

Сравнительный анализ дифракции Брэгга и Лауэ от сверхрешеток CdF₂–CaF₂ на Si(111)

© Р.Н. Кютт, А.Ю. Хилько, Н.С. Соколов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия

(Поступила в Редакцию 18 ноября 1997 г.
В окончательной редакции 15 февраля 1998 г.)

Короткопериодные сверхрешетки (СР) с периодом от 7 до 22 нм выращены методом молекулярно-лучевой эпитаксии в системе CdF₂–CaF₂ на Si(111). Произведены рентгенодифракционные измерения полученных структур в различных геометриях отражения и прохождения, продемонстрировавшие возможность создания таких объектов с высоким кристаллическим совершенством. Рассмотрены особенности дифракции от СР со слоями, обладающими существенно различными дифрагирующими способностями и деформацией разного знака по отношению к подложке. Моделированием в полукинематическом приближении получены основные параметры выращенных СР. Показана применимость модели идеальной СР к объектам, имеющим структурные дефекты.

При рентгенодифракционном определении структурных параметров сверхрешеток (СР) в большинстве случаев используется симметричная или асимметричная брэгговская геометрия измерений [1–4]. Из других схем следует упомянуть малоугловое рассеяние [4,5], дифракцию в скользящей геометрии [6] и схему симметричного отражения с наклоном образца [7]. В работе [8] показана возможность получения дифракционной картины от СР в симметричной Лауэ-геометрии. В настоящей работе проведен более подробный анализ вида дифракционных кривых и влияние на них структурных параметров СР в различных компланарных схемах дифракции.

Для исследования были выбраны СР фторидов CaF₂/CdF₂ на подложке Si(111). Возможность эпитаксиального выращивания таких структур, а также их высокое кристаллическое совершенство были недавно продемонстрированы в [8,9]. Оба эти соединения имеют кубическую гранецентрированную решетку флюорита. Значительная разница в факторах рассеяния атомов Cd и Ca делает такие СР хорошим объектом для дифракционных исследований. Возможность получения структурно совершенных СР в этой системе обусловлена близостью постоянных решетки обоих фторидов к постоянной решетки кремния. Так, при комнатной температуре параметр решетки CdF₂ на 0.78% меньше, а CaF₂ на 0.6% больше постоянной решетки кремния.

1. Дифракция Брэгга и Лауэ от СР. Теория

Для СР, общая толщина которых меньше экстинкционной длины, дифракция рентгеновских лучей может быть рассмотрена на основе полукинематического приближения [10]. Оно учитывает когерентное взаимодействие волн, отраженных подложкой и СР, так что общая отражательная способность

$$R = |A_1 + A_{SL} e^{-2\pi i H_z d}|^2. \quad (1)$$

При этом амплитуда рассеяния подложкой (A_0) рассчитывается по динамической теории, а эпитаксиальным слоем (A_{SL}) — по кинематической. Здесь d — межплоскостное расстояние на интерфейсе, а H_z — проекция вектора дифракции на нормаль к поверхности.

Согласно кинематической теории, амплитуда отражения от СР равна

$$A_{SL} = iF_{SL} \frac{\sin(m\Phi)}{\sin(\Phi)} e^{i(y-f_1)z_1}, \quad (2)$$

где для СР, состоящей из двух чередующихся слоев, рассеивающая способность одного периода

$$F_{SL} = \sin[(y-f_1)z_1] \frac{K_1}{y-f_1} + \sin[(y-f_2)z_2] \frac{K_2}{y-f_2} \exp(i\Phi),$$

$$\Phi = (y-f_1)z_1 + (y-f_2)z_2. \quad (3)$$

Здесь y есть приведенная угловая переменная, характеризующая отклонение от центра отражения подложки

$$y = \frac{\Delta\theta \sin(2\theta)}{|\chi_H|} \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_H|}}, \quad (4)$$

где γ_0 и γ_H — направляющие косинусы углов падения и отражения. Величины f_1 и f_2 выражают приведенную угловую разницу центров отражения слоев 1 и 2 и подложки. Для нерелаксированных слоев, где отлична от нуля только компонента деформации ε_{zz} , равная относительной разнице межплоскостных расстояний слоев и подложки в направлении нормали,

$$f_1 = -\varepsilon_{zz} \frac{(\gamma_H - \gamma_0)\gamma_H}{|\chi_H|} \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_H|}}, \quad (5)$$

z_1 и z_2 являются приведенными толщинами слоев 1 и 2 относительно экстинкционной длины подложки:

$$z_i = \frac{\pi t |\chi_H|}{\lambda \sqrt{\gamma_0 |\gamma_H|}}. \quad (6)$$

K_1 и K_2 — отношения структурных факторов слоев к структурному фактору подложки, m — число периодов в

СР, $|\chi_H|$ — Фурье-компонента поляризуемости, пропорциональная соответствующему структурному фактору.

Известно, что появление спутников обусловлено периодическим изменением параметров СР по глубине. В действительности мы имеем дело с двумя периодически изменяющимися величинами: деформацией (выражаемой через f) и рассеивающей способностью (структурным фактором F). Обе они имеют один и тот же период и определяются составом слоев СР. Однако имеется и существенная разница. Величина F непосредственно связана с электронной плотностью и при одинаковой структуре слоев определяется порядковыми номерами атомов, входящих в состав слоев. Профиль деформации, согласно закону Вегарда, также изначально обусловлен композицией, но он зависит еще и от распределения тангенциальных напряжений в СР, приводящих к дополнительной деформации слоев. На интенсивность спутников влияет также возможное присутствие структурных дефектов, однако их распределение не имеет, скорее всего, периодического характера и может быть учтено введением статического фактора Дебая–Валлера.

Влияние деформации на дифракционную картину определяется параметром B

$$B = \Delta f \frac{z_1 z_2}{(z_1 + z_2)} = -\Delta \varepsilon_{zz} \frac{\pi}{\lambda} \frac{t_1 t_2}{(t_1 + t_2)} \frac{(\gamma_H - \gamma_0) \gamma_H}{|\gamma_H|}, \quad (7)$$

где $\Delta \varepsilon_{zz}$ есть разность деформаций двух слоев СР [1]. При $\Delta \varepsilon_{zz} = 0$ появление спутников обусловлено разницей в рассеивающих способностях двух слоев.

Из дифракционной кривой непосредственно определяются две характеристики СР: период T из расстояния Δ между спутниками и среднее межплоскостное расстояние $\langle \varepsilon_{zz} \rangle$ из углового положения нулевого спутника относительно пика отражения подложки. Для идеальной СР со слоями стехиометрического состава с известными параметрами решетки (a) и упругими свойствами этого достаточно для вычисления толщин двух слоев

$$T = t_1 + t_2 = \frac{\lambda |\gamma_H|}{\Delta \sin(2\Theta_B)}, \quad (8)$$

$$\langle \varepsilon_{zz} \rangle = \frac{\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_1 t_1 (1 + p_1) + \left(\frac{\Delta a}{a}\right)_2 t_2 (1 + p_2)}{t_1 + t_2}, \quad (9)$$

где p_1 и p_2 — пуассоновские коэффициенты.

В обратном пространстве интенсивность дифракции для нерелаксированных СР распределена вдоль нормали к поверхности кристалла с дополнительными центрами — спутниками, расстояние между которыми обратно пропорционально периоду СР. Эти спутники находятся на одной и той же линии с узлом обратной решетки подложки для выбранного рефлекса. В общем случае эпитаксиальный слой характеризуется средним тензором дисторсии $e_{ij} = \omega_{ij} + \varepsilon_{ij}$, включающим деформации ε_{ij} и

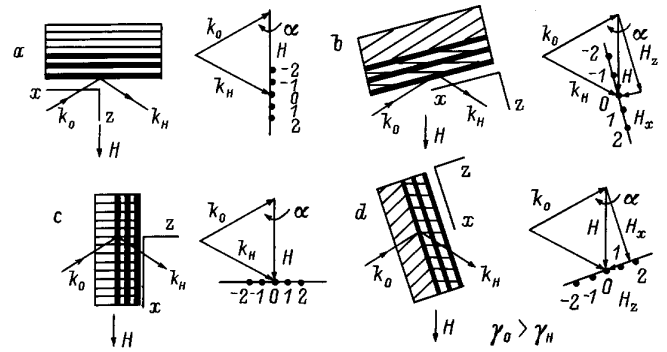


Рис. 1. Различные геометрии рентгеновских измерений: симметричная и асимметричная (a и b), симметричная и асимметричная лауэвская (c и d).

развороты ω_{ij} . Для когерентных структур, выращенных на поверхностях с высокой симметрией, отлична от нуля только компонента ε_{zz} , и деформация влияет только на те рефлексы, которые имеют ненулевую компоненту H_z . В симметричной брэгговской геометрии, где $H_z = H$, кривые дифракции зависят как от распределения деформации, так и от структурного фактора. Интенсивность в плоскости рассеяния распределена вдоль дифракционного вектора, и кривая с спутниками может быть измерена как в обычной двухкристальной схеме, так и на кривых $\theta - 2\theta$ -сканирования с анализатором (рис. 1, a). В выражении (5) следует считать $\gamma_H = -\gamma_0$. При переходе к асимметричной брэгговской дифракции соотношение интенсивностей спутников может измениться, так как деформационный вклад B пропорционален $(\gamma_0 + |\gamma_H|)$. Но он не зависит от знака асимметрии, и соответствующие двухкристальные кривые для случаев $(\gamma_0 < |\gamma_H|)$ и $(\gamma_0 > |\gamma_H|)$ различаются лишь масштабом в шкале углов и идентичны по отношениям интенсивностей спутников.

В Лау-геометрии ($\gamma_H > 0$) деформационный вклад может менять свой знак в зависимости от знака асимметрии. Поэтому при переходе от одного случая асимметрии к другому очередность спутников меняется на противоположную (рис. 1, d). В симметричной Лауэ-схеме для нерелаксированных СР $f_1 = f_2 = 0$, $B = 0$, и деформация вообще не влияет на дифракционную картину, которая тем не менее должна содержать спутники, обусловленные разницей структурных факторов двух слоев СР (рис. 1, c). Интенсивность каждого спутника в таком случае

$$r_n = m^2 \frac{\sin^2(y_n z_1)}{y_n^2} \frac{(K_1 - K_2)^2}{(K_1 + K_2)^2}, \quad (10)$$

где y_n — угловое положение n -го спутника. При этом кривая с спутниками измеряется в направлении, перпендикулярном дифракционному вектору, т. е. посредством ω -сканирования.

2. Образцы и методика измерений

Исследованные в данной работе СР выращены в системе $\text{CdF}_2/\text{CaF}_2$ методом молекулярно-лучевой эпитаксии [9]. Высокая энергия связи в молекулах этих фторидов обуславливает молекулярный характер их сублимации и позволяет, таким образом, существенно упростить технологические аспекты роста.

В качестве подложек использовались пластины кремния толщиной $350\ \mu\text{m}$, вырезанные в плоскости (111) с разориентацией не более 10 угловых минут. Подложки подвергались химической обработке с последующей высокотемпературной очисткой в вакууме. Контроль чистоты поверхности кремния осуществлялся по наличию сверхструктуры 7×7 в картинах дифракции быстрых электронов. Для улучшения кристаллического качества структур перед ростом СР на очищенной поверхности кремния выращивался буферный слой фторида кальция с применением двухтемпературной методики [11]. Температура роста СР не превосходила 100°C . Для достижения большей гладкости гетерограниц производилась остановка роста длительностью от 2 до 5 min после нанесения каждого слоя CaF_2 . Скорость роста фторидов калибровалась по тестовой структуре путем измерения картин интерференции от He-Ne-лазера и составляла несколько монослоев в минуту.

Рентгенодифракционные измерения выполнялись на трехкристальном дифрактометре. Использовались симметричные брэгговские отражения 111 и 222 и асимметричное 422 на CuK_α -излучении. Лауэ-дифракция измерялась для рефлектов 220 (симметричный) и 111 и 311 (асимметричные) на MoK_α -излучении. В качестве монохроматора и анализатора для брэгговской геометрии были взяты совершенные монокристаллы $\text{Si}(111)$. В Лауэ-случае монохроматором служил кристалл $\text{Ge}(111)$, а вместо анализатора использовалась узкая щель на детекторе. Все асимметричные рефлексy измерялись в двухкристальном варианте с открытым окном счетчика. Разрешение трехкристальной схемы составляло 7 угловых секунд, с щелевым анализатором 56 угловых секунд.

3. Экспериментальные результаты и моделирование кривых дифракции

На рис. 2 приведены экспериментальные кривые для брэгговских отражений 111, 222 и 422 для образца № 117 с короткопериодной СР. Наличие на каждой из них нескольких спутников указывает на хорошую периодичность СР. Значения периода, определенные из всех трех кривых, совпадают с точностью, лучшей чем 1%. Для кривой 111-отражения нулевой спутник СР не выделяется на фоне максимума подложки, поэтому среднее значение деформации $\langle \varepsilon_{zz} \rangle$ для большей точности определено из кривых отражения второго порядка. Независимо от типа отражения слои CdF_2 обладают большей рассеивающей способностью по сравнению с CaF_2 , поэтому

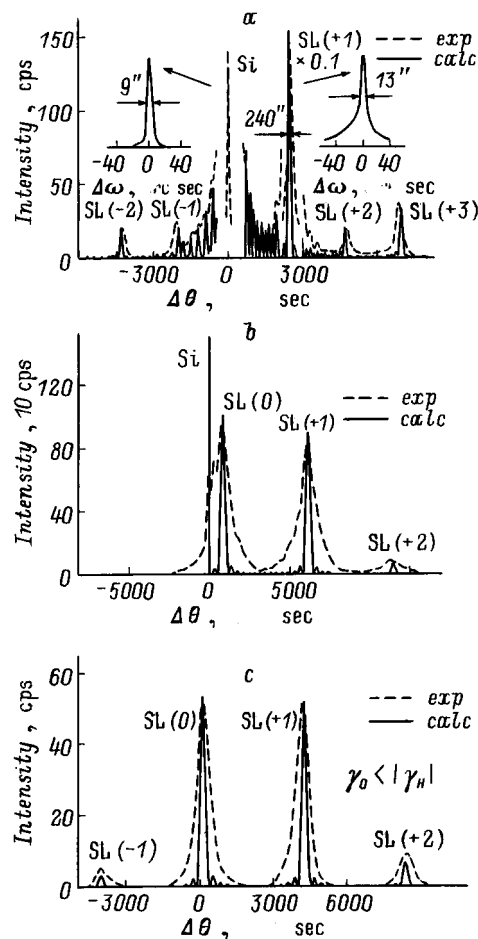


Рис. 2. Экспериментальные и расчетные кривые для структуры № 117. *a* — отражение 111, *b* — 222, симметричная брэгговская геометрия, *c* — 422, асимметричная брэгговская геометрия.

на всех дифракционных кривых спутники со стороны больших углов значительно интенсивнее. Поскольку деформационный параметр B , увеличивающийся с ростом порядка отражения, становится для 222 и 422 больше единицы даже для короткопериодной СР, нулевой спутник соизмерим с (+1)-спутником. На асимметричном рефлексe 422 измеряемые дифракционные кривые показывают только пики СР (рис. 2, *c*). Это связано с типом B интерфейса $\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$, при котором решетка пленки развернута на 180° относительно нормали к границе раздела [11].

Тот же набор дифракционных кривых для образца № 126 с заметно (в 2.5 раза) большим периодом СР приведен на рис. 3. На них также наблюдаются четкие спутники до +4 порядка. Поскольку в данном случае период, а следовательно, и параметр B (при приблизительно одинаковых толщинах слоев) больше, чем для предыдущего образца, это приводит к характерным отличиям этих кривых от приведенных на рис. 2. В частности, для отражений 222 и 422 нулевой спутник

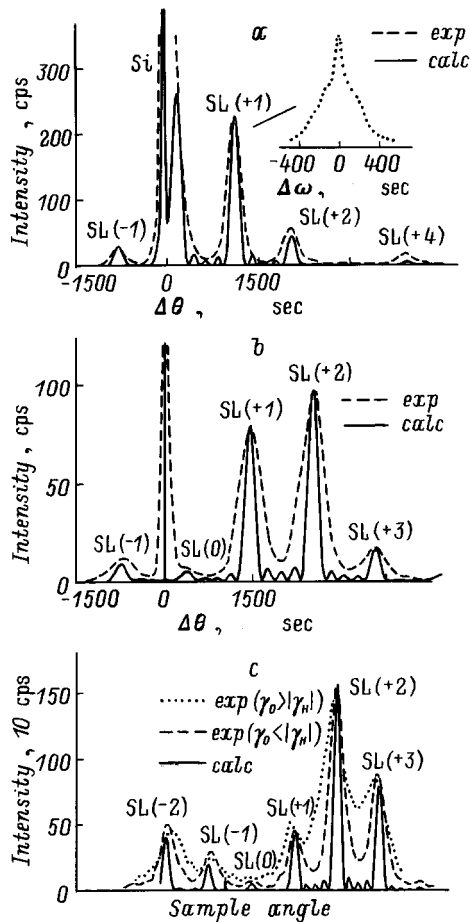


Рис. 3. Экспериментальные и расчетные кривые для структуры № 126. *a* — отражение 111, *b* — 222, симметричная брэгговская геометрия, *c* — 422, асимметричная брэгговская геометрия.

практически полностью подавлен, т. е. понятие о СР как об общем слое со средним параметром решетки теряет смысл. Аналогичные кривые были получены и для других образцов. Структурные параметры СР, полученные непосредственно из дифракционных кривых, приведены в табл. 1.

Расчетные кривые также приведены на рис. 2, 3. В расчет закладывались следующие параметры: средняя приведенная деформация f , рассеивающая способность (структурный фактор) F и толщина каждого из слоев СР. Поскольку сателлиты на экспериментальных кривых оказались значительно уширены, в качестве критерия при подгонке параметров было принято отношение высот сателлитов на экспериментальной и расчетной кривых. Поскольку период СР определяется из рентгеновских измерений однозначно, основным варьируемым параметром являлось соотношение толщин фторидов кальция и кадмия (t_1 и t_2 соответственно) при неизменном периоде T . Толщина буферного слоя принималась пропорциональной толщине слоя CaF_2 в СР согласно режимам роста. При недостаточно хорошем соответ-

ствии расчетных и экспериментальных кривых в качестве дополнительных параметров вводились переходные слои с толщинами t_A и t_B и средними значениями деформации и рассеивающих факторов. Все расчеты выполнялись в предположении когерентности слоев структур друг другу. Параметры, соответствующие расчетным кривым, наиболее близким к экспериментальным, приведены в табл. 2. Большинство расчетных параметров близко к технологическим. Заметные расхождения, наблюдаемые для некоторых СР (табл. 2), могут быть объяснены тем, что упомянутая процедура калибровки скоростей осаждения, обычно обеспечивающая точность в пределах 10%, с целью снижения затрат ресурсов проводилась не для каждой структуры.

На экспериментальных ω -кривых симметрично Лауэ-отражения 220 (–1)- и (+1)-сателлиты наблюдаются для всех исследованных образцов (пример такой кривой для образца № 156, имевшего разные толщины составляющих слоев СР, приведен на рис. 4). Как и следует из теории, они симметрично расположены относительно максимума Si. Из расстояния между ними по формуле $T = \lambda / (\Delta \sin \theta_B)$ определяется период СР, который хорошо совпадает со значениями, получаемыми из брэгговских кривых (табл. 1). На шкале 2θ положение сателлитов совпадает с угловым положением пика Si, что указывает на отсутствие релаксационной компоненты деформации ($\varepsilon_{xx} = 0$ в пределах точности измерений).

Кривые асимметричных Лауэ-рефлексов 111 и 113 (рис. 5), имеющих разное направление асимметрии и примерно одинаковое значение деформационного параметра B , наглядно показывают, как сателлиты меняются местами при переходе от геометрии с $\gamma_0 > |\gamma_H|$ в первом случае к $\gamma_0 < |\gamma_H|$ во втором. Указанная особенность

Таблица 1. Результаты рентгенодифракционных измерений

Номер образца	111 (Брэгг)				220 (Лауэ)		
	$\varepsilon_{xx} \cdot 10^{-3}$	T, nm	W_θ	$W_{\theta-2\theta}$	T, nm	W_θ	$W_{\theta-2\theta}$
117	–3.25	6.84	13''	240''	6.9	390''	50''
126	–3.25	17.5	400–20''	240''	17.6	530''	80''
156	–1.95	21.9	1220''	185''	22.0	190''	760''
211	–1.4	16.9	400–40''	190''			
237	–2.92	15.8	240''	80''			

Таблица 2. Параметры структур по результатам численного моделирования

Номер образца	Количество периодов	$t_1/t_2, \text{nm}$ (технологич.)	$t_1/t_2, \text{nm}$ (расчетное)	t_A, nm	t_B, nm
117	15	3.1/3.1	3.13/3.73	0.97	0.22
126	5	9.4/9.4	8.53/8.97	0.00	0.00
156	5	9.4/9.4	11.91/9.99	0.00	0.00
211	6	10.0/7.5	9.33/7.57	0.00	0.00
237	24	10.0/7.5	7.89/7.92	0.89	0.59

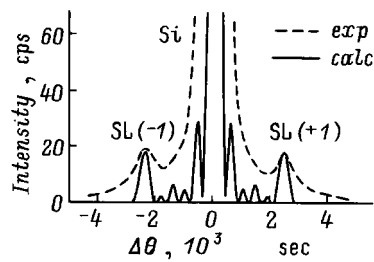


Рис. 4. Симметричное Лауэ-отражение 220 для образца № 156.

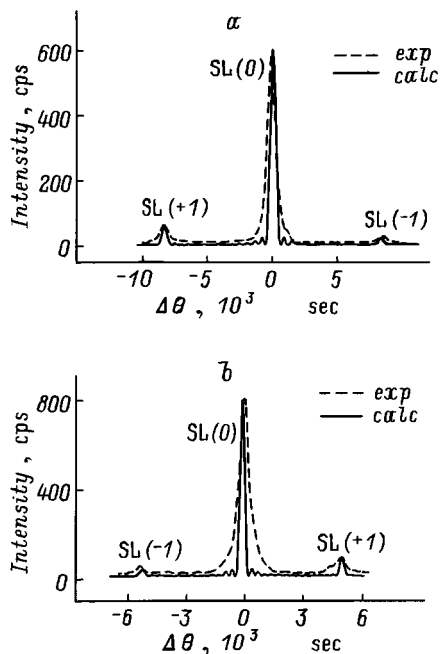


Рис. 5. Асимметричные Лауэ-отражения 111 (a) и 311 (b) для образца № 117.

дифракционных кривых связана с тем, что основной вклад в разницу дифракционных условий для двух слоев СР вносит не отличие межплоскостных расстояний d , а разный наклон отражающих плоскостей в CaF_2 и CdF_2 , когерентно связанных с подложкой.

4. Обсуждение результатов

Как отмечено выше, параметры идеальной СР со слоями стехиометрического состава определяются непосредственно из дифракционной кривой. Однако кривые, рассчитанные с этими параметрами, заметно расходились с экспериментальными. Параметры решетки CaF_2 и CdF_2 и пуассоновские коэффициенты, рассчитанные для плоскостей (111) из упругих постоянных ($p(\text{CaF}_2) = 0.96$ и $p(\text{CdF}_2) = 1.35$), согласовывались с результатами рентгенодифракционных измерений на эпитаксиальных слоях [12] (однако более толстых, чем период исследованных СР), и у нас не было достаточных оснований ставить их под сомнение. Поэтому

при моделировании дифракционных кривых в рамках двухслойной системы вариация толщин была возможна только в пределах точности измерения $\langle \varepsilon_{zz} \rangle$. Даже если взять завышенную оценку $\delta \varepsilon_{zz} \approx \pm 10^{-3}$, то это соответствовало бы изменению в $\alpha = t_1/t_2$, равному ± 0.03 . Только введение переходных слоев позволило в некоторых случаях (табл. 2) получить искомое отношение высот сателлитов при сохранении среднего значения $\langle \varepsilon \rangle$. Эти толщины, находящиеся в пределах двух-трех монослоев, имеют смысл эффективной глубины взаимопроникновения слоев СР друг в друга, которое в нашем случае может быть обусловлено шероховатостью внутренних интерфейсов (из-за низких температур роста диффузия на гетерограницах отсутствует). Заметим, что СР с переходными слоями (образцы № 117 и 237) содержат заметно большее число периодов по сравнению с другими исследованными образцами.

Конечно, значение средней деформации может быть связано и с релаксацией упругих напряжений. Можно представить два возможных механизма: с образованием дислокационной сетки на гетерогранице подложка-СР и за счет релаксации между составляющими слоями СР. Однако и в том, и в другом случае изменение среднего межплоскостного расстояния СР невелико. В первом варианте при полной релаксации скачок тангенциального несоответствия на гетерогранице составит при равенстве толщин двух слоев $\varepsilon_{xx} = 9 \cdot 10^{-4}$ и приведет к изменению нормальной компоненты $\langle \varepsilon_{zz} \rangle$ от $-3.25 \cdot 10^{-3}$ (для нерелаксированной СР) до $-2.25 \cdot 10^{-3}$. Во втором случае при полной релаксации всех слоев СР $\langle \varepsilon_{zz} \rangle$ должно быть равно среднему несоответствию $-0.9 \cdot 10^{-3}$.

Из измерений в симметричной Лауэ-геометрии следует, что тангенциальное несоответствие $\langle \varepsilon_{xx} \rangle = 0$, но точность определения составляла здесь величину $\pm 3 \cdot 10^{-4}$. Таким образом, мы не можем исключить наличия релаксации в пределах до 30%. Однако релаксация по первому механизму не привела бы к сколько-нибудь заметному изменению соотношений интенсивности сателлитов. Последняя определяется разницей деформаций двух слоев $\Delta \varepsilon_{zz}$, а эта величина практически не изменяется при релаксации (от $-3.01 \cdot 10^{-2}$ для упругонапряженной до $-2.97 \cdot 10^{-2}$ для 100% релаксации). Поэтому даже в предположении некоторой релаксации на гетерогранице полученные при моделировании параметры СР, приведенные в табл. 2, следует признать достаточно надежными.

Структурные нарушения вызывают заметное уширение сателлитов на экспериментальных кривых, поэтому трудно рассчитывать на однозначное соответствие с расчетом. Использованное нами при подгонке в качестве критерия соотношение пиковых интенсивностей сателлитов может быть оправдано при условии, что все сателлиты одинаковым образом уширены под влиянием структурных несовершенств и что при этом не происходит перераспределения интенсивности между сателлитами. Это в свою очередь предполагает отсутствие сколько-нибудь заметного регулярного изменения дефектной структуры

по глубине СР, а также нерегулярных флуктуаций периодичности и толщины слоев. Последние, как известно [1], ведут к ослаблению сателлитов, более заметному для высоких порядков, а также к появлению диффузного рассеяния. В нашем случае по результатам расчетов, наоборот, интенсивности сателлитов высокого порядка зачастую оказывались несколько выше на экспериментальных кривых (рис. 3, а). Таким образом, это расхождение не может быть объяснено флуктуациями периодичности.

Одним из критериев достоверности полученных характеристик СР может служить совместимость результатов, полученных для разных рефлексов, поскольку они обладают различной чувствительностью к параметрам, характеризующим сверхрешетку. Отражение 222 для решетки флюорита относится к так называемым "разностным" рефлексам, значение $F(222)$ для CaF_2 очень мало, и рассеяние в СР осуществляется практически только слоями CdF_2 . Поэтому форма дифракционной кривой не зависит от рассеивающих факторов (последние влияют только на интегральную интенсивность) и определяется только деформацией и толщиной слоев. С другой стороны, для асимметричных Лауэ-рефлексов 111 и 311 влияние деформационного вклада заметно меньше, чем в брэгговской геометрии, и соотношение высот сателлитов существенно зависит от распределения рассеивающей способности по периоду. Использование такого рода рефлексов позволяет осуществить подгонку расчетных и экспериментальных кривых по минимальному набору параметров, что повышает степень однозначности получаемых результатов.

При подгонке нам не пришлось заметно варьировать значения рассеивающих способностей, что указывает на хорошую кристалличность слоев СР; статический фактор Дебая–Валлера можно положить равным единице.

Структурное совершенство исследованных СР может быть оценено по кривым ω -сканирования в симметричной брэгговской геометрии. Лучшим является образец с короткопериодной СР № 117, для которого указанные кривые (вставка на рис. 2, а) лишь на 4 угловых секунды шире, чем для подложки Si. Для этого же образца ширина сателлитов на кривой ω -сканирования в симметричном Лауэ-рефлексе соответствует общей толщине СР. Для других СР наблюдается заметное уширение сателлитов как в поперечном, так и продольном направлении относительно нормали z . При этом брэгговские ω -кривые часто имеют форму с двумя наложенными друг на друга максимумами: более широким нижним и узким верхним (для образцов № 156 — вставка на рис. 3, а; № 211). Такой вид характерен для кривых от очень тонких слоев и указывает чаще всего на наличие сильно деформированных областей, не перекрывающихся между собой. В этом случае кривые отражения формируются за счет суммирования когерентного рассеяния от недеформированной области и некогерентного от сильно нарушенной [13,14]. Если предположить максимально

допустимую (см. выше) степень релаксации на гетерогранице ($\varepsilon_{xx} \leq 3 \cdot 10^{-4}$), то она соответствует плотности сетки линейных дислокаций порядка 10^4 см^{-1} . Тогда среднее расстояние между линиями дислокаций около $1 \mu\text{м}$, что значительно больше общей толщины СР ($0.1\text{--}0.4 \mu\text{м}$). При таком соотношении теоретическое рассмотрение дифракции от тонких слоев с дислокационными сетками дает форму ω -кривых, близкую к измеренной нами [14]. Там же показано, что форма ω -кривых гораздо более чувствительна к началу релаксации (образованию дефектов релаксации), чем величина тангенциального несоответствия. Следует отметить, что степень совпадения расчетных и экспериментальных кривых не зависит от формы и ширины ω -кривых. Например, хорошее соответствие было получено для образца № 156, имеющего максимально уширенную ω -кривую примерно гауссовской формы. Это подтверждает наш вывод о том, что релаксация на нижней гетерогранице мало влияет на отношение интенсивностей сателлитов и достоверность полученных нами параметров СР.

Для характеристики совершенства структуры в Лауэ-геометрии лучше использовать угловую ширину $\theta\text{--}2\theta$ -кривой. Если СР содержит структурные дефекты, то $\theta\text{--}2\theta$ -кривая может быть уширена за счет локальных флуктуаций ε_{xx} и ограниченных в x -направлении размеров областей когерентного рассеяния. Из табл. 1 видно, что для образца № 117 значение $W_{\theta\text{--}2\theta}$ равно угловому разрешению щели на счетчике, а для других оно больше. Отметим здесь, что при переходе от геометрии Брэгга к Лауэ-геометрии с поворотом дифракционного вектора на 90° мы меняем направление влияния локальных разориентаций, поскольку они воздействуют на кривые ω -сканирования (перпендикулярно вектору H). В брэгговском случае — это x -направление. В симметричном Лауэ-рефлексе ω -кривые измеряются в направлении z , а ширина рефлекса в x -направлении свободна от их влияния. Поэтому заметно меньшая ширина чувствительных к дефектам кривых $\theta\text{--}2\theta$ в геометрии прохождения по сравнению с ω -кривыми в брэгговском случае вполне объяснима.

Наличие дефектов в изученных СР, вообще говоря, и связано с релаксацией напряжений в СР, однако, скорее всего, мы имеем дело с начальной стадией релаксации на нижней гетерогранице. Что касается возможности релаксации между отдельными слоями СР, то формально она может быть учтена с помощью вариации деформационных параметров f_1 и f_2 ; при этом должны измениться их разность (величина B) и, следовательно, соотношение высот сателлитов. В нашем случае свидетельством отсутствия такой релаксации являлась совместимость параметров, полученных для разных рефлексов. Однако наиболее убедительным доказательством является идентичность кривых асимметричного брэгговского отражения 422 для случаев $\gamma_0 < |\gamma_H|$ и $\gamma_0 > |\gamma_H|$. Как показывает анализ, она должна нарушиться, если $\Delta\varepsilon_{xx} \neq 0$. Из рис. 2, с и 3, с видно, что как для короткопериодного образца № 117, так и для СР с большим периодом

(№ 126) совмещенные по угловой шкале сателлиты хорошо совпадают по высоте. На кривых, снятых при $\gamma_0 > |\gamma_H|$, сателлиты разрешаются хуже, поскольку при одинаковом уширении (обусловленном структурными дефектами) занимают меньший диапазон углов.

Одновременное использование разных геометрий дифракции позволяет сделать оценку структурных параметров СР более определенной. Основное значение здесь имеют два обстоятельства. Во-первых, Лауэ-геометрия дает возможность значительно уменьшить или вообще свести к нулю влияние деформации и получить таким образом только распределение эффективной рассеивающей способности. При этом в отличие от рассеяния при малых углах (дающих ту же информацию) она включает в себя статический фактор Дебая–Валлера, т. е. сведения о структурном совершенстве слоев. Во-вторых, наличие асимметричных отражений с разной чувствительностью к релаксации позволяет обнаружить наличие последней и ее влияние на дифракционную картину.

Таким образом, в настоящей работе рассмотрены особенности дифракции от СР со слоями, имеющими несоответствие разного знака по отношению к подложке и обладающими существенно различными дифракционными способностями в симметричных и асимметричных геометриях отражения и прохождения. Экспериментально измерены дифракционные кривые с использованием разных геометрий от набора образцов с СР CaF₂/CdF₂ на Si, имеющих разный период. Проведено моделирование кривых отражения, и из сравнения с экспериментальными кривыми определены параметры СР: период, деформации, рассеивающие способности и толщины отдельных слоев. Показано отсутствие релаксации между отдельными слоями в исследованных образцах. Показана хорошая периодичность исследованных СР. По форме и полуширине дифракционных максимумов оценено структурное совершенство слоев СР, показано наличие как достаточно совершенных (СР с малым периодом), так и более дефектных образцов, дающих уширение в направлении, перпендикулярном вектору дифракции, сателлиты. Показана применимость модели идеальной СР для получения структурных параметров СР, имеющих структурные дефекты и дающих уширенные сателлиты на дифракционных кривых.

Работа поддержана грантами Российского фонда фундаментальных исследований, а также Министерства науки России.

Список литературы

- [1] V.S. Speriosu, T. Vreeland. *J. Appl. Phys.* **56**, 1591 (1984).
- [2] J. Kervarez, M. Baudet, J. Gaulet, P. Auvrey. *J. Appl. Cryst.* **17**, 196 (1984).
- [3] A.T. Macrander, G.P. Schwartz, G.J. Gualtieri. *J. Appl. Phys.* **64**, 6733 (1988).
- [4] T. Baumbach, H.-G. Bruhl, U. Pitsch, H. Terauchi. *Phys. Stat. Sol. (a)*, **105**, 197 (1988).
- [5] H. Terauchi, S. Sekimoto, K. Kamigaki, H. Sakashita, N. Sano, H. Kato, M. Nakayama. *J. Phys. Soc. Jap.* **54**, 4776 (1983).
- [6] U. Pietch, H. Metzger, S. Rugel, B. Jenichen, J.K. Robinson. *J. Appl. Phys.* **74**, 2381 (1993).
- [7] K. Nakashima. *J. Appl. Phys.* **71**, 1189 (1992).
- [8] R.N. Kyutt, A.Yu. Khilko, N.S. Sokolov. *Appl. Phys. Lett.* **76**, 1563 (1997).
- [9] S.V. Novikov, N.N. Faleev, A. Izumi, A.Yu. Khilko, N.S. Sokolov, S.A. Solov'ev, K. Tsutsui. *Abstracts of Int. Symp. Nanostructures: Physics and Technology, St.Petersburg, Russia (1995)*. P. 387–390.
- [10] R.N. Kyutt, P.V. Petrashen, L.M. Sorokin. *Phys. Stat. Sol. (a)* **60**, 381 (1980).
- [11] N.S. Sokolov, J.C. Alvarez, Yu.V. Shusterman, N.L. Yakovlev, R.M. Overney, Y. Itoh, I. Takahashi, J. Harada. *Appl. Surf. Sci.* **104/105**, 402 (1995).
- [12] A.Yu. Khilko, R.N. Kyutt, N.S. Sokolov, M.V. Zamoryanskaya, L.J. Schowalter, Yu.V. Shusterman. *Inst. Phys. Conf. Ser.*, **155**. Ch. 12, 1021 (1997); Paper presented at 23rd Int. Symp. Compound Semiconductors. St.Petersburg, Russia (Sept. 1996).
- [13] P.F. Fewster. *Semicond. Sci. Technol.* **8**, 1915 (1993).
- [14] V.M. Kaganer, R. Koehler, M. Schmidt, R. Opitz, B. Jenichen. *Phys. Rev.* **B55**, 1793 (1997).