

BADANIE NIEIDEALNEJ STRUKTURY SUPERSIECI (In)GaAs/GaAs(P) ZA POMOCĄ RENTGENOWSKIEJ ANALIZY DYFRAKCYJNEJ

Marek Wójcik, Jarosław Gaca

Przedstawiono wyniki rentgenowskiej analizy strukturalnej dla supersieci (In)GaAs/GaAs(P) odłożonej na zdeorientowanym podłożu GaAs (001) za pomocą technologii MOCVD. Badania dyfrakcyjne wykonano stosując dwuwymiarowe skanowanie sieci odwrotnej kryształu. Otrzymane wyniki wskazują, że refleksy satelitarne leżące wzdłuż linii tworzącej mały kąt z kierunkiem [001], są dodatkowo poszerzone. To poszerzenie jest spowodowane niezerowym gradientem koncentracji fosforu - dp/dy - powodującym podział objętości kryształu na obszary koherentnego rozpraszania.

MODEL IDEALNEGO MODULOWANEGO MONOKRYSTAŁU (In)GaAs/GaAs(P)

W kryształach GaAs atomy galu i arsenu obsadzają płaszczyzny prostopadłe do kierunku [001]. Płaszczyzny obsadzone atomami galu są oznaczone symbolem α , atomami arsenu - β . W kryształach (In)GaAs/GaAs(P) płaszczyzny te zawierają dodatkowo wprowadzone w położenia węzłowe [1-3] atomy indu i fosforu. W celu wyznaczenia odległości pomiędzy płaszczyznami prostopadłymi do kierunku wzrostu kryształu, zakłada się, że zależą one tylko od lokalnych koncentracji atomów domieszki [4] :

$$d_{2l+1} = d[P_{\alpha}(2l+1), P_{\beta}(2l+2)] \quad (1a)$$

$$d_{2l+2} = d[P_{\alpha}(2l+3), P_{\beta}(2l+2)] , 0 \leq l \leq m+n-1 \quad (1b)$$

gdzie $2m+1$ jest liczbą płaszczyzn sieciowych zawartych w jednej długości fali modulacji, d_{2l+1} i d_{2l+2} są odległościami pomiędzy płaszczyznami typu α i β , $P_{\alpha}(k)$ oraz $P_{\beta}(k)$ są prawdopodobieństwami znalezienia atomu indu lub fosforu na płaszczyźnie k .

Gęstość elektronową kryształu z periodyczną falą koncentracji można opisać funkcją $\rho(r)$ [5], posiadającą własność:

$$\rho(\bar{r} + 1(\Lambda^2 / 2\pi) \bar{k}_{\Lambda}) = \rho(\bar{r}) \quad (2)$$

gdzie: l jest liczbą całkowitą, Λ długością fali koncentracji, \bar{k}_Λ wektorem falowym fali koncentracji.

Zakładając, że kryształ modulowany ma kształt prostopadłościanu, a jego główne osie krystalograficzne pokrywają się z osiami prostokątnego układu współrzędnych $X=[100]$, $Y=[010]$, $Z=[001]$ oraz rozkłady domieszek :

$$P_\alpha(k) = \begin{cases} i & \text{dla } 0 < k \leq n \\ 0 & \text{dla } n < k \leq n + m \end{cases} \quad \text{dla indu} \quad (3a)$$

$$P_\beta(k) = \begin{cases} 0 & \text{dla } 0 < k \leq n \\ p & \text{dla } n < k \leq n + m \end{cases} \quad \text{dla fosforu} \quad (3b)$$

definiuje się dwie prostokątne fale koncentracji, których wektory falowe są równoległe do osi Z , a długość fali modulacji [6] wynosi:

$$\Lambda = (m-1) d_{zA} + d_z + (n-1) d_{zB}, \quad (4)$$

gdzie: m - liczba płaszczyzn sieciowych w warstwie z fosforem,
 n - liczba płaszczyzn sieciowych w warstwie z indem,
 d_{zA} - odległość między płaszczyznami w warstwie z fosforem,
 d_{zB} - odległość między płaszczyznami w warstwie z indem,
 d_z - odległość między ostatnią płaszczyzną zawierającą fosfor i pierwszą płaszczyzną zawierającą ind.

Z definicji kryształu modulowanego wynika, że można wybrać pewien jego fragment, a następnie dokonując odpowiednich translacji otrzymać cały kryształ. Ten fragment kryształu nazywany elementarną warstwą podwójną ma kształt prostopadłościanu o wymiarach: $Dx = (M+1)d_{xA} = Md_{xB}$, $Dy = (N+1)d_{yA} = Nd_{yB}$, $Dz = \Lambda$, gdzie M i N są liczbami naturalnymi, d_{xA} i d_{yA} są odległościami pomiędzy płaszczyznami w kierunku osi X i Y w warstwie z fosforem, d_{xB} i d_{yB} - w warstwie z indem.

W celu odtworzenia struktury kryształu na podstawie elementarnej warstwy podwójnej należy uwzględnić niekoherencję międzywarstwową objawiającą się zmianą stałej sieciowej w kierunku prostopadłym do kierunku wzrostu i podział kryształu na kolumny będący rezultatem tarasowej struktury podłoża. Prowadzi to do kolumnowego modelu kryształu złożonego z:

1. Kolumn otrzymanych przez translację elementarnej warstwy podwójnej o wektor $(0, kD_y, l\Lambda)$, $0 < k < K+1$, $0 < l < L+1$.
2. Domen otrzymanych przez translację kolumny o wektor którego składowe są równe szerokości i wysokości tarasu.

GEOMETRIA DYFRAKCJI

Geometria supersieci, w których cienka warstwa kryształu modulowanego jest osadzona na monokrystalicznym podłożu powoduje, że dostępną powierzchnią kryształu jest płaszczyzna $\{001\}$. Amplituda rozpraszania promieni rentgenowskich jest transformatą Fouriera gęstości elektronowej [7]

$$F(\bar{r}^*) = \iiint \rho(\bar{r}) \exp[2\pi i(\bar{r}^* \bar{r})] dV, \quad (5)$$

gdzie: $\bar{r} = (x, y, z)$ jest wektorem sieci rzeczywistej,
 $\bar{r}^* = (x^*, y^*, z^*)$ jest wektorem sieci odwrotnej.

Całkowanie wykonywane jest po objętości elementarnej warstwy podwójnej, a amplitudę rozpraszania kryształu otrzymuje się przez wykorzystanie symetrii translacyjnej. Wstawiając jawną postać wyrażen do (5) i stosując poniższą tożsamość:

$$\sum_{k=0}^n \exp(2\pi i(2kz^*)) = \exp(2\pi indz^*) \frac{\sin(2\pi(n+1)dz^*)}{\sin(2\pi dz^*)} = \exp(2\pi indz^*) R(n, d, z^*) \quad (6)$$

otrzymuje się ostateczną postać wyrażenia na amplitudę rozpraszania dla elementarnej warstwy podwójnej:

$$\begin{aligned} F_o(y^*, z^*) = & \exp(2\pi i(nd_{zA} z^* + (N+1)d_{oAy}^*)) \{f_{A1} + f_{A2} \exp(2\pi i(nd_{zA} z^* + d_{oAy}^*))\} \\ & R(n, d_{zA}, z^*) R(N+1, d_{oAy}^*) + \\ & \exp(2\pi i(nd_{zB} z^* + Nd_{oBy}^*)) \{f_{B1} \exp(2\pi i((2n-1)d_{zA} + d_z)z^*) + \\ & f_{B2} \exp(2\pi i(((2n-1)d_{zA} + d_z + d_{zB})z^* + d_{oBy}^*))\} R(m, d_{zB}, z^*) R(N, d_{oBy}^*). \quad (7) \end{aligned}$$

Amplituda rozpraszania elementarnej warstwy podwójnej składa się z dwóch części. Pierwszą z nich można interpretować jako pochodzącą od warstwy z domieszką fosforu, drugą od warstwy z domieszką indu. Wyrażenia w nawiasach klamrowych są uogólnionymi czynnikami strukturalnymi wymienionych warstw w obrębie elementarnej warstwy podwójnej.

Aby obliczenia uczynić przejrzystymi definiuje się kolumnę elementarną jako ten fragment kolumny, którego szerokość wynosi D_y . Amplituda rozpraszania dla kolumny elementarnej wyraża się następująco:

$$\begin{aligned} F_{KE}(y^*, z^*) = & \sum_{l=0}^L F_o(y^*, z^*) \exp(2\pi i(l\Lambda z^*)) = F_o(y^*, z^*) \sum_{l=0}^L \exp(2\pi i(l\Lambda z^*)) = \\ & F_o(y^*, z^*) \exp(\pi i L \Lambda z^*) \frac{\sin(\pi(L+1)\Lambda z^*)}{\sin(\pi \Lambda z^*)} = F_o(y^*, z^*) \exp(\pi i L \Lambda z^*) R(L, \Lambda, z^*). \quad (8) \end{aligned}$$

Wyrażenie $F_0(y^*, z^*)$ można interpretować jako czynnik struktury kolumny elementarnej. $R(L, \Lambda, z^*)$ jest funkcją Lauego, która jest odpowiedzialna za położenia środków ciężkości refleksów satelitarnych.

Biorąc pod uwagę, że $z^* = 2\sin\theta/\Lambda$ gdy $y^*=0$, gdzie λ jest długością fali promieniowania rentgenowskiego oraz fakt, że maksima funkcji Lauego występują wtedy gdy jej argument przyjmuje wartość „0” otrzymujemy:

$$2\Lambda\sin\theta = l\lambda \quad l - \text{liczba naturalna.}$$

Równanie to jest prawem Bragga obowiązującym dla tych płaszczyzn, które są sobie równoważne w translacji o wektor $[0, 0, \Lambda]$. Pewne refleksy satelitarne pojawiają się na skali "θ" w miejscach dla których spełnione jest również prawo Bragga dla średniej odległości międzypłaszczyznowej w kierunku osi Z. Takie refleksy nazywane są refleksami węzłowymi.

Kolumną jest układ K kolumn elementarnych ustawionych obok siebie wzdłuż osi Y. Amplituda rozpraszania dla kolumny wyraża się następująco:

$$\begin{aligned} F_K(y^*, z^*) &= \sum_{k=0}^K F_{KE}(y^*, z^*) \exp(2\pi i(k\Omega y^*)) = \\ &= F_{KE}(y^*, z^*) \sum_{k=0}^K \exp(2\pi i(k\Omega y^*)) = F_{KE}(y^*, z^*) \exp(\pi i\Omega K y^*) \frac{\sin(\pi(K+1)\Omega y^*)}{\sin(\pi\Omega y^*)} = \\ &= F_0(y^*, z^*) \exp(\pi i(K\Omega y^* + L\Lambda z^*)) R(K, \Omega, y^*) R(L, \Lambda, z^*) \end{aligned} \quad (9)$$

W amplitudzie rozpraszania pochodzącej od kolumny pojawił się czynnik rzeczywisty - $R(K, \Omega, y^*)$, który ma identyczną własność jak $R(L, \Lambda, z^*)$ z tą jednak różnicą, że wyznacza on położenia dodatkowych refleksów związanych z periodyką kryształu wzdłuż osi Y. Jeżeli rozpatrywać proste w przestrzeni odwrotnej o równaniach $X^*=0$ i $Z^*=l/\Lambda$ to środki ciężkości tych refleksów położone będą na zdefiniowanych prostych w miejscach w których:

$$2\Omega\sin\omega = k\lambda, \text{ gdzie } y^* = 2\sin\omega/\lambda.$$

Równanie to jest prawem Bragga obowiązującym dla tych płaszczyzn, które równoważne są sobie w translacji o wektor $(0, \Omega, 0)$. Jeżeli podłoże GaAs jest całkowicie płaskie to domena jest monokryształem modulowanym o wymiarach $D_x = KM\Omega$, $D_y = L\Lambda$.

Amplituda rozpraszania dla domeny, w tym przypadku, będzie wyrażona przez:

$$F_{FD}(y^*, z^*) = F_0(y^*, z^*) \exp(\pi i(MK\Omega y^* + L\Lambda z^*)) R(MK, \Omega, y^*) R(L, \Lambda, z^*) \quad (10)$$

Refleksy węzłowe mają środki ciężkości na przecięciu się prostych o równaniach $y^* = k/\langle dy \rangle$, $z^* = l/\langle dz \rangle$, k, l - naturalne.

Środki ciężkości refleksów satelitarnych leżą na przecięciu prostych danych równaniami: $y^* = k_1/\Omega$, $z^* = l_1/\Lambda$ gdzie k_1, l_1 - liczby naturalne. Szerokości połówkowe liczone równoległe do osi Y^* wynoszą $\sigma_y \cong 1/MK\Omega$, a liczone równoległe do osi Z^* wynoszą $\sigma_z \cong 1/L\Lambda$.

W praktyce podłoża na których otrzymywane są kryształy modulowane prawie zawsze posiadają zamierzoną lub niezamierzoną dezorientację. Wówczas przy założeniu istnienia tarasów których obie płaszczyzny są prostopadłe do płaszczyzny $X=0$ otrzymujemy domenę przez translację kolumny o wektor $\bar{\tau} = (0, \tau_y, \tau_z)$, gdzie τ_y jest szerokością stopnia [8], $\tau_y = KM\Omega$, a τ_z jest jego wysokością $\tau_z = l d_z$. Sumowanie przyczynków do amplitudy rozpraszania pochodzących od kolumn prowadzi do następującej amplitudy rozpraszania:

$$\begin{aligned} F_{SD}(y^*, z^*) &= \sum_{m=0}^M F_K(y^*, z^*) \exp(2\pi i m(\tau_y y^* + \tau_z z^*)) = \\ &= F_K(y^*, z^*) \exp(\pi i M(\tau_y y^* + \tau_z z^*)) \frac{\sin(\pi(M+1)(\tau_y y^* + \tau_z z^*))}{\sin(\pi(\tau_y y^* + \tau_z z^*))} = \\ &= F_o(y^*, z^*) \exp(\pi i((K\Omega + M\tau_y)y^* + (L\Lambda + M\tau_z)z^*)) \\ &R(MK, \Omega, y^*) R(M, \bar{\tau}, y^*, z^*) R(L, \Lambda, z^*) . \end{aligned} \quad (11)$$

W tym przypadku wektor falowy fali modulacji nie jest równoległy do osi Z. W związku z tym środki ciężkości refleksów satelitarnych będą leżały na prostych, których równania przyjmują postać:

$$z^* = -(\tau_y/\tau_z)y^* + (\tau_y/\tau_z)(k/d_z) + (l/d_z) .$$

Informacje o budowie strukturalnej kryształu modulowanego uzyskuje się z rentgenowskiego profilu dyfrakcyjnego otrzymanego przez skanowanie sieci odwrotnej kryształu wzdłuż tych prostych. W związku z tym do analizy kryształu należy stosować dwuwymiarowy profil dyfrakcyjny zawierający wszystkie środki ciężkości refleksów [11].

Idealny monokryształ modulowany złożony jest z J (J-liczba całkowita) identycznych domen ustawionych w taki sposób, że w objętości monokryształu obowiązuje, dla płaskiego podłoża :

$$\rho(\bar{r} + \bar{r}_1) = \rho(\bar{r}) \text{ gdzie } \bar{r}_1 = (0, MK\Omega, 0)$$

oraz dla ustopniowanego podłoża:

$$\rho(\bar{r} + \bar{r}_2) = \rho(\bar{r}) \text{ gdzie } \bar{r}_2 = \bar{r}_1 + (0, 0, M\tau_z) .$$

Biorąc pod uwagę powyższe własności otrzymujemy, dla przypadku płaskiego podłoża wyrażenie stanowiące amplitudę rozpraszania :

$$F_{FC}(y^*, z^*) = F_o(y^*, z^*) \exp(\pi i(JMK\Omega y^* + L\Lambda z^*)) R(JMK, \Omega, y^*) R(L, \Lambda, z^*)$$

oraz w przypadku ustopniowanego podłoża:

$$F_{sc}(y^*, z^*) = F_o(y^*, z^*) \exp\left(\pi i \left((JMK\Omega + JM\tau y) y^* + (L\Lambda + JM\tau z) z^* \right)\right) \\ R(JMK, \Omega, y^*) R(JM, \bar{\tau}, y^*, z^*) R(L, \Lambda, z^*) . \quad (12)$$

Natężenie rentgenowskiego profilu dyfrakcyjnego wyraża się poprzez kwadrat amplitudy rozpraszania.

Dla kryształu modulowanego złożonego z J identycznych domen na płaskim podłożu:

$$J_{FC}(y^*, z^*) = |F_o(y^*, z^*)|^2 R^2(JMK, \Omega, y^*) R^2(L, \Lambda, z^*) . \quad (13)$$

Intensywność zależy od iloczynu $J \cdot K \cdot M$ równego liczbie kolumn elementarnych, oznaczając $JKM = \mathfrak{S}$ otrzymuje się dla płaskiego podłoża:

$$J_{FC}(y^*, z^*) = |F_o(y^*, z^*)|^2 R^2(\mathfrak{S}, \Omega, y^*) R^2(L, \Lambda, z^*) . \quad (14)$$

Dla ustopniowanego podłoża, oznaczając liczbę stopni $\mathfrak{R} = JM$ otrzymuje się:

$$J_{sc}(y^*, z^*) = |F(y^*, z^*)|^2 R^2(\mathfrak{S}, \Omega, y^*) R^2(\mathfrak{R}, \tau, y^*, z^*) R^2(L, \Lambda, z^*) . \quad (15)$$

Wyrażenia opisujące natężenie dwuwymiarowego profilu dyfrakcyjnego można bezpośrednio zapisać jako zależne od (θ, ω) , co jest cenne przy porównywaniu profilu teoretycznego i doświadczalnego.

Ważnym wnioskiem wynikającym z wyrażeń (14,15) jest, że szerokości połówkowe refleksu węzłowego i refleksów satelitarnych są identyczne oraz, że wyrażenie które opisuje natężenie składowych widma zależy w sposób niejawni od koncentracji obu domieszek w kolumnie.

INTENSYWNOŚĆ PROFILU RENTGENOWSKIEGO DLA NIEIDEALNEGO MONOKRYSTAŁU MODULOWANEGO

Wnioski dotyczące intensywności dwuwymiarowego profilu rentgenowskiego dla kryształu, zarówno na płaskim jak i ustopniowanym podłożu pozostają słuszne dopóki jest spełnione założenie o jednostajnym rozkładzie domieszki zarówno na płaszczyznach typu α i β . Zakładając, że na płaszczyznach prostopadłych do kierunku [001] w kryształcie istnieją niezerowe gradienty koncentracji indu oraz fosforu otrzymuje się model nieidealnego kryształu modulowanego. W modelu tym zakłada się, że w objętości domeny nie ma gradientów domieszek, dopiero poszczególne domeny różnią się pomiędzy sobą koncentracjami indu i fosforu.

Kryształ modulowany jest podzielony na wiele ($R \gg 1$) domen o lateralnej rozciągłości $JK\Omega$, równoległych do kierunku wzrostu i wysokości równej $L\Lambda$, czyli rozmiarowi monokryształu w kierunku wzrostu. Długość fali modulacji w poszczególnych domenach jest dobrze zdefiniowana i stała. Domeny o jednakowych długościach fali modulacji mają identyczne rzuty gęstości elektronowej na płaszczyznę $X=0$, więc identycznie odbijają promieniowanie rentgenowskie. Promieniowanie rentgenowskie pochodzące od domen o różnych koncentracjach trafia na skalę „ θ, ω ” pod nieco

różnymi kątami, wynika stąd, że poszczególne domeny mogą być rozpatrywane jako oddzielne obszary koherentnego rozpraszania [12]. Przyjęty model kryształu pozwala znaleźć natężenie promieniowania odbitego przez nieidealny monokryształ dokonując całkowania przyczynków od poszczególnych obszarów koherentnego rozpraszania.

Intensywność pochodząca od wszystkich obszarów w których koncentracja indu jest zawarta w przedziale $\langle i+di \rangle$, a koncentracja fosforu $\langle p+dp \rangle$ jest:

$$dI(\theta, \omega) = P(i, p) J(\theta, \omega, i, p) di dp, \quad (16)$$

gdzie $P(i, p)$ jest gęstością prawdopodobieństwa występowania tych obszarów. Całkowite natężenie promieniowania pochodzące od kryształu wyraża się wzorem :

$$I(\theta, \omega) = \iint P(i, p) J(\theta, \omega, i, p) di dp, \quad (17)$$

stąd biorąc pod uwagę, że obszary koherentnego rozpraszania są przeliczalne dla kryształu na płaskim podłożu otrzymuje się:

$$I_F(\theta, \omega) = \sum_{r=1}^R P(r) J_{FD}(\theta, \omega, i_r, p_r), \quad (18)$$

gdzie $P(r) = P(i_r, p_r)$ jest gęstością prawdopodobieństwa wystąpienia w kryształcie obszaru koherentnego rozpraszania, w którym koncentracja indu wynosi i_r , a fosforu p_r .

Dla kryształu na ustopniowanym podłożu:

$$I_S(\theta, \omega) = \sum_{r=1}^R P(r) J_{SD}(\theta, \omega, i_r, p_r). \quad (19)$$

W celu otrzymania profilu rentgenowskiego widma dyfrakcyjnego (19) przyjmuje się dwa założenia. Pierwsze polega na przyjęciu rozkładu gęstości prawdopodobieństwa $P(r)$. Drugie na przyjęciu 2R funkcji określających w sposób jednoznaczny budowę kryształu i jego własności dyfrakcyjne. Modelowanie rentgenowskiego widma dyfrakcyjnego dla nieidealnego kryształu modulowanego złożonego z wielu obszarów koherentnego rozpraszania wymaga zastosowania metod numerycznych. W tym celu został przygotowany program, który na podstawie składu chemicznego w każdej domenie określa profil fali modulacji gęstości elektronowej oraz fali modulacji odległości międzypłaszczyznowych, a następnie modeluje dwuwymiarowy rentgenowski profil dyfrakcyjny.

CHARAKTERYSTYKA BADANEGO KRYSZTAŁU MODULOWANEGO I WARUNKI POMIAROWE

Zbadano kryształ modulowany $\text{GaAs/GaAs}_{0.7}\text{P}_{0.3}$ (amplituda fali koncentracji In równa zero) na podłożu GaAs z orientacją [100] o grubości około 4000 Å. Odchylenie powierzchni podłoża od płaszczyzny (100) zapobiega generacji domen antyfazowych. Kąt dezorientacji leży w płaszczyźnie (001). Pomiary wykonano w refleksie

400 przy zastosowaniu filtrowanego promieniowania CuK_α . Rozbieżność wiązki pierwotnej nie przekraczała $3.7 \cdot 10^{-6}$, a apertura licznika $2.4 \cdot 10^{-4}$. Krok skanowania θ - 2θ wynosił $0.01^\circ 2\theta$, a krok skanowania ω 0.01° .

Idea otrzymania dwuwymiarowego profilu dyfrakcyjnego została szczegółowo zaprezentowana w [10,11]. Wykonano 17 jednowymiarowych profili dyfrakcyjnych $(\omega+i\delta\omega, 2\theta)$ gdzie $-9 < i < 9$. Przypadek $i=0$ odpowiada symetrycznemu skanowaniu θ - 2θ , dla i różnego od zera mamy do czynienia z asymetrycznym skanowaniem θ - 2θ . Pomiary wykonano w zakresie $65.5^\circ \leq 2\theta \leq 67.4^\circ$, $-0.08^\circ \leq \omega \leq 0.08^\circ$.

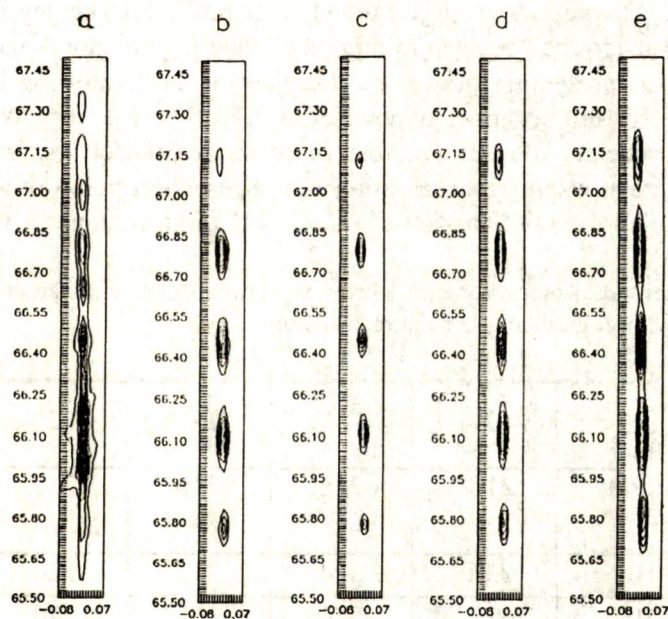
Zastosowany sposób skanowania odpowiada cięciu płaszczyzny $X^*=0$ sieci odwrotnej kryształu prostymi o równaniach:

$$y^* \cos(l\delta\omega) + z^* \sin(l\delta\omega) = 0, \quad l - \text{całkowite.}$$

Kolejne złożenie jednowymiarowych profili pozwala otrzymać dwuwymiarowy profil dyfrakcyjny otoczenia wybranego węzła sieci odwrotnej, w tym wypadku refleksu głównego (004).

WYNIKI EKSPERYMENTALNE

Eksperymentalny dwuwymiarowy profil rentgenowski otrzymany dla badanego kryształu zamieszczony jest na (Rys. 1a).



Rys. 1. Dwuwymiarowe profile dyfrakcyjne: a) eksperymentalny, b) eksperymentalny oczyszczony, c) teoretyczny odpowiadający idealnemu kryształowi z koncentracją fosforu $p = 0.31$, $dp/dy = 0$, d) teoretyczny $dp/dy = 7.4 \cdot 10^{-5}$, e) teoretyczny $dp/dy = 1.4 \cdot 10^{-4} \text{Å}^{-1}$ [10].

W zakresie kątów: $65.95 < 2\theta < 66.30$ oraz $-0.05 < \omega < 0.05$ występuje refleks pochodzący od podłoża, składający się ze składowych $K_{\alpha 1}$ dla $2\theta = 66.00^\circ$ i $K_{\alpha 2}$ dla $2\theta = 66.18^\circ$. Dla $66.30^\circ < 2\theta < 67.45^\circ$ zaznaczają się również obie składowe spektralne refleksu węzłowego s_0 i dwu refleksów satelitarnych - s_1 i s_2 . W okolicy kąta $2\theta = 65.80^\circ$ występuje słabo wykształcony refleks satelitarny s_{-2} . W odniesieniu do każdego jednowymiarowego profilu dyfrakcyjnego zastosowano metody oczyszczania [9]. W ten sposób otrzymano dwuwymiarowy profil dyfrakcyjny (Rys. 1b). Po oczyszczeniu składowych $K_{\alpha 2}$ i refleksu pochodzącego od podłoża zaznaczają się wszystkie składowe profilu, również refleks satelitarny s_{-1} .

Na rysunkach 1c - 1e zaprezentowane są teoretyczne, dwuwymiarowe profile dyfrakcyjne. Założono następujące parametry:

- 1 -szerokość stopnia 225\AA ,
- 2 -liczba stopni w kolumnie (obszarze koherentnego rozpraszania) - 15,
- 3 -liczba warstw podwójnych GaAs(P)/GaAs - 20,
- 4 -długość fali modulacji równa grubości warstwy podwójnej zależna od koncentracji fosforu,
- 5 -liczba płaszczyzn sieciowych (001) w warstwie podwójnej - 112,
- 6 -kształt fali modulacji prostokątny,
- 7 -kryształ złożony z wielu obszarów koherentnego rozpraszania,
- 8 -średnia koncentracja fosforu wynosi 0.31.

Na (Rys. 1c) prezentowany jest teoretyczny profil dyfrakcyjny idealnego kryształu modulowanego bez występowania lateralnego gradientu koncentracji fosforu. (Rys. 1d i 1e) prezentują profile dyfrakcyjne dla kryształów w których gradienty koncentracji fosforu wynoszą odpowiednio $7.4 \cdot 10^{-5}$ i $1.4 \cdot 10^{-4}$. Widać, że wraz ze wzrostem gradientu koncentracji fosforu rosną szerokości wszystkich składowych profilu, mierzone wzdłuż linii na której leżą. Szerokości połówkowe refleksu węzłowego σ_0 i refleksów satelitarnych σ_L $-2 < L < 2$ zamieszczone są w Tabeli 1.

Tabela 1. Szerokości połówkowe refleksów węzłowego oraz satelitarnych, w zależności od założonej wielkości gradientu koncentracji fosforu.

Szerokości połówkowe (")	σ_{-2}	σ_{-1}	σ_0	σ_{+1}	σ_{+2} (")
Kryształ idealny: dc/dy=0	216	216	216	216	216
dc/dy= $7.4 \cdot 10^{-5}$	336	324	312	324	336
dc/dy= $1.4 \cdot 10^{-4}$	612	576	416	576	612
Badana próbka	346	338	288	328	332

Porównanie zarówno danych zamieszczonych w tabeli, jak i dwuwymiarowych profili dyfrakcyjnych sugeruje, że w badanej próbce występuje lateralny gradient koncentracji fosforu. Zaprezentowany model kryształu przewiduje w tym przypadku, że przybliżona jego wielkość jest rzędu $5 \cdot 10^{-5} \text{ \AA}^{-1}$.

Prezentowana metoda skanowania sieci odwrotnej badanego kryształu jest idealnym narzędziem służącym do analizy struktury kryształów wielowarstwowych na ustopniowanych podłożach, ponieważ pozwala na bezpośredni pomiar kąta α pomiędzy płaszczyznami podłoża i płaszczyznami równego składu chemicznego w superstrukturze [8] oraz umożliwia badanie szerokości połówkowych refleksów w obu ortogonalnych kierunkach [001] i [010].

BIBLIOGRAFIA

- [1] Vandenberg J.M. et al.: High-resolution X-ray diffraction studies of InGaAs(P)/InP superlattices grown by gas-source molecular-beam epitaxy. *J. Appl Phys.* 62, 1987, (4)
- [2] Fontaine D. de: Local atomic arrangements studies by X-ray diffraction. Cohen ed. 1966
- [3] Vardanyan D. M. et al.: The dynamic theory of X-ray diffraction by the one dimensional ideal superlattice. II Calculation of structure factors for some superlattice models. *Acta Cryst.* A41, 1985, 218-222
- [4] Rosner B. et al.: Influence of misoriented substrates and dislocations on the diffraction patterns of superlattices. *J. Appl. Cryst.* 26, 1993, 532-538
- [5] Wójcik M. et al.: Determination of the coherent scattering domains structure of GaAs(P)/GaAs multilayered crystals. *Suppl. Issue of the Zeits. für Krist.* 373, 1992
- [6] Segmuller A. et al., *J. Appl. Cryst.*, 6, 1973, 19
- [7] Ramachandran G.N. et al.: Fourier methods in crystallography. Buerger ed. 1990
- [8] Neumann D. A. et al.: X-ray evidence for a terraced GaAs/AlAs superlattice. *Appl. Phys. Lett.* 43, 1983, 1
- [9] Gaca J. et al.: Numeryczne metody oczyszczania rentgenowskiego widma dyfrakcyjnego zastosowane do badania supersieci półprzewodnikowych. *Materiały Elektroniczne* 20, 1992, 3
- [10] Wójcik M.: XRD investigation of the non-ideal structure of the GaAs(P)/GaAs superlattice. *SPIE - The Int. Soc. for Optical Eng.* V 1845, 1992, 191-194
- [11] Gaca J., Wójcik M.: X-ray diffractometric characterization of the GaAsP/GaAs and InGaAs/GaAsP superlattices grown on offcut GaAs(001) substrate by means of the reciprocal space mapping. *Appl. Phys. Lett.* 65 (8), 1994, 22
- [12] Wójcik M., Gaca J., Sass J.: The broadening of the satellite reflections in the non-ideal superlattice model. *J. Phys. Cond. Matter.* 2, 1990, 2, 265-272