the contrast of the defects in the pictures. It enables to fully characterize the nature of the imperfections. Recent improvements in image representation, the use of false colors images permit now to study the influence of various parameters of the origin of the contrast. This has been successfully used either by experimenters to fully characterize dislocations or by theoreticians to improve their understanding of the origin of the contrast of various defects.



SIMULATION D'IMAGES EN TOPOGRAPHIE AUX RAYONS X
 IMAGE SIMULATION IN X-RAY TOPOGRAPHY
 Y. EPELBOIN et A. AUTHIER

I.- RAPPELS SUR LA METHODE DE LANG

L'utilisation des rayons X pour voir à travers la matière n'est pas nouvelle. Les applications les plus courantes sont médicales ou métallurgiques : on utilise le pouvoir d'absorption de cette lumière pour faire des photographies où les parties les plus opaques des objets étudiés donnent un contraste noir, les parties les plus transparentes au rayonnement donnant un contraste blanc.

La topographie aux rayons X ne relève pas de ces méthodes. Elle utilise le pouvoir diffractant de la matière organisée et ne s'applique donc qu'aux cristaux : c'est une application directe de la fameuse loi de BRAGG, plus exactement même, c'est l'analyse des détails d'une réflexion dans une tache de LAUE (1-2). Cette technique d'analyse de la matière ne s'applique donc qu'à certaines catégories de matériaux. Il y a une analogie avec la microscopie électronique : on étudie les objets soit par absorption différentielle des électrons à travers ceux-ci ou leurs empreintes, soit par diffraction d'électrons en agrandissant l'image de certains faisceaux.

Les théories de la diffraction pour les rayons X et la microscopie électronique sont d'ailleurs très voisines, le volume de l'échantillon analysable étant la différence la plus notable au premier abord. En microscopie électronique, il faut amincir la lame observée à une épaisseur de quelques milliers d'Angströms au maximum. Le champ latéral reste petit. En topographie aux rayons X on peut examiner des lames de plusieurs millimètres d'épaisseur et dont la surface peut atteindre une centaine de cm^2 . Par contre, notre incapacité à fabriquer des systèmes optiques agrandisseurs à rayons X ne permet pas d'observer des détails plus petits que le grain des plaques photographiques, c'est-à-dire de l'ordre du micron alors que la microscopie électronique permet de voir des imperfections cristallines dont les dimensions, dans les dernières techniques et avec les nouveaux microscopes, ne sont que de quelques Angströms.

Nous nous attacherons, dans cet exposé, à la méthode de topographie la plus employée : la méthode de LANG (3). Le montage expérimental est schématisé à la figure 1.

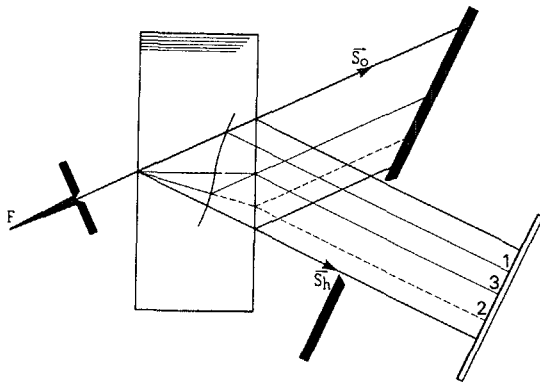


Fig. 1

marquée 1, 2, 3 sur la figure.

S'il existe un défaut : dislocation, macule, faute d'empilement ..., la propagation des rayons X est perturbée comme schématisée, et un contraste caractéristique de cette imperfection apparaît sur le film.

La densité de défauts que l'on peut étudier de cette manière est de l'ordre de 10^6 cm/cm^3 de dislocations. Ceci est faible, comparé à la microscopie électronique et s'explique, comme nous l'avons mentionné, par le mauvais pouvoir de résolution de la méthode.

Un montage analogue mais où les rayons X sont réfléchis sur des plans tels qu'ils ressortent du même côté de la surface du cristal, permet d'étudier les premiers microns. Ceci est très utile pour l'analyse des dispositifs semiconducteurs. On distingue les topographies en pose fixe et les topographies en translation où l'échantillon et le film sont déplacés ensemble. Ceci permet de balayer un grand volume du cristal en une seule expérience.

LANG (3). Le montage expérimental est schématisé à la figure 1.

Un pinceau de rayons X issu du foyer F d'une source est collimaté par une fente fine et est incident sur le cristal étudié. La figure schématise la propagation des rayons X dans un plan d'incidence. Dans la réalité, le pinceau de rayons X est une nappe fine perpendiculaire à la figure et le volume qui diffracte le rayonnement est un prisme dont la base est le triangle, dans le cristal, où s'étale le faisceau incident. Le rayonnement qui n'est pas en position de Bragg, traverse le cristal dans la direction \vec{s}_0 . L'autre partie est réfléchié suivant la direction \vec{s}_h . Un système de fentes permet de l'isoler et le faisceau impressionne une plaque photographique

SIMULATION D'IMAGES EN TOPOGRAPHIE AUX RAYONS X
 IMAGE SIMULATION IN X-RAY TOPOGRAPHY
 Y. EPELBOIN et A. AUTHIER

Les sources utilisées doivent être très ponctuelles pour permettre la meilleure résolution possible. Elles vont des tubes à faible puissance de l'ordre de quelques centaines de watts aux anticathodes tournantes de plusieurs dizaines de kW. Le rayonnement synchrotron a impulsé de nouvelles études : les caractéristiques du faisceau, sa grande intensité ont permis de nouvelles analyses extrêmement fines aussi bien dans les semi-conducteurs que dans des cristaux naturels (4).

Le détecteur utilisé est habituellement une plaque photographique. Comme le rayonnement est très énergétique (la longueur d'onde est de l'ordre de un Angström), il n'est pas facile d'obtenir à la fois une bonne résolution et une grande sensibilité (5). Les expériences sont donc longues et il n'est pas possible d'étudier un phénomène dynamique.

On a tenté de remplacer ces films par des caméras de télévision (6-7). Outre la difficulté de réaliser de bons convertisseurs pour les longueurs d'ondes utilisées, leur sensibilité et leur résolution sont décevantes : 25 microns dans le meilleur des cas. Néanmoins, elles permettent des études qui n'auraient pu être envisagées autrement.



Fig. 2

La figure 2 montre l'image de dislocations dans une topographie en translation. Il s'agit d'un cristal de 800 microns d'épaisseur. La largeur de l'image est de l'ordre de 1,2 mm.

L'image des défauts se présente essentiellement sous la forme de lignes noires bordées de blanc.

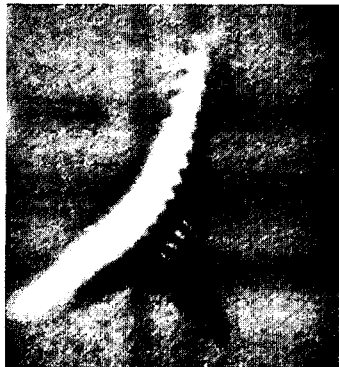


Fig. 3

La figure 3 montre l'image de la dislocation qui est à droite dans la figure 2, en topographie en pose fixe. L'image est beaucoup plus riche en détails qui, si on sait les analyser, renseignent entièrement sur les paramètres physiques de la dislocation.

Les contrastes sont caractéristiques du type de défaut étudié.

Il ne faudrait pas conclure de ces deux images que tous ont des images similaires à celles présentées. C'est d'ailleurs là la grande difficulté pour leur interprétation.

II.- PRINCIPE DES SIMULATIONS

Des études théoriques permettent de prévoir l'allure générale du contraste mais pas ses détails (4 + 8). Les équations qui décrivent le phénomène de diffraction sont bien trop compliquées pour pouvoir, en général, être calculées analytiquement dans un cas réel et les paramètres physiques des défauts ne peuvent donc être, le plus souvent, connus que très imparfaitement. C'est ce problème que veut résoudre la simulation d'images.



SIMULATION D'IMAGES EN TOPOGRAPHIE AUX RAYONS X

IMAGE SIMULATION IN X-RAY TOPOGRAPHY

Y. EPELBOIN et A. AUTHIER

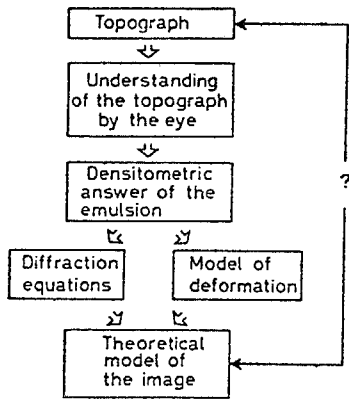


Fig. 4

Il faut donc interpréter l'image en tenant compte des caractéristiques du récepteur utilisé puis imaginer un modèle qui traduise la déformation du cristal. Grâce aux équations qui décrivent le phénomène de diffraction, on calcule une image théorique qui doit être comparée à l'image expérimentale. S'il n'y a pas accord, il faut recommencer avec de nouveaux paramètres pour la déformation ou même inventer un nouveau modèle.

Dans cette simulation, deux points sont importants : le calcul de la diffraction et la manière de représenter le résultat. La figure 5 montre le schéma du calcul effectué dans un plan d'incidence. Les équations de la diffraction sont un système d'équations aux dérivées partielles hyperboliques. Elles sont intégrées pas à pas dans un réseau de lignes parallèles aux directions transmise \vec{s}_0 et réfléchie \vec{s}_h .

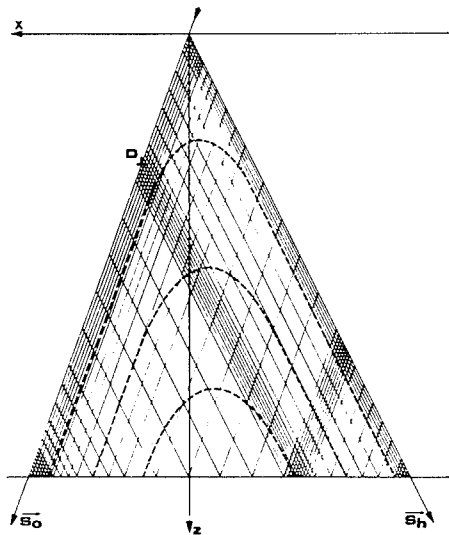


Fig. 5

III.- LE PROBLEME DE LA REPRESENTATION

Pendant longtemps on s'est plus intéressé à la précision de l'intégration des équations de la diffraction, à la validité du modèle décrivant la déformation qu'à la façon de représenter l'image. Les premières simulations furent dessinées à la main (10). Outre la lenteur d'un tel procédé, il faut reconnaître que le choix des points à relier était extrêmement subjectif. La mise au point d'échelles de grès (11) dessinées

La figure 4 montre le principe de la démarche tant de l'expérimentateur que du théoricien. Partant de l'observation d'une topographie, on désire reconnaître le type de déformation du cristal, c'est-à-dire de défaut qui est à l'origine de ce contraste. L'image ne contient pas assez d'information pour reconstruire le modèle physique ab initio. En effet, si on admet que la réponse densitométrique de la plaque photographique est connue, on peut mesurer l'amplitude de rayons X en chaque point de l'image mais l'information de phase est perdue et il n'existe aucun moyen de la reconstituer. Cette situation changera le jour où il existera des lasers à rayons X dans la gamme de rayonnement qui nous intéresse !

Cette intégration est longue et compliquée et le réseau utilisé dépend des caractéristiques de la diffraction (9). Typiquement une image de dislocation est simulée en quelques minutes en utilisant un processeur vectoriel ou un très gros ordinateur (IBM 3081) pour une topographie en section, en quelques heures à plusieurs dizaines d'heures pour une topographie en translation.

Le résultat est la répartition d'intensité de rayons X sur la surface de la plaque photographique. Il faut ensuite convertir ce calcul en image.

SIMULATION D'IMAGES EN TOPOGRAPHIE AUX RAYONS X
 IMAGE SIMULATION IN X-RAY TOPOGRAPHY
 Y. EPELBOIN et A. AUTHIER



Fig. 6

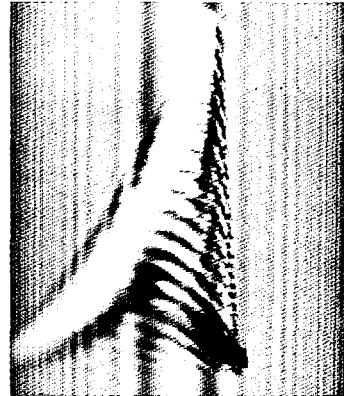


Fig. 7

sur imprimante et prenant en compte la réponse densitométrique de la plaque photographique (fig. 6), permet des représentations rapides et reproductives. Malheureusement, la qualité de l'image restait pauvre et il fallait beaucoup d'imagination pour voir les détails.

L'image de la figure 6 est la simulation de la figure 3. Bien que la forme d'ensemble soit la même, le contraste n'est pas très fidèle.

La figure 7 représente la même image simulée avec un système d'imagerie NUMELEC PERICOLOR 2000. L'image est infiniment plus satisfaisante. L'algorithme de calcul a été amélioré et tient mieux compte des conditions expérimentales : la largeur finie du faisceau incident, en particulier, intervient dans les calculs. Le système d'imagerie est un système qui affiche l'image en temps réel. Il est donc possible de faire varier les paramètres qui correspondent aux conditions d'exposition et de développement du film, comme dans la réalité, et d'ajuster l'image simulée à l'image expérimentale. Ce dernier point est de la plus grande importance. En effet, dans les expériences, les conditions de prise de vue sont choisies, le plus souvent, de façon empirique, afin de voir au mieux les détails que l'on attend dans l'image. Il est donc nécessaire de pouvoir reproduire cette méthode de travail dans la simulation.

Il ne servirait à rien d'utiliser les algorithmes de calcul les plus sophistiqués si l'information devait être partiellement perdue dans la représentation.

IV.- L'APPORT DE LA COULEUR

On a peu l'habitude, en rayons X, d'utiliser la couleur. Comme cette gamme de rayonnements n'est pas visible à l'oeil, cette information est totalement subjective.



Fig. 8

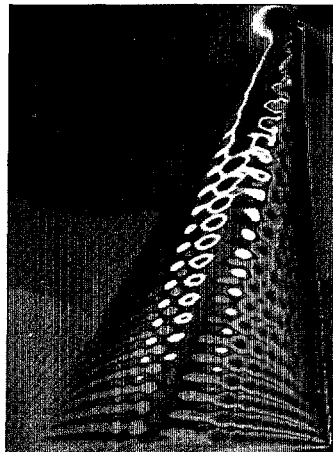


Fig. 9

La figure 8 montre la simulation de la dislocation présentée dans la topographie en translation de la figure 2. Cette image présente une résolution de 0,8 micron. Elle a été calculée en soixante heures en utilisant un petit processeur vectoriel lié à un ordinateur MINI 6/53 BULL, à mots de 16 bits (12).

La figure 9 présente la même image en fausses couleurs. On voit immédiatement l'apport de cette technique. Dans les parties hautes de l'image, là où la dislocation émerge sur la face de sortie du cristal, on ne voit qu'un gris uniforme dans l'image expérimentale et la simulation.

Dans l'image en fausses couleurs, on aperçoit toute une gradation qui permet de mettre en évidence l'influence de la dislocation à grande distance.



SIMULATION D'IMAGES EN TOPOGRAPHIE AUX RAYONS X
 IMAGE SIMULATION IN X-RAY TOPOGRAPHY
 Y. EPELBOIN et A. AUTHIER

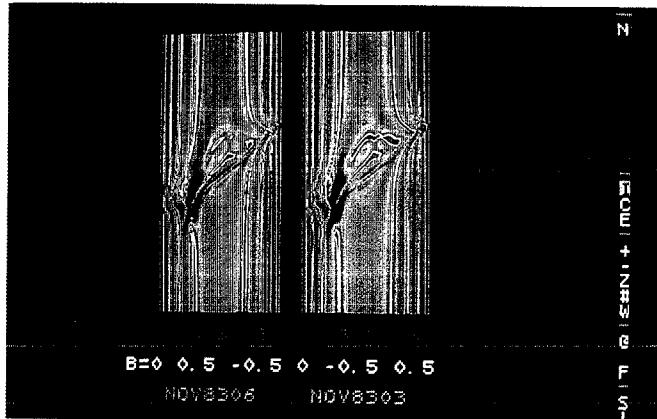
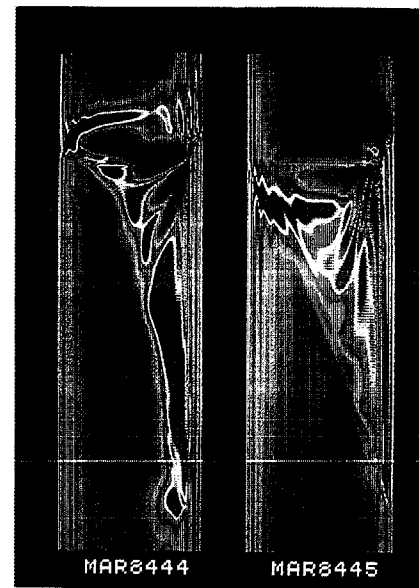


Fig. 10



Les simulations de la figure 10 en sont un autre exemple. Il s'agit d'une étude théorique, où l'on étudie l'influence du vecteur de Burgers de la dislocation, sur le contraste. Les images en noir et blanc sont absolument indiscernables. Les images en couleurs sont suffisamment différentes pour observer l'influence de ce paramètre. Ces simulations démontrent que la sensibilité des méthodes topographiques est bien plus grande qu'il n'apparaît à l'examen des images en noir et blanc et qu'une information importante pourrait y être exploitée.

CONCLUSION

La topographie aux rayons X est une méthode de visualisation des défauts dans les matériaux cristallisés. A ce titre, elle présente toute la richesse des méthodes d'observation. L'utilisation de simulations, maintenant bien résolue du point de vue théorique pour les défauts les plus courants, permet des caractérisations quantitatives précises. L'emploi de la fausse couleur a de plus démontré qu'une information importante était cachée dans les topographies en noir et blanc et qu'il était possible d'obtenir des renseignements au niveau atomique, bien que la résolution de la méthode était de l'ordre du micron.

Il reste à compléter cette étude théorique par la densitométrie puis la représentation en fausses couleurs d'images expérimentales. Ceci n'est pas simple car il faudra conserver la résolution des plaques photographiques employées qui est de l'ordre du micron.

Plus prometteur encore serait de relier une caméra de télévision pour rayons X à un système d'imagerie. Il serait peut-être possible de compenser le mauvais pouvoir de résolution de ce détecteur par la fausse couleur, ce qui permettrait l'étude de phénomènes dynamiques. Ceci reste cependant à la limite des possibilités des systèmes d'imagerie couramment disponibles.

BIBLIOGRAPHIE

- 1.- P.P. EWALD (1917) Ann der Physik, 54, 519
- 2.- M.V. von LAUE (1918) Ann. der Physik, 56, 497
- 3.- A.R. LANG (1957) Acta Cryst. 10, 252
- 4.- Characterization of Crystal Growth Defects by X-Ray Methods, édité par B.K. Tanner et D.K. Bowen (1980) Plenum Press, New York
- 5.- A.R. LANG (1978) in Diffraction and Imaging Techniques in Material Science, vol. II (ed. S. Amelinkcx, R. Gevers et J. van Landuyt), North Holland, Amsterdam, p. 623
- 6.- J.I. CHIKAWA and I. FUJIMOTO (1968) Appl. Phys. Lett. 15, 258

SIMULATION D'IMAGES EN TOPOGRAPHIE AUX RAYONS X
IMAGE SIMULATION IN X-RAY TOPOGRAPHY
Y. EPELBOIN et A. AUTHIER

- 7.- W. HARMANN (1977) in X-Ray Optics (ed. H.J. Queisser), Springer Verlag, Berlin, p. 190
- 8.- B.K. TANNER (1976), X-Ray Diffraction Topography, Pergamon Press, Oxford
- 9.- Y. EPELBOIN (1983) Acta Cryst. A39, 761
- 10.- F. BALIBAR et A. AUTHIER (1967) Phys. Stat. Sol. 21, 413
- 11.- Y. EPELBOIN et A. LIFCHITZ (1974) J. Appl. Cryst. 7, 377
- 12.- Y. EPELBOIN et A. SOYER (1984), à paraître dans Acta Cryst. A