

А. Н. Гуреев, В. П. Кладько, Л. И. Даценко, М. Я. Скороход

ИССЛЕДОВАНИЕ ТИПА ДОМИНИРУЮЩИХ МИКРОДЕФЕКТОВ В «БЕЗДИСЛОКАЦИОННОМ» ТЕЛЛУРИДЕ КАДМИЯ

Массивные монокристаллы CdTe обычно содержат большое количество различных структурных дефектов—дислокаций, малоугловых границ, двойников [1]. Плотность дислокаций в образцах, выращенных из паровой фазы и из расплава, как правило, достигает значений 10^3 — 10^5 см⁻². Иногда, однако, удается вырастить и более совершенные массивные монокристаллы, которые, по-видимому, содержат значительное количество микродефектов.

Отдельные дислокации и двойники, как известно, могут быть надежно идентифицированы с помощью рентгеновской дифракционной топографии [2], которая, однако, оказывается малоэффективной при изучении микродефектов из-за малой протяженности деформационных полей, создаваемых ими в кристаллической матрице. Поэтому для определения типа микродефектов в бездислокационных монокристаллах целесообразно использовать явление аномального прохождения рентгеновских лучей (АПРЛ) с измерением интегральных интенсивностей (ИИ) I_R лауэ-дифрагированных пучков.

Особенно перспективной неразрушающей методикой исследования структурного совершенства является анализ толщинных зависимостей скачков $S = I_{R2}/I_{R1}$ ИИ, измеренных соответственно в длинноволновой (λ_2) и коротковолновой (λ_1) областях длин волн вблизи K -краев поглощения компонент кристалла [3]. Эта методика позволяет корректно определить важнейшие параметры рассеяния, характеризующие одновременно структурное совершенство кристалла (статический фактор Дебая — Валлера $\exp(-L)$) и часть интерференционного коэффициента поглощения (ИКП) μ_i , ответственную за диффузное рассеяния излучения на дефектах $\mu_{др}$. Определив с помощью таких измерений L и $\mu_{др}$ для различных отражений $\mathbf{H}(hkl)$, можно, согласно [4], установить тип доминирующих дефектов, как это было сделано, например, в случае кристаллов GaAs, сильно легированных Te [5].

В настоящей работе изучались толщинные зависимости I_R при АПРЛ с длинами волн, близкими к K -краю поглощения λ_K Cd и Te, для различных отражений с целью выявления дефектов структуры в бездислокационных образцах CdTe и выяснения их природы.

Сущность экспериментального метода идентификации природы микродефектов заключается в следующем. Согласно [4], ИКП

$$\mu_i = \mu_\phi + \mu_{др}, \quad (1)$$

где фотоэлектрическая часть μ_ϕ зависит от L , температурного фактора M и параметра локальности поглощения волновых полей ϵ_0 :

$$\mu_\phi = \mu(1 - \epsilon_0 e^{-(M+L)})/\gamma \approx \mu(M+L)/\gamma. \quad (2)$$

В случае симметричной лауэ-дифракции $\gamma = \cos \Theta$. Параметр L и $\mu_{др}$ для различных дефектов зависят от вектора дифракции \mathbf{H} или от угла Брэгга Θ . В частности, в рамках модели кластеров $L \sim \mathbf{H}^2$, $\mu_{др}^{KL} \sim \cos^2 \Theta$, в то время как в рамках модели дислокационных петель $L \sim \mathbf{H}^{2/3}$, а $\mu_{др}^{лет} \sim (a + b \cos^2 \Theta)$, где a и b — константы.

При измерениях вблизи λ_K $\mu_{др1} \approx \mu_{др2}$, поскольку, согласно [4], они пропорциональны действительным частям функций атомного рассеяния f_{rh} , которые с учетом поправок на аномальную дисперсию при λ_1 и λ_2 равны с точностью до ошибки эксперимента [5]. Это обстоятельство при рассмотрении функции

$$\ln S \equiv \ln (I_{R_2}/I_{R_1}) = At + B, \quad (3)$$

где A — разность ИКП μ_{i1} и μ_{i2} , а $B = 0,5 \ln(\chi_{ih_1}/\chi_{ih_2})$ выражается через соответствующие коэффициенты Фурье мнимых частей поляризуемости χ , позволяет исключить в соответствии с (1) часть ИКП, соответствующую диффузному рассеянию, и непосредственно определить L по (2).

При анализе большого числа топограмм монокристаллов CdTe удалось выбрать несколько образцов без линейных дислокаций. Топограмма одного из таких образцов приведена на рис. 1, а. На снимке просматриваются слабоконтрастные изображения отдельных крупных дислокационных петель (обозначены стрелками), а также светлые и темные области, вероятно, скопления петель. Размеры наиболее крупных петель, согласно топографическим оценкам, достигают 50 мкм. По-видимому, в образце имеются также и петли меньших размеров, которые не разрешаются на топограммах. Для сравнения структурного совершенства кристаллов на рис. 1, б приведена топограмма обр. 2 с плотностью линейных дислокаций 10^3 см^{-2} . Контрасты изображений дислокаций на топограммах обр. 1 и 2 имеют бормановский характер.

Структурное совершенство обр. 1 исследовалось в дальнейшем с помощью дифрактометрических методов. Все измерения ИИ проводились на однокристалльном спектрометре с использованием MoK_α -, MoK_β -излучений, а также $\lambda_1 = 0,38 \text{ \AA}$ и $\lambda_2 = 0,4 \text{ \AA}$ вблизи λ_K Te и $\lambda_1 = 0,45 \text{ \AA}$ и $\lambda_2 = 0,47 \text{ \AA}$ вблизи λ_K Cd. Работа проводилась в режиме питания трубки, исключая влияние кратных гармоник спектра. Ориентация (110) поверхности образца позволяла осуществлять симметричную лауэ-дифракцию от плоскостей $(\bar{1}\bar{1}0)$, $(\bar{1}\bar{1}2)$, $(\bar{1}\bar{1}3)$, $(3\bar{3}\bar{1})$. Толщина образцов варьировалась в интервале 250—900 мкм. Расходимость первичного пучка, которая не превышала $20'$, позволяла, обеспечивая разумные значения ИИ, существенно уменьшить уровень фона при малых углах Θ и проводить измерения вблизи λ_K . Уровень фона определялся дополнительным измерением.

Нормальные коэффициенты поглощения μ вблизи λ_K были измерены в независимом эксперименте: $\mu_1 = 156 \text{ см}^{-1}$, $\mu_2 = 60 \text{ см}^{-1}$ в случае Cd, $\mu_1 = 181 \text{ см}^{-1}$ и $\mu_2 = 121 \text{ см}^{-1}$ в случае Te.

Так как кристаллов с идеальной структурой нет и не известны соответствующие параметры рассеяния, необходимые для расчета S в случае совершенных кристаллов, то нельзя использовать метод работы [5] для установления типа дефектов. Поэтому была применена несколько иная схема определения L и $\mu_{др}$ по экспериментальным дан-

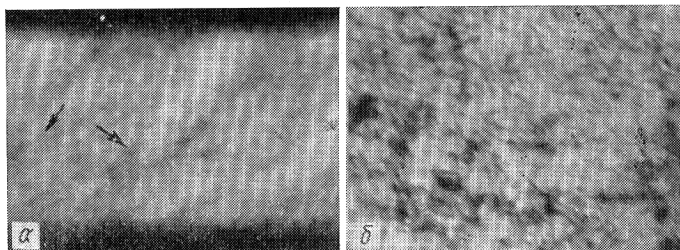


Рис. 1. Топограммы обр. 1 (α , (110)) и обр. 2 (β , (111)) (дифракционная плоскость $(\bar{1}10)$, MoK_{α} -излучение, $\times 32$).

ным. Из (1) найдем выражения для ИКП μ_{i_1} и μ_{i_2} и, проведя несложные преобразования в предположении $\varepsilon_0 \approx 1$, получим

$$M + L \approx (\mu_{i_1} - \mu_{i_2}) / (\mu_1 - \mu_2) \gamma^{-1}, \quad (4)$$

где фактор M рассчитывался по среднеквадратичным отклонениям $\langle u_S^2 \rangle$ для атомов Cd и Te [6]. Затем из (1) аналогичным путем получалось выражение для $\mu_{др}$ вблизи λ_K :

$$\mu_{др} = (\mu_{i_2} \mu_1 - \mu_{i_1} \mu_2) / (\mu_1 - \mu_2), \quad (5)$$

а для других λ (характеристических линий)

$$\mu_{др} = \mu_i - \mu(M + L) / \gamma. \quad (6)$$

Значения L и $\mu_{др}$, рассчитанные по (5) и (6) с использованием соответствующих экспериментальных значений μ_i , полученных по толщинным зависимостям ИИ, приведены в таблице.

Обработать данные о $\mu_{др}$ аналогично [3], к сожалению, не удалось, поскольку угловые зависимости $\mu_{др}(\Theta)$ оказались близкими в рамках моделей петель и кластеров вследствие малости углов Θ в случае CdTe. Поэтому для определения природы дефектов в бездислока-

Отражение hkl	ИКП, cm^{-1}					MoK_{β}	MoK_{α}	L
	$\lambda_{1Te} = 0,38 \text{ \AA}$	$\lambda_{2Te} = 0,4 \text{ \AA}$	$\lambda_{1Cd} = 0,45 \text{ \AA}$	$\lambda_{2Cd} = 0,47 \text{ \AA}$				
$2\bar{2}0$	19,64 (3,6)	14,3 (3,6)	23,9 (5,3)	12,4 (5,3)	21,3 (7,8)	28,67 (8,98)	0,0262	
$1\bar{1}3$	21,5	14,38	26,6 (1,9)	11,4 (1,9)	21,1 (3,2)	26,32 (0,16)	0,0317	
$3\bar{3}1$	32,0	20,0	50,36 (7,9)	24,21 (7,9)	43,1 (12,3)	56,0 (21,0)	0,0516	
$2\bar{2}4$	47,21 (4,97)	33,21 (4,97)	60,8 (7,5)	28,1 (7,5)	50,75 (13,4)	67,7 (13,2)	0,0541	

Примечание. В скобках приведены $\mu_{др}$, рассчитанные по (5), (6).

ционном кристалле CdTe была проанализирована зависимость фактора Дебая — Валлера от вектора дифракции $\mathbf{H} = 2\pi/d$, где d — межплоскостное расстояние.

По значениям L для четырех рефлексов (таблица) можно построить зависимость $\ln(\mu L) = f(\ln \mathbf{H})$ (рис. 2). Поскольку указанная зависимость оказалась линейной, а наклон ее к оси абсцисс близок к $3/2$, на основании теории Дедерихса был сделан вывод о том, что доминирующим типом дефектов в данном кристалле являются дислокацион-

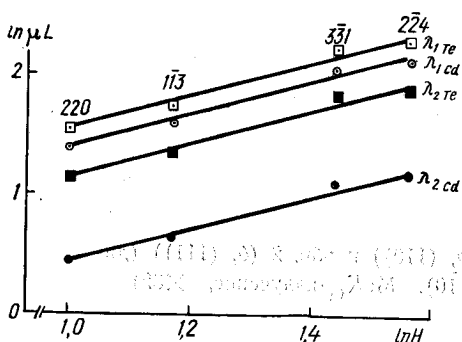


Рис. 2. Зависимости $\ln(\mu L) = f(\ln \mathbf{H})$ для отражений 113, 220, 224 и 331 в кристалле с дислокационными петлями.

ные петли. Этот результат, с нашей точки зрения, подтверждает применимость теории Дедерихса в случае двухкомпонентных монокристаллов, к которым относится CdTe. Значения $\mu_{др}$, приведенные в таблице, также позволяют проанализировать зависимость ее от λ . В соответствии с предсказаниями указанной теории эта зависимость оказалась близкой к квадратичной.

Результаты настоящей работы демонстрируют возможность получения достоверной информации о дефектной структуре сильнопоглощающих кристаллов с помощью измерения ИИ вблизи λ_K в том случае, когда протяженность деформационных полей дефектов меньше разрешающей способности прямых топографических методов. Применение указанной методики позволило получить данные о доминирующем типе дефектов в бездислокационном кристалле CdTe без привлечения каких-либо теоретически рассчитанных констант, характеризующих данные кристаллы.

SUMMARY. Analysis of integral intensities of the Laue-diffracted beams measured near the Cd and Te absorption K-edges as well as the topographic method have shown that the dislocation-free CdTe crystals contain dislocation loops which are the dominant type of defects in the investigated samples.

1. Buck P., Nitsche R. Sublimation growth and X-ray topographic characterization of CdTe single crystals // J. Cryst. Growth.—1980.—48, N 1.—P. 29—33.
2. Buck P., Nadel M. Röntgentopographische Untersuchungen an CdTe-Einkristallen // Z. Kristallogr.—1981.—157, N 2.—S. 291—298.
3. Даценко Л. И. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей и структурное совершенство кристаллов // УФЖ.—1979.—24, № 5.—С. 577—590.
4. Dederichs P. H. Effect of defect clustering on anomalous X-ray transmission // Phys. Rev. B.—1970.—1, N 4.—P. 1306—1317.
5. Datsenko L. I., Gureev A. N., Starchik M. I. Dynamical scattering of X-rays in gallium arsenide crystals containing dislocation loops // Phys. status solidi A.—1975.—32, N 2.—P. 549—556.
6. Капустина М. Д. Рентгеноструктурное исследование атомной структуры некоторых полупроводниковых соединений $A^{IV}B^{VI}$ и твердых растворов на их основе: Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук.—М., 1969.—21 с.

Ин-т полупроводников АН УССР,
Киев

Получено 21.12.84