

Рентгеноспектральный микроанализ полупроводниковых эпитаксиальных гетероструктур на основе моделирования транспорта электронов методом Монте-Карло

© Т.Б. Попова, Л.А. Бакалейников, М.В. Заморянская, Е.Ю. Флегонтова[†]

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

(Получена 10 июля 2007 г. Принята к печати 19 октября 2007 г.)

Рассмотрены особенности рентгеноспектрального микроанализа полупроводниковых гетероструктур на основе твердых растворов $A^{III}B^V$ и $A^{II}B^{VI}$ с тонкими эпитаксиальными слоями. На основе моделирования транспорта электронов методом Монте-Карло рассмотрено влияние слоя и подложки на распределение генерации рентгена по глубине. Продемонстрировано хорошее согласие расчетных и экспериментальных значений отношения интенсивностей излучения из слоя и массивного образца для модельных структур $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ на подложке GaAs с разными толщинами слоя. Предложены методики, позволяющие проводить корректный микроанализ слоев с толщинами, большими 50 нм, а также одновременно определять состав и толщину эпитаксиальных слоев. Разработанные методики можно использовать при анализе тонких слоев и в других системах.

PACS: 79.60.Jv, 78.70.-g, 68.49.Jk, 78.70.En

1. Введение

Полупроводниковые эпитаксиальные гетероструктуры на основе твердых растворов $A^{III}B^V$ и $A^{II}B^{VI}$ находят широкое применение в оптоэлектронике. Контроль состава твердых растворов необходим на всех стадиях исследования и отработки технологии получения гетероструктур. Для этих целей традиционно используется рентгеноспектральный микроанализ. Его преимущества — высокая точность, локальность, отсутствие разрушения исследуемого образца, возможность одновременного изучения структур в режиме растрового электронного микроскопа и катодolumинесценции.

Методики количественного рентгеноспектрального микроанализа (КРСМА) достаточно хорошо разработаны [1]. Сложности возникают, когда толщина эпитаксиального слоя меньше глубины генерации и выхода рентгеновского излучения. В этом случае стандартные методики определения концентрации становятся некорректными. В данной работе методика анализа тонких слоев строится на основе расчетов прохождения электронов в веществе и генерации рентгеновского излучения методом Монте-Карло.

2. Моделирование методом Монте-Карло

Распределение плотности генерации рентгена по глубине рассчитывалось методом Монте-Карло. При этом использовалась модель однократного рассеяния, в которой результаты каждого акта взаимодействия электрона с веществом разыгрываются с помощью обратных дифференциальных свободных пробегов по упругим и

неупругим столкновениям. В реализованной нами программе результаты упругого рассеяния определяются с помощью дифференциального сечения Мотта. Результаты расчета обратных свободных пробегов для всех элементов с атомными номерами от 1 до 103 представлены в электронном архиве [2].

Дифференциальные обратные свободные пробеги по неупругим столкновениям могут быть найдены с использованием диэлектрического подхода [3], связывающего дважды дифференциальное сечение неупругого рассеяния с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon(q, \omega)$:

$$\frac{d^2\lambda_{in}^{-1}}{d(\hbar\omega)d(\hbar q)} = \frac{1}{\pi a_0 q E} \operatorname{Im} \left(-\frac{1}{\varepsilon(q, \omega)} \right).$$

Здесь $\hbar\omega$ и $\hbar q$ — изменения энергии и импульса электрона при неупругом рассеянии, $a_0 = \hbar^2/m_e^2$ — борровский радиус. Диэлектрическая проницаемость $\varepsilon(q, \omega)$ для произвольных значений (q, ω) определялась методом, предложенным Пенном в работе [4], согласно которому оптические данные $\varepsilon(0, \omega)$ экстраполируются на всю плоскость (q, ω) . Этот метод успешно используется многими авторами (см., например, [5–8]) и приводит к хорошему согласию результатов моделирования по методу Монте-Карло с данными экспериментов. На основе такого подхода нами были рассчитаны дифференциальные обратные свободные пробеги для ряда материалов. Результаты расчета представлены в электронном архиве [2]. Однако оптические данные $\varepsilon(0, \omega)$ не могут быть получены для всех материалов, в связи с чем необходимо развивать другие способы расчета дифференциальных сечений неупругого рассеяния.

При моделировании генерации рентгена, как правило, можно ограничиться рассмотрением электронов с энергиями порядка кэВ и более. Кроме того, распределение генерации по глубине является интегральной

[†] E-mail: fl.xiees@mail.ioffe.ru

характеристикой электронного потока. Поэтому можно предположить, что особенности неупругого рассеяния с малыми потерями энергии не оказывают существенного влияния на плотность генерации рентгена. Исходя из этого мы аппроксимируем обратные свободные пробеги по неупругим столкновениям аналитическим выражением, обеспечивающим при достаточно больших энергиях электронов выполнение соотношения Бете для средних потерь энергии на единице длины пути и правильное асимптотическое поведение (переход в пределе больших энергий в сечение свободно-свободного рассеяния на атомных электронах).

Оба метода расчета обратных свободных пробегов по неупругим столкновениям, описанные выше, были применены к моделированию плотности генерации рентгена для ряда элементов с атомными номерами в диапазоне от 13 (Al) до 32 (Ge). Сравнение результатов показало, что аналитическая аппроксимация может быть использована в расчетах плотности генерации рентгена, особенно при моделировании аналитических линий с энергиями порядка нескольких кэВ и выше.

Известно, что распределение характеристического излучения по глубине может быть найдено с помощью выражения

$$\varphi(z) = \frac{1}{\sigma_k(E_0)} \int_{E_k}^{E_0} \psi(E, z) \sigma_k(E) dE,$$

$$\psi(E, z) = \int \Psi(E, \mathbf{r}, \Omega) dx dy d\Omega.$$

Здесь $\sigma_k(E)$ — сечение ионизации k -й атомной оболочки электронным ударом, E_0 — энергия электронного пучка, E_k — энергия связи k -й атомной оболочки, $\Psi(E, \mathbf{r}, \Omega)$ — дифференциальная плотность потока. В ходе моделирования $\psi(E, z)$ оценивается длинами участков траекторий в элементарном фазовом объеме. Распределение плотности генерации рентгена по глубине нормировано на плотность генерации рентгена в тонком изолированном слое, определяемую соотношением $\psi(E_0, 0) \sigma_k(E_0) = \sigma_k(E_0)$. Сечения ионизации атомных оболочек рассчитывались по формуле Гризинского.

Кроме распределения плотности генерации рентгена по глубине имеет смысл рассмотреть величину

$$\varphi_a(z) = \varphi(z) \cdot \exp(-\mu z / \sin \gamma),$$

описывающую вклад в рентгеновское излучение фотонов, генерированных на глубине z , с учетом их поглощения в образце. Здесь γ — угол между направлением выходящих фотонов и поверхностью образца, μ — линейный коэффициент поглощения.

Расчеты проводились для ряда бинарных соединений $A^{III}B^V$ и $A^{II}B^{VI}$ и твердых растворов на их основе, с использованием различных аналитических линий. Энергия электронов варьировалась от 2.5 до 20 кэВ.

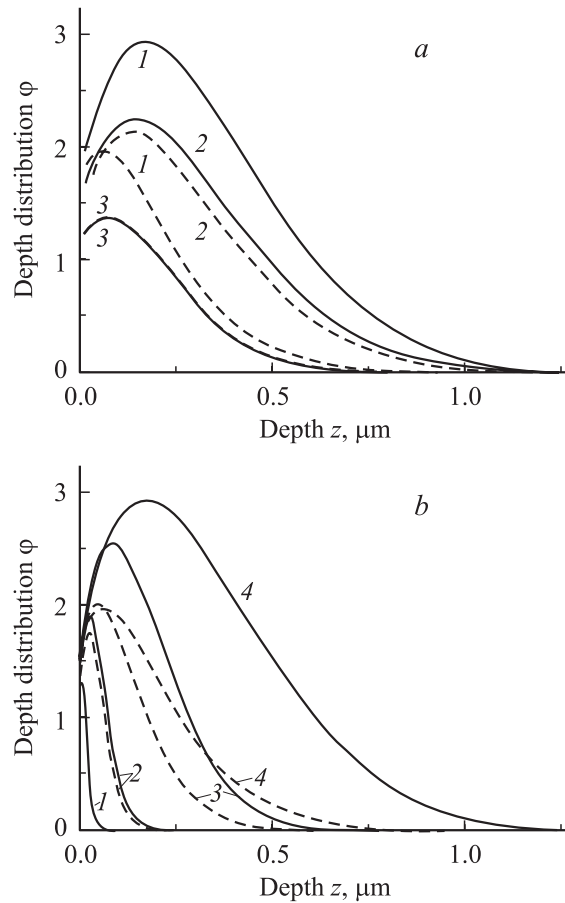


Рис. 1. Распределение плотности генерации рентгена по глубине в GaN, легированном Al и In, с учетом (пунктирная линия) и без учета (сплошная линия) поглощения в образце. *a* — для различных аналитических линий. $E_0 = 15$ кэВ; AlK_{α} (1), InL_{α} (2) и GaK_{α} (3). *b* — для различных энергий зонда. Аналитическая линия AlK_{α} ; $E_0 = 2.5$ (1), 5 (2), 10 (3) и 15 кэВ (4).

В качестве примера на рис. 1 приведены распределения генерации рентгена по глубине в GaN, легированном Al и In, с учетом ($\varphi_a(z)$) и без учета ($\varphi(z)$) поглощения в образце. Рис. 1, *a* демонстрирует поведение $\varphi(z)$ и $\varphi_a(z)$ для различных аналитических линий, при энергии пучка 15 кэВ. На рис. 1, *b* представлены $\varphi(z)$ и $\varphi_a(z)$ при различных энергиях электронного зонда для линии AlK_{α} .

Влияние подложки на транспорт электронов в слое и, следовательно, на генерацию рентгена иллюстрирует рис. 2, *a*, где приведены зависимости $\varphi_a(z)$ для генерации L -линии Cu в структурах Cu на Al и Cu на Au. В первом случае электроны рассеиваются в подложке слабее, чем в слое, поэтому число электронов, обратно рассеянных из подложки и вносящих вклад в генерацию рентгена в слое, меньше, чем число рассеянных из глубины образца электронов в приповерхностном слое массивного образца Cu. Плотность генерации рентгена уменьшается по сравнению с массивным образцом. В структуре Cu—Au рассеяние в Au сильнее, чем в Cu,

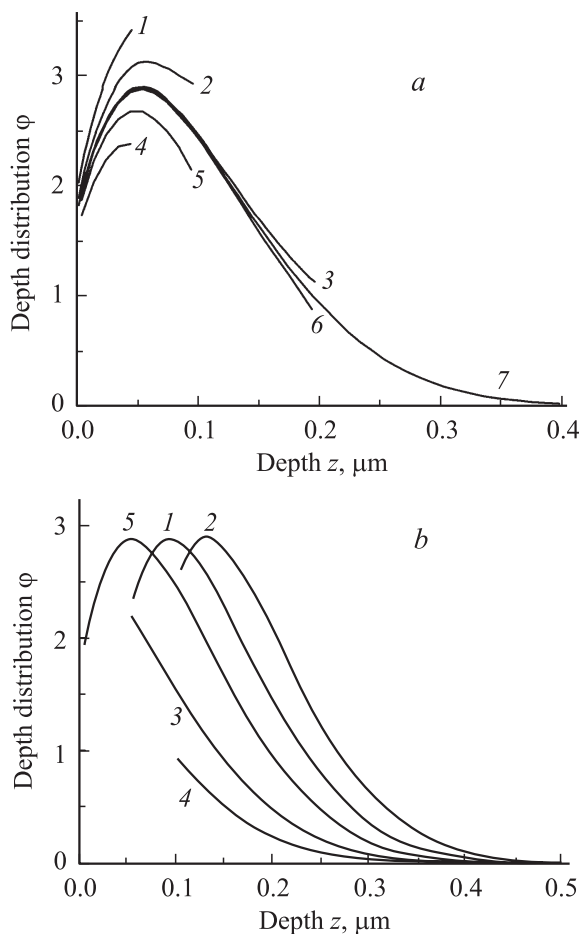


Рис. 2. *a* — влияние подложки на генерацию рентгена в слое. Структуры Cu–Au (1–3) и Cu–Al (4–6), генерируется L -линия Cu, толщина слоя 0.05 (1, 4), 0.1 (2, 5), 0.2 мкм (3, 6) и массивный образец (7). *b* — влияние слоя на генерацию рентгена в подложке. Структуры Al–Cu (1, 2) Au–Cu (3, 4), генерируется L -линия Cu, толщина слоя 0.05 (1, 3), 0.1 мкм (2, 4) и массивный образец (5). $E_0 = 10$ кэВ.

и генерация в слое увеличивается. Влияние подложки делается пренебрежимо малым при толщине слоя более 0.5–0.7 от глубины области генерации.

В свою очередь присутствие слоя влияет на генерацию рентгена в подложке. Распределение плотности генерации рентгена сдвигается влево или направо, в зависимости от того, больше или меньше средний атомный номер слоя, чем подложки, и, следовательно, увеличивается или уменьшается потеря энергии зонда в слое по сравнению с той же областью однородного образца. Этот эффект показан на рис. 2, *b* на примере структур Al–Cu и Au–Cu.

В гетероструктурах средние атомные номера слоя и подложки часто близки, что позволяет использовать при анализе слоев распределения, полученные для массивных образцов. Однако описанные далее методики микроанализа тонких слоев применимы и в том случае, когда взаимным влиянием слоя и подложки нельзя пренебречь. В этом случае необходимо использовать

результаты моделирования плотности генерации рентгена, полученные для конкретных структур с различными значениями толщины слоя.

Отношение интенсивностей рентгеновской эмиссии из слоя и из массивного образца

$$\Phi(d) = \int_0^d \varphi_a^{(l)}(z) dz / \int_0^\infty \varphi_a(z) dz \quad (1)$$

используется в методиках микроанализа тонких слоев, описанных далее. Здесь $\varphi_a^{(l)}(z)$ для слоя, вообще говоря, отличается от $\varphi_a(z)$ для массивного образца из-за влияния подложки. Однако во всех примерах микроанализа, рассмотренных далее, различие атомных номеров подложки и слоя невелико, в связи с чем влиянием подложки на генерацию рентгена в слое можно пренебречь, и $\varphi_a^{(l)}(z) = \varphi_a(z)$. Это иллюстрирует рис. 3, *a*, где показаны поправочные коэффициенты $\Phi(d)$ в случае эмиссии GaL_α -линии из GaN (средний атомный номер $Z = 19$) на подложке Al_2O_3 ($Z = 10$) для различных энергий электронного пучка. Расчеты проводились с уче-

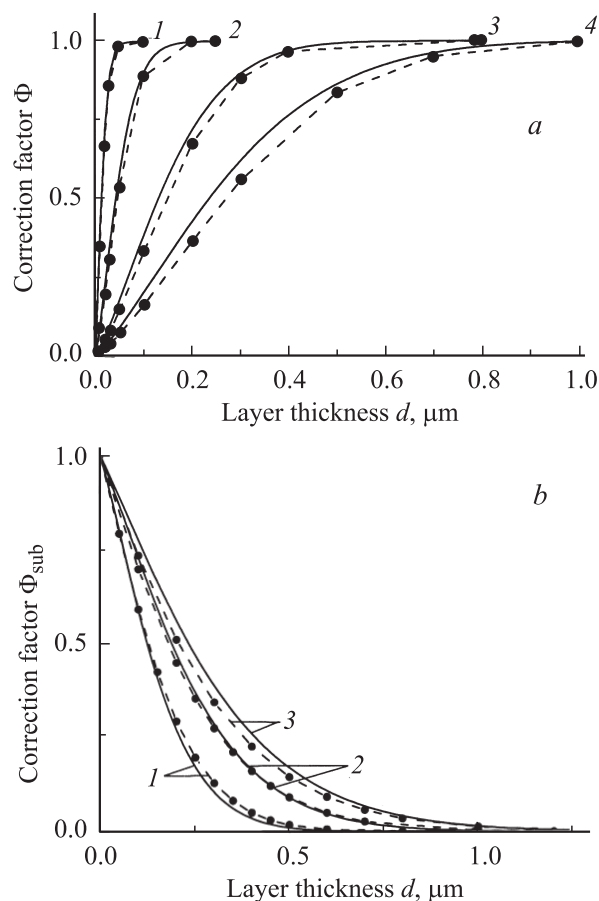


Рис. 3. Поправочные коэффициенты с учетом (пунктирная линия) и без учета (сплошная линия) взаимовлияния слоя и подложки. *a* — $\Phi(d)$ в случае генерации GaL_α в слое GaN на подложке Al_2O_3 , $E_0 = 2.5$ (1), 5 (2), 10 (3) и 15 кэВ (4). *b* — $\Phi_{sub}(d)$ в случае генерации AsL_α в $AlGaInP$ –GaAs. $E_0 = 10$ (1), 15 (2) и 20 кэВ (3).

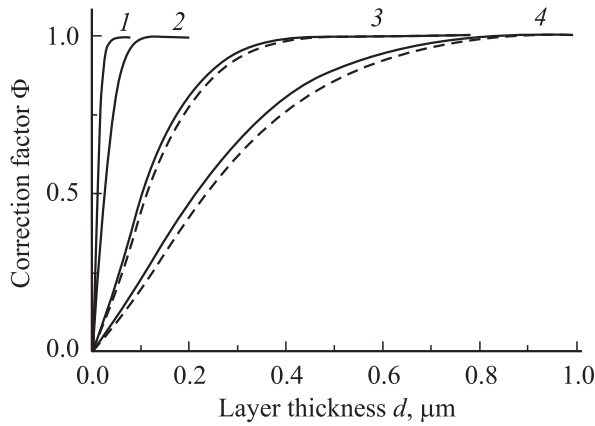


Рис. 4. Сравнение $\Phi(d)$ для GaN (пунктирная линия) и InN, (сплошная линия), аналитическая линия InL_α . E_0 , кэВ: 1 — 4, 2 — 5, 3 — 10, 4 — 15.

том и без учета влияния подложки на выход рентгена из слоя. Видно, что даже в случае сравнительно большого контраста атомных номеров влияние подложки на $\Phi(d)$ незначительно.

Поправочный коэффициент $\Phi_{\text{sub}}(d)$ определяется как отношение интенсивностей эмиссии из подложки и из массивного образца того же состава:

$$\Phi_{\text{sub}}(d) = \exp(-\mu_{\text{lay}}d / \sin \gamma) \times \int_d^\infty \varphi^{(s)}(z) \exp(-\mu_{\text{sub}}(z-d) / \sin \gamma) dz \Big/ \int_0^\infty \varphi_a(z) dz. \quad (2)$$

Здесь μ_{lay} и μ_{sub} — линейные коэффициенты поглощения соответственно в слое и в подложке. Как и в предыдущем случае, $\varphi^{(s)}(z)$ в подложке отличается от $\varphi(z)$ для массивного образца, но в практических расчетах для гетероструктур с не слишком большим контрастом атомных номеров этим отличием можно пренебречь. Этот факт отчетливо виден на зависимостях $\Phi_{\text{sub}}(d)$ для эмиссии AsL_α из AlGaInP-GaAs с учетом и без учета влияния слоя на генерацию в подложке, представленных на рис. 3, б.

С увеличением энергии зонда для построения $\Phi_{\text{sub}}(d)$ необходимо рассматривать слои с толщинами, при которых сдвиг $\varphi^{(s)}(z)$ в структуре AlGaInP-GaAs по отношению к $\varphi(z)$ для массивного GaAs становится заметным. Однако из-за поглощения рентгена в образце генерация на больших глубинах дает малый вклад в эмиссию, поэтому $\varphi_a(z)$ меняется слабо, и зависимости $\Phi_{\text{sub}}(d)$ остаются близкими и для значительных энергий зонда.

При анализе твердых растворов поправочные коэффициенты могут быть найдены интерполяцией результатов моделирования для бинарных соединений. Во многих случаях средний атомный номер слабо зависит от состава, поэтому распределение генерации рентгена по глубине, полученное для бинарного соединения или

твердого раствора с определенным составом, может быть использовано в некотором диапазоне атомных концентраций. На рис. 4 показаны результаты расчета для GaN (средний атомный номер $Z = 19$) и InN ($Z = 28$). Можно видеть, что полученные зависимости $\Phi(d)$ отличаются незначительно.

3. Методики микроанализа тонких слоев

Для проверки применимости результатов моделирования к микроанализу эпитаксиальных слоев были проведены расчеты и измерения на модельных образцах. Рентгеноспектральный анализ проводился на микроанализаторе „Сamebax“ фирмы Сameca (Франция), оборудованном четырьмя рентгеновскими спектрометрами.

Эпитаксиальные слои заданного состава $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ с толщинами 0.1, 0.2, 0.3, 0.5 мкм были выращены на подложке GaAs. Состав дополнительно контролировался по данным фотolumинесценции, а толщина — по данным растровой электронной микроскопии. Сравнились величины потери интенсивности $\Phi(d)$ в тонких слоях для разных значений энергии электронного зонда. На рис. 5 представлены результаты сравнения отношений $\Phi(d)$, рассчитанных по формуле (1), с экспериментально измеренными отношениями $\Phi_{\text{exp}}(d) = K_{\text{layer}}^{\text{Al}}(d) / K_{\text{bulk}}^{\text{Al}}$. Здесь $K_{\text{layer}}^{\text{Al}}(d)$ — интенсивность излучения из слоя толщины d , $K_{\text{bulk}}^{\text{Al}}$ — из массивного образца.

Различия в рассчитанных и измеренных значениях не превышают ошибку измерения. Таким образом, данные, полученные при расчетах методом Монте-Карло, можно использовать при разработке методик количественного анализа тонких эпитаксиальных слоев.

Разработка методик шла в трех направлениях.

3.1. Выбор значений энергии электронного зонда, для которых возбуждаемая электронами область находится

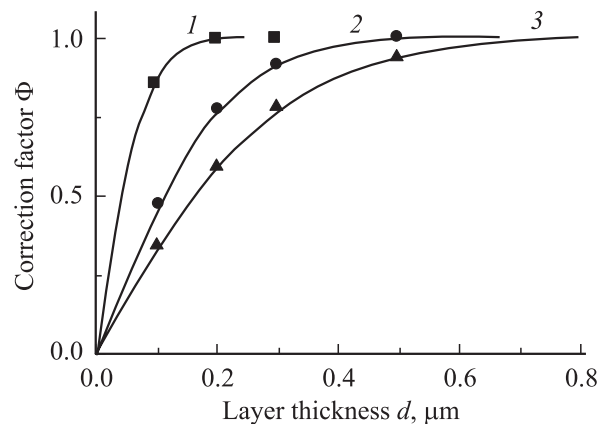


Рис. 5. Сравнение рассчитанных и экспериментально измеренных $\Phi(d)$. Структура $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ с толщинами слоев 0.1, 0.2, 0.3, 0.5 мкм. Аналитическая линия AlK_α $E_0 = 5$ (1), 10 (2) и 15 кэВ (3). Символами обозначены экспериментально измеренные значения $\Phi(d)$.

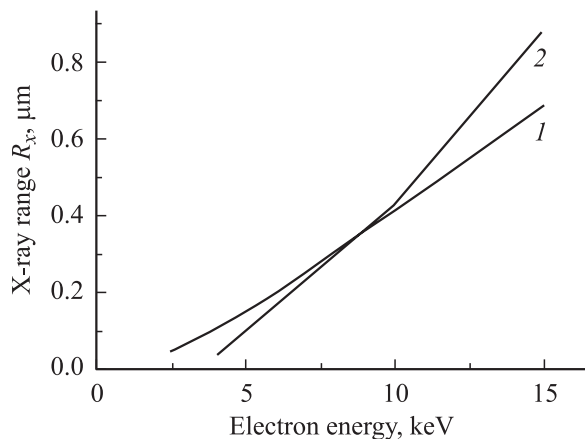


Рис. 6. Зависимость R_x от энергии для GaN, легированного Al и In, аналитические линии AlK_α (1) и InL_α (2).

внутри слоя, и при количественном анализе образец можно считать массивным.

Расчеты распределения рентгеновского излучения по глубине позволяют определить максимальную глубину выхода рентгеновского излучения с учетом его поглощения при выходе из мишени. Величина R_x — глубина области, из которой выходит 99% интенсивности рентгеновского излучения — является важнейшей характеристикой количественного микроанализа, часто ее называют продольной локальностью микроанализа. На рис. 6 представлена зависимость R_x от энергии электронов для аналитических линий AlK_α и InL_α в твердых растворах InGaN и AlGaN с малыми концентрациями In и Al (не влияющими на транспорт электронов). Глубина R_x растет с увеличением энергии электронов для обеих линий, но для линии алюминия менее резко, так как увеличение глубины проникновения электронов компенсируется более сильным поглощением излучения при выходе из образца. При больших значениях энергии для сильно поглощающихся линий зависимость R_x от энергии выходит на насыщение. При приближении энергии электронов к энергии возбуждения аналитической линии глубина генерации резко падает. При разности энергии зонда и энергии возбуждения аналитической линии менее 1 кэВ (при энергии 2.5 кэВ в случае AlK_α и 4 кэВ в случае InL_α) R_x уменьшается до 50 нм, и, значит, при таких энергиях можно анализировать слои с толщинами, большими 50 нм, как массивные.

Однако анализ при таких условиях сопряжен с рядом сложностей. Уменьшение энергии электронов приводит к резкому уменьшению интенсивности рентгеновского излучения и увеличению статистической ошибки. Скомпенсировать этот эффект можно увеличением тока зонда до 20–25 нА и времени счета до 100 сек. Уменьшение контрастности линии приводит к увеличению предела обнаружения, например, для индия до 0.5 масс%. Это делает невозможным анализ твердых растворов с малыми содержаниями In. На результаты анализа при низких энергиях электронного зонда сильно влия-

ет состояние поверхности анализируемых и эталонных образцов. Нельзя анализировать при низких энергиях неэлектропроводные образцы, так как на их поверхность предварительно напыляется углеродная пленка. Окисная пленка на металлических эталонах, не влияющая на результаты анализа при энергии 10 кэВ, существенно влияет на анализ при 5 и особенно при 4 и 2.5 кэВ. Поэтому в качестве эталонов мы использовали полированные кристаллы бинарных соединений $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ и $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$, а также специально подготовленные эпитаксиальные слои твердых растворов известного и постоянного состава, на которых были получены хорошие результаты при любых энергиях. Методика микроанализа при низких энергиях позволила проанализировать эпитаксиальные слои InGaN и AlGaN с толщиной 50–100 нм, выращенные различными методами на подложках GaN и Al_2O_3 .

3.2. Вторая методика разрабатывалась применительно к микроанализу тонких слоев при оптимальных энергиях электронов 10–15 кэВ. В этом случае область генерации распространяется также и на подложку, и необходимо вводить поправки на потерю интенсивности рентгеновского излучения, генерируемого в тонком слое. Интенсивности аналитических линий могут быть найдены с помощью введенных выше поправочных коэффициентов (1): $K_{\text{bulk}}^{\text{A}} = K_{\text{layer}}^{\text{A}} / \Phi(d)$ (для линии, излучаемой химическим элементом А). После этого состав определяется по стандартной методике, используемой в случае массивных образцов (ZAF- или PAP-коррекция). Обязательным условием является отсутствие анализируемых элементов в подложке.

Толщина слоя d должна быть известна. В некоторых случаях она может быть определена из отношения $K_{\text{sub}}^{\text{B}} / K_{\text{bulk}}^{\text{B}}$ с помощью поправочных коэффициентов (2). В этом случае анализируется линия, излучаемая элементом В, присутствующим только в подложке (состав которой должен быть известен) и отсутствующим в слое.

Описанная процедура была использована для микроанализа гетероструктур AlGaInP–GaAs и MgZnSSe–GaAs. Найденные концентрации и толщины слоев хорошо согласуются с данными фотолюминесценции и растровой электронной микроскопии. Ошибка составляет не более 15%.

3.3. Для одновременного определения состава и толщины слоев в точке анализа была разработана методика вариации энергии электронного зонда. Применение этой методики особенно полезно при изучении новых систем твердых растворов, когда технология выращивания не отработана, слои имеют низкое качество, переменный состав и толщину.

Далее рассмотрен пример одновременного анализа слоя по толщине и составу в эпитаксиальной структуре AlGaAs на подложке GaAs. Это квазибинарный твердый раствор, поэтому достаточно определить концентрацию одного элемента. Введем обозначения $K_{\text{exp}5}$, $K_{\text{exp}10}$, $K_{\text{exp}15}$ для интенсивностей аналитической линии AlK_α , измеренных при энергии пучка 5, 10, 15 кэВ соответственно. Прежде всего необходимо найти поправочные

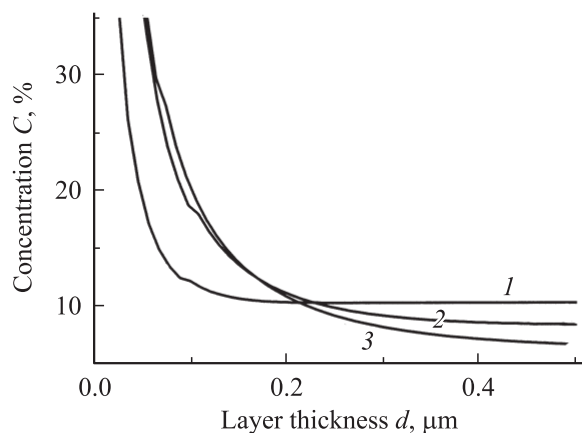


Рис. 7. Концентрация Al как функция толщины слоя в гетероструктуре $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}-\text{GaAs}$, рассчитанная для экспериментально измеренных значений $K_{\text{exp}5} = 0.041$ при $E_0 = 5$ кэВ (1); $K_{\text{exp}10} = 0.021$ при $E_0 = 10$ кэВ (2); $K_{\text{exp}15} = 0.016$ при $E_0 = 15$ кэВ (3). Аналитическая линия $\text{Al}K_{\alpha}$.

коэффициенты $\Phi(d)$ в зависимости от толщины слоя для каждой энергии пучка. Для этого были использованы результаты моделирования методом Монте-Карло. Затем с помощью процедуры, описанной в предыдущем разделе, можно найти концентрации алюминия $C(d; E_0)$ в зависимости от толщины слоя для каждой энергии пучка. Полученные таким образом кривые $C(d; 5)$, $C(d; 10)$, $C(d; 15)$ приведены на рис. 7. Подлинная концентрация и толщина слоя определяются точкой их пересечения. Чтобы повысить точность метода, имеет смысл выбирать наименьшую из энергий пучка достаточно малой, чтобы глубина области генерации рентгена не превышала толщины слоя. Наибольшая энергия пучка должна быть выбрана таким образом, чтобы глубина области генерации была много больше толщины слоя. В этом случае углы наклона кривых $C(d; E_0)$ заметно отличаются в точке пересечения, что облегчает определение концентрации и толщины. Результаты анализа для модельных структур $\text{AlGaAs}-\text{GaAs}$ приведены в таблице. Точность определения состава близка к точности, достигаемой в случае массивных образцов, а толщина слоев определяется с точностью 10–20%.

Одновременное определение концентрации и состава для модельных структур $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}-\text{GaAs}$ с различной толщиной слоя

Концентрация, %	Толщина слоя, мкм	
	подлинная	найденная
9.51	0.1	0.12
10.3	0.2	0.23
10.3	0.3	0.34
10.6	0.5	0.49

4. Заключение

Метод Монте-Карло был применен для получения распределения генерации рентгена по глубине в эпитаксиальных структурах с тонкими слоями. На этой основе были разработаны методики рентгеноспектрального микроанализа, корректные для эпитаксиальных полупроводниковых гетероструктур с толщинами слоев, большими 50 нм. Описанные методики могут применяться при отработке технологии получения полупроводниковых гетероструктур с заданным составом. Они могут быть также применены к микроанализу других систем с тонкими слоями.

Список литературы

- [1] J.I. Goldstein, D.E. Newberry, P. Echlin, D.C. Joy, C.E. Lyman, E. Lifshin, L. Sawyer, J.R. Michael. *Scanning Electron Microscopy and X-ray microanalysis* (N.Y.–Dordrecht–London–Moscow, Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2003).
- [2] Электронный архив <http://www.ioffe.rssi.ru/ES/>.
- [3] Д. Пайнс. *Элементарные возбуждения в твердых телах* (М., Мир, 1965).
- [4] D.R. Penn. *Phys. Rev. B*, **35**, 482 (1987).
- [5] R. Shimizu, Z.J. Ding. *Rep. Progn. Phys.*, **55**, 487 (1992).
- [6] C.J. Powell, A. Jablonski. *J. Vac. Sci. Technol. A*, **17**, 1122 (1999).
- [7] W.S.M. Werner, C. Tomastik, T. Cabela, G. Richter, H. Störi. *Surf. Sci. Lett.*, **470**, L123 (2000).
- [8] Z.J. Ding, H.M. Li, K. Goto, J.Z. Jiang, R. Shimizu. *J. Appl. Phys.*, **96**, 4598 (2004).

Редактор Л.В. Беляков

X-ray microanalysis of semiconductor epitaxial heterostructures based on the Monte Carlo simulation of electron transport

T.B. Popova, L.A. Bakaleinikov, M.V. Zamoryanskaya, E.Yu. Flegontova

loffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract The X-ray microanalysis of $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ and $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$ semiconductor solid solutions heterostructures with thin epitaxial layers is considered. Monte Carlo simulation of electron transport is used to estimate the influence of the layer and substrate on the X-ray generation depth distribution. A good accordance of calculated and experimental ratios of X-ray emission intensities from the layer and bulk sample is shown for the model structures $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ on the GaAs substrate with various layer thicknesses. The developed procedures allow to carry out the adequate microanalysis of epitaxial layers with thicknesses more than 50 nm. These procedures can be also used for other systems with thin layers.