

05;06;07;12

©1993 г.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТОЛЩИНЫ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СЛОЕВ РАЗНОЙ СТЕПЕНИ СОВЕРШЕНСТВА ИЗ ИНТЕГРАЛЬНЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННЫХ ОТРАЖЕНИЙ

Р.Н.Кюмм, Ю.П.Ханачев

С использованием двух- и трехкристального дифрактометров измерены интегральные коэффициенты для широкого набора рентгенодифракционных отражений от гетероэпитаксиальных систем GaAlSb/GaSb, GaSb/GaAs и GaAs/Si, характеризующихся разной степенью структурного совершенства. Из полученных данных определены толщины эпитаксиальных пленок. Обсуждаются вопросы применимости формул динамической и кинематической теорий дифракции для определения толщин эпитаксиальных слоев из абсолютных значений интегральных отражений пленки и подложки. Предлагаются варианты выбора оптимальных дифракционных условий для этой цели.

Введение

Толщина эпитаксиальных слоев может быть определена из рентгеновских дифрактометрических данных в основном двумя способами. Один из них использует угловое распределение интенсивности дифракции, другой — интегральную интенсивность рефлекса.

Для когерентной эпитаксиальной системы с совершенными структурными параметрами (однородность состава вдоль поверхности, равномерность толщины, отсутствие крупных дефектов) в эксперименте наблюдаются, как известно, сложные кривые блэгговских отражений с осцилляциями интенсивности. В этом случае из этих кривых может быть определен профиль изменения деформации по глубине кристалла, откуда и получают толщины соответствующих слоев [1-3].

Для однослойной системы с однородной по глубине пленкой можно не прибегать к моделированию кривой отражения, а определять толщину непосредственно из периода осцилляций

$$\Lambda_{\vartheta} = \lambda/2t \cos \vartheta_B, \quad (1)$$

где Λ_{ϑ} — среднее угловое расстояние между осцилляциями.

Этим же способом можно оценить эффективную толщину и в некоторых других случаях. Такой метод определения толщин эпитаксиальных слоев был использован в работах [4,5].

Однако во многих случаях на кривых дифракционного отражения наблюдается только один максимум от пленки без осцилляций, причем даже для достаточно совершенных когерентных пленок. Для достаточно тонких эпитаксиальных слоев ($u \ll 1$, где u — приведенная в долях экстинкционной длины, $u = nt/l_0$) их толщину можно оценить по полуширине максимума отражения, воспользовавшись тем же выражением (1). Однако при этом нет уверенности, что ширина пика обусловлена только толщиной слоя.

Угловые параметры двухкристалльных кривых не могут быть использованы и для пленок с дислокациями несоответствия, так как последние вызывают уширение рефлексов. Поэтому оптимальным способом определения толщины эпитаксиальных пленок при наличии только одного максимума от слоя следует признать измерение интегральной интенсивности отражения.

Интегральное отражение пленки может быть измерено на двухкристалльном дифрактометре в абсолютном или относительном выражении. В последнем случае площадь под максимумом от пленки берется относительно какого-нибудь реперного отражения, чаще всего от подложки, которое рассчитывается теоретически [6,7]. При таком варианте не требуется измерения первичного пучка и эксперимент может быть выполнен даже на однокристалльном устройстве.

При абсолютном измерении значения интегрального отражения пленки r_i необходимо знание интенсивности падающего на образец пучка, что предполагает использование монохроматора.

Для совершенных кристаллических пленок, когерентно связанных с подложкой, значения толщины получаются из сопоставления экспериментальных интегральных отражений с рассчитанными по динамической теории [6]. Что касается некогерентных эпитаксиальных слоев с дислокациями несоответствия, то учет влияния последних на интегральную интенсивность практически не изучен и определение толщины является весьма проблематичным, хотя и существуют отдельные попытки решения вопроса с помощью экстинкционных моделей [7].

В настоящей работе измерены интегральные коэффициенты отражения рентгеновской дифракции для ряда эпитаксиальных систем разной степени совершенства и проанализирована возможность определения толщин эпитаксиальных пленок при использовании формул динамической и кинематической теории дифракции.

Теория

Кинематическая и динамическая теории дифракции дают различную зависимость интегрального отражения тонкого кристалла от толщины. По кинематической теории для симметричного брэгговского отражения

$$r_i^k = \frac{\pi^2 |\chi_H^j|^2 e^{-2M}}{\lambda \sin 2\vartheta_B} \frac{1}{2\mu} \left(1 - e^{-2\mu t / \sin \vartheta_B} \right). \quad (2)$$

Вводя параметры

$$|g| = \frac{|\chi_{i0}|}{|\chi_{rH}| e^{-M}}, \quad k = \frac{|\chi_{iH}|}{|\chi_{rH}|}, \quad u = \frac{nt}{l_n} = \frac{nt |\chi_{rH}| e^{-M}}{\lambda \cdot \sin \vartheta_B}, \quad (3)$$

r_i^k можно представить в виде

$$r_i^k = \frac{|\chi_{rH}| e^{-M}}{\sin 2\vartheta_B} R_H^{y(k)}(u, |g|, k), \quad (4)$$

где $R_H^{y(k)}$ — интегральное отражение в приведенных угловых переменных y

$$R_H^{y(k)} = \frac{n(1+k^2)}{4|g|} (1 - e^{-4|g|u}).$$

Переменная y отсчитывается от центра интерференционной области ϑ_0

$$y = \frac{(\vartheta - \vartheta_0) \sin 2\vartheta_B}{|\chi_{rH}| e^{-M}}. \quad (5)$$

Здесь χ_{rH} , χ_{i0} и χ_{iH} — действительная и мнимые части Фурье-компонент поляризуемости, пропорциональные соответствующим частям структурного фактора.

В динамической теории известно простое аналитическое выражение для интегрального коэффициента отражения тонкого кристалла без поглощения [8]

$$r_i^g = \frac{n |\chi_H| e^{-M}}{\sin 2\vartheta_B} thu. \quad (6)$$

В отсутствие поглощения для малых толщин, где $thu \approx u$, формулы (4) и (6) переходят друг в друга.

Интегральное отражение для брэгговской геометрии с учетом фотоэлектрического поглощения в динамической теории можно также представить в виде

$$r_i^g = \frac{|\chi_{rH}| e^{-M}}{\sin 2\vartheta_B} R_H^{y(g)}(u, |g|, k). \quad (7)$$

Расчет $R_H^{y(g)}$ выполнен в пределе толстого кристалла [9], где результаты представлены в виде таблиц зависимости $R_H^{y(g)}$ от параметров поглощения $|g|$ и k , при этом аналитическое выражение получается только для малых $|g| < 0.1$.

Вычисление интегральной интенсивности для тонких кристаллов с поглощением требует интегрирования общей формулы для коэффициента отражения $r(y)$; учитывающей существование и интерференцию двух волновых полей в кристалле [10]. На рис. 1 приведены результаты такого интегрирования, выполненные по аналогии с работой [11].

Из кривых рис. 1 видно, что поглощение начинает играть заметную роль для пленок толщиной $u \geq 0.4$, где изменение интегрального отражения по сравнению с непоглощающим кристаллом превышает 10%. Зависимости $R_H^{y(g)}(u)$ стремятся к насыщению, обусловленному как первичной

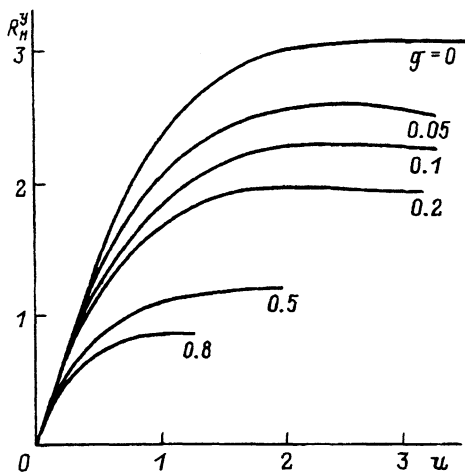


Рис. 1. Зависимость приведенного интегрального отражения R_H^y от приведенной толщины u кристалла для разных уровней поглощения по динамической теории.

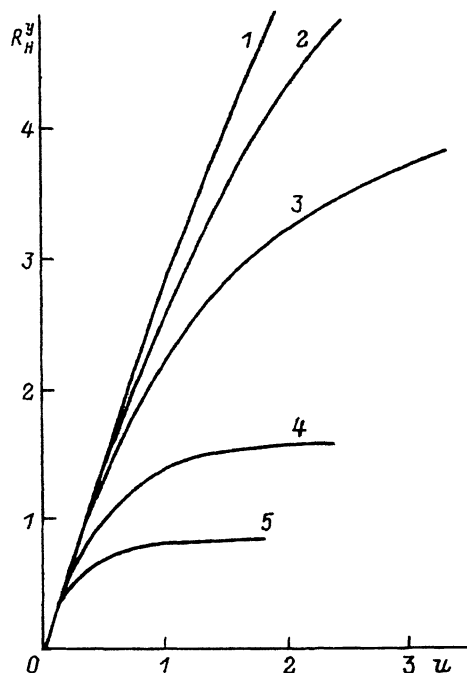


Рис. 2. Зависимость приведенного интегрального отражения R_H^y от приведенной толщины u кристалла для разных уровней поглощения по кинематической теории.

$|g|$: 1 — 0.05, 2 — 0.1, 3 — 0.2, 4 — 0.5, 5 — 0.

экстинкцией, так и поглощением. Это насыщение наступает тем быстрее, чем больше параметр $|g|$, представляющий собой отношение коэффициентов фотоэлектрического поглощения и первичной экстинкции (напомним, что $\chi_{i0} = -\mu\lambda/2\pi$).

С другой стороны, кривые зависимости интегрального отражения от приведенной толщины, рассчитанные по кинематической формуле (4), приведены на рис. 2.

Для эпитаксиальных структур на слабопоглощающих подложках определение толщины возможно и из измерения лауэ-дифракции. Для симметричной лауэ-геометрии в кинематическом пределе

$$r_i^k = \frac{n^2 |\chi_H|^2 e^{-2M}}{\lambda \sin 2\vartheta_B} \frac{t}{\cos \vartheta_B} e^{-\mu t / \cos \vartheta_B} \cdot e^{-\mu_s T_s / \cos \vartheta_B} \quad (8)$$

при $t \ll l_D$; μ_s , T_s — коэффициент поглощения и толщина подложки.

Методика эксперимента

Абсолютные значения интегральных коэффициентов отражения измерялись как на двухкристальном, так и на трехкристальном дифрактометрах. Если максимумы отражения пленки и подложки хорошо разрешаются, то измерение r_i вполне возможно в двухкристальной схеме как

площади под соответствующим максимумом, деленной на интенсивность падающего на образец пучка.

Для несовершенных эпитаксиальных систем во многих случаях целесообразно использование трехкристального дифрактометра с третьим кристаллом — анализатором [12]. Тогда интегральное отражение можно записать в виде

$$r_i = \int \int i(\alpha, \vartheta) d\alpha d\vartheta / I_0 \cdot R_i^A, \quad (9)$$

где $i(\alpha, \vartheta)$ — измеряемая в ходе эксперимента интенсивность, зависящая от двух угловых параметров: угла образца α и анализатора ϑ ; R_i^A — интегральное отражение анализатора.

При 2ω -сканировании, когда измерение дифракционных кривых проводится при фиксированном образце и вращающемся анализаторе, измеряется интегральная интенсивность пиков на кривых $i(\vartheta)$ при разных углах α образца и

$$r_i = \int \left\{ \int i(\vartheta) d\vartheta / I_0 \cdot R_i^A \right\} d\alpha. \quad (10)$$

Такой способ может быть использован в брэгговской геометрии для отделения диффузного рассеяния и последующего анализа только когерентной компоненты.

Вращение образца при фиксированном анализаторе (ω -сканирование) применяется для улучшения разрешения в случае наличия нарушений типа разориентаций (изгиб, дислокационные, блочные структуры). В этом варианте построение интегрального распределения вдоль вектора обратной решетки \mathbf{H} (или от угла анализатора ϑ) дает возможность исключить влияние этих дефектов, которые вызывают уширение дифракционной картины в направлении $\perp \mathbf{H}$ и сказываются, таким образом, в основном на форме ω -кривых $i(\alpha)$. При таких измерениях интегральное отражение j -го слоя с межплоскостным расстоянием d_j есть площадь под максимумом на распределении $j(\vartheta) = \int i(\alpha) d\alpha$ с центром в точке ϑ_j , соответствующей данному d_j ,

$$r_i = \int J(\vartheta) d\vartheta / I_0 \cdot R_i^A. \quad (11)$$

В качестве объектов измерения были эпитаксиальные системы разной степени совершенства на основе соединений A^3B^5 . Пленки $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{Sb}$ ($x = 0.06$) были выращены жидкофазной эпитаксией на подложках GaSb с поверхностью типа (111). Сильно рассогласованные системы GaSb на GaAs и GaAs на Si выращивались методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложках с ориентацией (001). Значения r_i определялись для целого ряда симметричных брэгговских рефлексов, имеющих различные экстинкционные длины, на $\text{Cu } K_\alpha$ - и $\text{Mo } K_\alpha$ -излучениях. Кристаллы монохроматора и анализатора выбирались таким образом, чтобы, во-первых, не вызывать заметных дисперсионных уширений, а во-вторых, чтобы избежать влияния более сильных рефлексов для кратных длин волн сплошного спектра.

Из значений r_i рассчитывались толщины эпитаксиальных слоев с использованием динамической и кинематической теорий. При расчетах

были использованы факторы рассеяния из таблиц Кромера-Манна [13], дисперсионные поправки из [14], из приведенных там же значений $\Delta f''$ были вычислены коэффициенты фотоэлектрического поглощения.

Результаты и их обсуждение

Экспериментально измеренные значения интегральных коэффициентов отражения эпитаксиальных пленок трех исследованных систем приведены в табл. 1-3.

Из трех образцов GaAlSb/GaSb первый, по данным рентгенотопографического наблюдения, не содержал дислокаций несоответствия (пленка когерентно сочленена с подложкой), а два других имели дислокационные сетки, локализованные на гетерогранице [15]. При взгляде на табл. 1 обращает на себя внимание следующее. Для отражения (111) Cu K_α , где глубина проникновения, обусловленная поглощением, меньше толщины эпитаксиальных слоев, все три образца дают значения r_i , близкие друг к другу и в пределах погрешности равные интегральному отражению динамической теории для толстого кристалла. И это имеет место несмотря на то, что влияние дислокаций несоответствия (в образцах III и II) на этот рефлекс достаточно сильно, о чем говорят значительные, порядка 50 угл.с, уширения кривых отражения [15]. С другой стороны, из табл. 1

Таблица 1. Экспериментальные значения интегральных отражающих способностей для гетеросистемы GaAlSb/GaSb и толщины эпитаксиальных слоев, рассчитанные из них по динамической $t^{\text{дин}}$ и кинематической $t^{\text{кин}}$ теории

Номер образца	Параметры	111 Cu K_α	222 Mo K_α	333 Mo K_α	444 Mo K_α
I-III	r_i^k	$2.38 \cdot 10^{-4}$	$8.50 \cdot 10^{-6}$	$2.59 \cdot 10^{-5}$	$1.79 \cdot 10^{-5}$
	r_i^g	$8.73 \cdot 10^{-5}$	$4.90 \cdot 10^{-6}$	$8.15 \cdot 10^{-6}$	$5.75 \cdot 10^{-6}$
I	$r_i, 10^{-6}$	85 ± 3	2.99 ± 0.10	5.58 ± 0.15	3.29 ± 0.10
	$t^{\text{дин}}, \text{мкм}$	-	1.90 ± 0.08	1.96 ± 0.07	2.05 ± 0.06
	$t^{\text{кин}}, \text{мкм}$	-	1.71 ± 0.05	1.65 ± 0.05	1.84 ± 0.05
	$R_i^s, 10^{-6}$		3.15	6.00	5.04
	$t, \text{мкм}$		2.0	2.06	1.2
II	$r_i, 10^{-6}$	94 ± 3	4.82	7.75	5.52
	$t^{\text{дин}}, \text{мкм}$	-	3.90 ± 0.30	4.4 ± 0.5	5.9 ± 0.6
	$t^{\text{кин}}, \text{мкм}$		3.20 ± 0.12	2.47 ± 0.07	3.41 ± 0.10
	$R_i^s, 10^{26}$		3.08	7.75	6.45
	$t, \text{мкм}$		2.4	0.34	-
III	$r_i, 10^{-6}$	86 ± 3	7.00	12.0	9.45
	$t^{\text{кин}}, \text{мкм}$		5.9 ± 0.35	4.35 ± 0.17	7.0 ± 0.3
	$R_i^s, 10^{-6}$		1.0	4.3	4.15
	$t, \text{мкм}$		7.2	4.3	3.0

П р и м е ч а н и е. r_i^k и r_i^g рассчитаны с коэффициентами поляризации, соответствующими бездисперсионной схеме для GaSb.

Таблица 2. Экспериментальные значения интегральных отражающих способностей и толщины эпитаксиальных слоев для гетеросистемы GaSb/GaAs

Номер образца	Параметры	200 Mo K_α	400 Mo K_α	800 Mo K_α	200 Cu K_α	400 Cu K_α
764	$r_i, 10^{-5}$	0.97 ± 0.02	2.55 ± 0.05	0.13 ± 0.01	1.74 ± 0.05	5.17 ± 0.15
	$t^{\text{кин}}, \text{мкм}$	1.68 ± 0.08	1.68 ± 0.05	1.75 ± 0.07	1.46 ± 0.10	1.60 ± 0.05
	$u^{\text{кин}}$	0.80	1.23	0.30	0.78	1.17
	$R_i^s, 10^{-5}$	1.89 ($> R_i^g$)				2.74
	$t, \text{мкм}$			-		0.68
811	$r_i, 10^{-5}$	1.26 ± 0.03	3.93 ± 0.10	0.23 ± 0.01	2.39 ± 0.05	6.15 ± 0.20
	$t^{\text{кин}}, \text{мкм}$	2.50 ± 0.10	2.86 ± 0.10	3.43 ± 0.15	3.6 ± 0.8	2.80 ± 0.15
	$u^{\text{кин}}$	1.19	2.09	0.59	1.91	2.04
	$R_i^s, 10^{-5}$					1.82
	$t, \text{мкм}$					1.80

видно, что для толстой пленки с сеткой дислокаций значения интегрального отражения для рефлексов (222) и (333) превышают рассчитанные по динамической теории для толстого поглощающего кристалла, хотя они и далеки от кинематических значений.

Значения толщин, полученные из разных раффлексов, совпадают только для когерентной пленки, где и должны выполняться соотношения динамической теории. Что касается двух других образцов, то для них значения t , рассчитанные двумя способами, заметно расходятся друг с другом. Очевидно, рассеяние в этих образцах носит промежуточный между кинематическим и динамическим характер.

Здесь прослеживается аналогия с массивными монокристаллами, где, как известно [16], хаотические дислокации, распределенные по объему, вызывают увеличение интегрального отражения, начиная с объемной плотности $\rho \approx 10^4 - 10^5 \text{ см}^{-2}$. Дислокационные сетки несоответствия, так же как и хаотические дислокации в объеме, вызывают уширение брэгговских рефлексов. Однако, с другой стороны, сетки на гетерогранице, во-первых, уширяют дифракционное отражение только в направлении, перпендикулярном вектору \mathbf{H} , и не влияют практически на распределение интенсивности вдоль вектора обратной решетки, во-вторых, для неоднородных по глубине пленок распределение вдоль \mathbf{H} может содержать осцилляции [17,18]. Это позволяет предположить, что в определенной степени сохраняются фазовые соотношения между волнами, рассеянными на разной глубине эпитаксиального слоя, по крайней мере в том случае, когда сетка локализована на гетерогранице и размер области когерентного рассеяния в перпендикулярном к ней направлении равен толщине слоя. В таком предположении дислокации несоответствия не должны столь же заметно влиять на интегральное отражение брэгговских рефлексов, как хаотические дислокации, при одинаковой степени уширения дифракционных кривх.

Для некогерентных эпитаксиальных пленок с большой степенью несоответствия решеток GaSb на GaAs и GaAs на Si, где имеется большая плотность прорастающих сквозь пленку дислокаций ($\geq 10^8 \text{ см}^{-2}$) [19], ре-

Таблица 3. Толщины эпитаксиальных слоев для гетеросистемы GaAs/Si, полученные из экспериментальных значений интегральной отражающей способности

Номер образца	400 Мо K_{α} (бр.)	400 Мо K_{α} (л.)	220 Мо K_{α} (л.)	400 Cu K_{α} (бр.)
1	1.09 ± 0.03	1.12 ± 0.03	1.16 ± 0.04	1.11 ± 0.03
3	1.72 ± 0.07	1.66 ± 0.05	1.80 ± 0.05	1.72 ± 0.05
13	6.63 ± 0.58	6.94 ± 0.28	6.75 ± 0.28	6.45 ± 0.25

результаты, приведенные в табл. 2 и 3, показывают, что рассеяние в этих слоях хорошо описывается кинематической теорией. Об этом говорит тот факт, что толщины, рассчитанные по (4) из измерений рефлексов разного порядка с существенно отличающимися экстинкционными длинами (а значит, имеющими разные u), совпадают в пределах погрешности. Совместимость результатов, полученных при измерениях на разных длинах волн излучения, а также в брэгг- и лауэ-геометрии (для GaAs на Si), указывает на корректность использованных при расчете параметров, в частности коэффициентов поглощения. Таким образом, для эпитаксиальных слоев с распределенными по всей толщине дислокациями, плотность которых превышает 10^8 см^{-2} , при определении толщин из интегрального отражения можно пользоваться соотношениями кинематической теории, что неудивительно, поскольку при таких ρ средние расстояния между дислокациями значительно меньше экстинкционной длины. Заметим, что для дифракционных отражений от этих пленок кроме уширения рефлексов перпендикулярно \mathbf{H} наблюдается и заметное уширение параллельно вектору обратной решетки.

Возвращаясь к пленкам $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{Sb}$, где рассеяние носит промежуточный характер между кинематическим и динамическим, отметим, что приведенные в табл. 1 толщины, определенные по соотношениям динамической и кинематической теорий, дают соответственно верхний и нижний пределы, между которыми, очевидно, и находится истинное значение. Найти однозначную связь между степенью дефектности и интенсивностью отражения в настоящее время вряд ли представляется возможным. Следовательно, задача определения толщины эпитаксиальных слоев с дислокациями несоответствия сводится к подбору таких дифракционных условий измерения, для которых эти два крайних значения были бы возможно ближе друг к другу.

Из сравнения рис. 1 и 2 видно, что разница между двумя величинами τ_i^k и τ_i^g уменьшается с уменьшением приведенной толщины и с увеличением уровня поглощения. Для $u = 0.5$ она составляет 8% при $|g| = 0.2$ и 15% при $|g| = 0.05$; для толщины $u = 1.5$ кинематическая интенсивность превосходит динамическую уже на 45 и 70% соответственно. Однако при больших $|g|$ кривые $R_H^y(u)$ быстрее достигают насыщения, одна и та же толщина приходится на более пологие участки кривой, так что относительная разница между $t^{\text{дин}}$ и $t^{\text{кин}}$ может увеличиться.

На рис. 3 представлена зависимость относительной разницы между двумя крайними значениями толщины, вычисленными из одного и того же значения интегрального отражения по кинематическим и динамическим формулам от толщины u . Разумеется, получаемая неопределенность тем

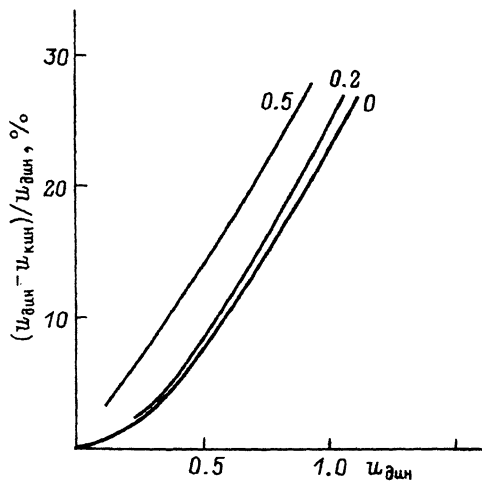


Рис. 3. Относительная разность между верхним и нижним пределами приведенной толщины, рассчитанными соответственно по динамической и кинематической теориям из одного и того же значения интегрального отражения.

больше, чем больше приведенная толщина. Однако она также возрастает, хотя и незначительно, с увеличением параметра поглощения $|g|$.

Погрешность определения толщины из интегрального отражения пленки как по динамической, так и кинематической теории также увеличивается с ростом u и больше для больших $|g|$ (рис. 4). Таким образом, оптимальными для определения толщины из интегральной интенсивности отражения являются как можно меньшие значения u , т.е. большие экстинкционные длины при одной и той же толщине пленки t .

Увеличение экстинкционной длины возможно или путем использования высоких порядков отражения, или перехода к "разностным", или квазизапрещенным, отражениям, каковыми для кристаллов с решеткой сфалерита являются рефлексy с суммой индексов $h+k+l = 4n+2$. Для соединений с близкими по порядковому номеру атомами структурный фактор таких отражений может быть очень малым. Однако использование этих отражений приводит к сильному увеличению поглощения относительно экстинкции, т.е. увеличению $|g|$, что, как видно из рис. 3, ухудшает точность определения толщины. Кроме того, структурный фактор таких отражений очень чувствителен к составу эпитаксиальных слоев, что делает его значение весьма неопределенным для пленок твердых растворов. Правда, здесь имеется возможность определения состава из измерений относительной разницы параметров решетки и вычисления на этой основе величины x .

Использование высоких порядков отражений типа $4n \pm 1$ и $4n$ на коротких длинах волн, например $Mo K_{\alpha}$, вводит нас в область как больших экстинкционных длин, так и не слишком большого относительного поглощения и с этой точки зрения выглядит более предпочтительным по сравнению с "разностными" рефлексyми. Однако здесь подстерегает другая опасность. Для больших порядков резко возрастает роль фактора Дебая-Валлера l^{-M} , поскольку $M \sim (\sin \vartheta / \lambda)^2$. Именно этот параметр является наименее надежным из всех дифракционных характеристик, известные из литературы данные для многих соединений A^3B^5 противоречивы. Что касается твердых растворов на основе этих соединений, то для них температурные факторы рассеяния вообще не изучены.

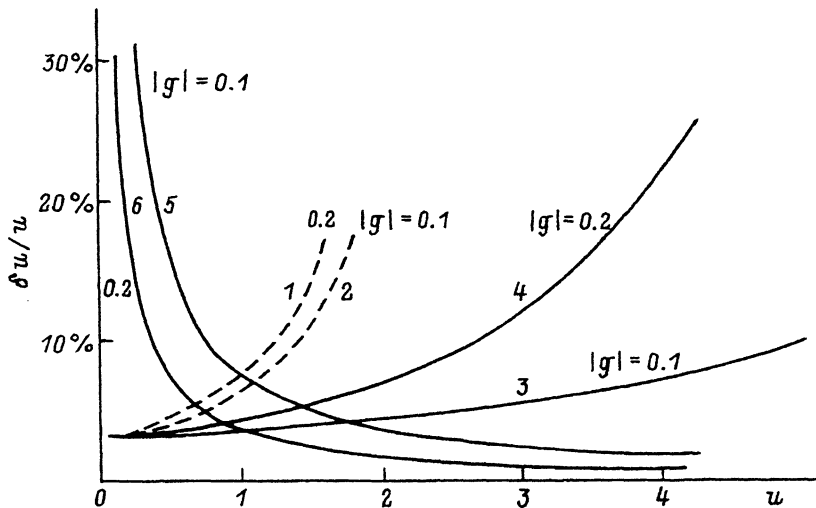


Рис. 4. Относительная погрешность определения толщины эпитаксиальной пленки для разных уровней поглощения.

1, 2 — по динамической теории из r_i пленки; 3, 4 — по кинематической теории из r_i пленки; 5, 6 — из интегрального отражения R_i^0 подложки; $\delta u/u$ вычислены в предположении $\delta r_i/r_i = = 3\%$ без учета погрешностей в значениях используемых параметров рассеяния.

В данной работе использовались тепловые факторы отдельных сортов атомов в GaAs и GaSb из собственных измерений одного из авторов [20]. Однако не исключено, что именно недостаточная точность этих параметров является причиной большей величины t , получаемой из измерения интенсивности отражения (800) для системы GaSb/GaAs. Что касается пленок твердого раствора GaAlSb, то для них были взяты тепловые множители антимонида галлия.

Исходя из вышесказанного, можно заключить, что для образцов II и III GaAlSb/GaSb из измеренных рефлексов оптимальным для определения толщины является (222) (табл. 1) и именно между значениями $t^{\text{кин}}$ и $t^{\text{дин}}$, полученными из него, и лежит истинное значение толщины этих пленок.

При относительно больших толщинах ($u \approx 1.5-2$) интегральное отражение пленки уже малочувствительно к изменению толщины, поэтому получение последней из значений r_i не дает хороших результатов. Правда, следует отметить, что для сильно рассогласованных дислокационных слоев, для которых применимо кинематическое приближение, возможность определения толщины распространяется на больший интервал значений u (рис. 4).

Для более толстых эпитаксиальных пленок толщину последних, вообще говоря, можно определять по ослаблению интегрального отражения подложки, при этом точность такого определения возрастает с увеличением толщины пленки (рис. 4). Однако надежно такой способ можно использовать только для совершенных когерентных слоев. Хотя для выращивания эпитаксиальных пленок обычно выбираются малодислокационные подложки и использование динамической формулы отражения от толстого кристалла для расчета интегрального отражения подложки было бы вполне уместно, эксперимент показывает, что образование дислокационных сеток вызывает уширение дифракционных кривых отражения подложки. Дислокации несоответствия, локализованные на гетерограни-

це, могут обладать дальнедействующими упругими полями, проникающими в глубь кристалла. И хотя уширение, обусловленное ими, заметно меньше, чем для пленки, они вполне могут нарушить динамический характер рассеяния от подложки.

Значения толщин, полученные из измерений R_i^s подложек, также приведены в таблицах. Видно, что далеко не во всех случаях они согласуются с данными, рассчитанными из интегральных отражений пленок. Скорее всего, это и объясняется сказанным выше. Действительно, для некоторых образцов измеренные R_i^s подложек больше рассчитанного по динамической теории, несмотря на поглощение в пленке. В силу этого пользоваться интегральной интенсивностью рефлекса подложки для определения толщины эпитаксиальных пленок следует с осторожностью.

Особо следует сказать о слоях с неоднородным распределением параметра решетки по глубине, когда вместо одного пика мы имеем сложную дифракционную кривую с рядом максимумов. Для тонких слоев ($u < 0.3$) толщина может быть определена также из интегральной интенсивности отражения по кинематической формуле, как показано в [21]. Однако даже для более толстых слоев, когда при однородном распределении деформации следует учитывать динамические эффекты, при неоднородном профиле более правильным может оказаться использование кинематической формулы. Этот вопрос требует теоретического рассмотрения. Выработка критериев использования интегрального отражения для таких объектов важна потому, что во многих случаях получение профиля распределения деформации из кривых дифракционного отражения может быть сопряжено с большими трудностями, в частности из-за неоднозначности решения данной задачи.

Таким образом, измерение абсолютных значений интегральных коэффициентов отражения для эпитаксиальных систем разной степени совершенства и анализ полученных результатов показывает, что 1) толщина эпитаксиальных слоев в когерентных системах может быть определена по формуле динамической теории дифракции, 2) для эпитаксиальных систем с сетками дислокаций на гетерогранице значения r_i лежат между динамическим и кинематическим пределами и оценка толщины пленок может быть осуществлена путем выбора оптимальных дифракционных условий с целью уменьшения разницы $\Delta t = t^{\text{дин}} - t^{\text{кин}}$, 3) для сильно рассогласованных эпитаксиальных систем с плотностью прорастающих дислокаций в пленке $\rho \geq 10^8 \text{ см}^{-2}$ толщина последней может быть определена по кинематической теории.

Список литературы

- [1] Fukuhara A., Takano J. // Acta Cryst. A. 1977. Vol. 33. P. 137-143.
- [2] Hill M.J., Tanner B.K., Halliwell M.A.G., Lyons M.H. // J. Appl. Cryst. 1985. Vol. 18. P. 446-451.
- [3] Tapfer L., Ploog K. // Phys. Rev. B. 1986. Vol. 33. P. 5565-5574.
- [4] Macrander A.T., Lau S., Stregge K., Chu S.N.G. // Appl. Phys. Lett. 1988. Vol. 52. P. 1985-1987.
- [5] Bensoussan S., Malgrange C., Savage-Simkin M. // J. Appl. Cryst. 1987. Vol. 20. P. 230-234.
- [6] Bassignana J.C., Tan C.C. // J. Appl. Cryst. 1989. Vol. 22. P. 269-276.
- [7] Chachhuri J., Shah S., Harbison J.P. // J. Appl. Phys. 1989. Vol. 66. P. 5373-5375.
- [8] Max von Laue. Röntgenstrahlinterferenzen. Frankfurt; M., 1960. P. 475.
- [9] De Marco J.J., Weiss R.J. // Acta Cryst. 1965. Vol. 19. P. 68-75.

- [10] Пинскер З.Г. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах. М.: Наука, 1974. 368 с.
- [11] Weiss R.J. // Acta Cryst. 1965. Vol. 19. P. 824.
- [12] Jida A., Kohrak K. // Phys. Stat. Sol. (a). 1979. Vol. 51. P. 533-542.
- [13] Cromer D.T., Mann J.B. // Acta Cryst. A. 1968. Vol. 24. P. 321-327.
- [14] Cromer D.T., Liberman D. // J. Chem. Phys. 1970. Vol. 53. P. 1891-1897.
- [15] Кюмм Р.Н., Аргунова Т.С. // ФТТ. 1989. Т. 31. Вып. 1. С. 40-45.
- [16] Batterman B.W. // J. Appl. Phys. 1959. Vol. 30. P. 508-513.
- [17] Кюмм Р.Н. // ФТТ. 1989. Т. 31. Вып. 8. С. 270-272.
- [18] Аргунова Т.С., Кюмм Р.Н., Матвеев Б.А. и др. // ФТТ. 1990. Т. 32. Вып. 11. С. 3355-3360.
- [19] Кюмм Р.Н., Шольц Р., Рувимов С.С. и др. // ФТТ. 1993. Т. 35. Вып. 3. С. 724-735.
- [20] Кюмм Р.Н. // ФТТ. 1978. Т. 20. Вып. 2. С. 395-398.
- [21] Afanasew A.M., Kovalchuk M.V., Kovev E.K., Kohn V.G. // Phys. Stat. Sol. (a). 1977. Vol. 42. P. 415-420.

Физико-технический институт
им. А.Ф.Иоффе
Санкт-Петербург
Кабардино-Балкарский университет
Нальчик

Поступило в Редакцию
19 февраля 1993 г.