

ВПЛИВ ТИПУ ВЛАСНИХ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ НА ІНТЕНСИВНІСТЬ ДИФРАГОВАНИХ РЕНТГЕНІВСЬКИХ ПРОМЕНІВ ДЛЯ КВАЗІЗАБОРОНЕНИХ РЕФЛЕКСІВ

В. П. КЛАДЬКО

Інститут фізики напівпровідників АП України
(252650 Київ 22, МСП, просп. Науки, 45)

УДК 548.731

© 1994 р.

Проаналізовано вплив концентрації та типу власних точкових дефектів (ВТД) на інтенсивність дифракції рентгенівських променів (РП) для квазізаборонених відбитків. Показано можливість визначення локалізації ВТД за даними рентгенодифрактометричних вимірів.

У цілому ряді робіт [1 — 3] показано принципову можливість визначення величини відхилення складу монокристалів GaAs, InSb та ін. від стехіометричного за даними вимірювань і аналізу інтегральної інтенсивності (ІІ) квазізаборонених рентгенівських рефлексів (КЗР). Це виявилось можливим завдяки незначному впливу на ІІ таких рефлексів дисторсій кристалічної ґратки, малих ексциційних поправок і дифузного розсіювання [1]. Однак, незважаючи на просту фізичну інтерпретацію результатів цих робіт, існують труд-

нощі визначення параметра відхилення від стехіометрії без врахування будови твердих розчинів кристалів.

Тому основним завданням цієї роботи є розрахунок залежності ІІ КЗР від концентрації і типу ВТД та визначення оптимальних умов дифракції РП.

Впорядковане розташування атомів у просторовій ґратці кристала обумовлює існування законмірностей у розташуванні дифракційних максимумів, інтенсивність яких залежить від співвідношення фаз РП, розсіяних у певному напрямку різними атомами.

Інтенсивність розсіювання РП при дифракції у кристалі визначається структурним фактором F_h , який залежить від конфігурації атомів різних сортів у ґратці і їх функцій атомного роз-

визначає:

$$F_i = \sum_{l=0}^{\infty} c_l (f_0 + f' + if'')_i \exp(-M_l) \exp 2\pi i l r_i, \quad (1)$$

c_l — атомна частка атомів сорту i , $f_0 + f' + if'' = f_i$ — функція атомного розсіювання з емпіричними поправками, M_l — температурний фактор Дебая — Валлера, r_i — радіус-вектор атома елементарній ґратці, h — вектор дифракції.

Очевидно, що f_i залежить від типу атома, що знаходиться в i -му вузлі. Крім того, слід врахувати, що густина зовнішніх електронів атома залежить від його зміщення з вузла ідеальної ґратки, а також від типу оточуючих атомів. Внаслідок цього f_i , строю кажучи, також повинні залежати від зміщення оточення i -го атома, а також від складу і порядку оточення. Однак оскільки частка зовнішніх електронів відносно мала (за винятком легких атомів) і вони дають невеликий внесок в f_i , то у першому наближенні функція атомного розсіювання визначається лише типом самого i -го атома [4]. Всі проведені нижче викладки зроблено з врахування цього наближення.

Для рефлексів типу $h + k + l = 4n + 2$ ($n = 0, 1, 2, \dots$, $h k l$ — індекси Міллера) вираз структурної амплітуди у бінарних кристалах набуває вигляду

$$F_A = 4(c_B f_B - c_A f_A). \quad (2)$$

В ідеальному кристалі $c_A = c_B = 1$.

Розглядаючи основні моделі твердих розчинів в межах областей гомогенності сполук $A^3 B^5$ [5] і враховуючи положення атомів в елементарній комірниці, отримаємо вирази для структурного фактора і атомної частки дефектів $x, y \sim (c_A - c_B)$.

У випадку ВТД Шотткі при надлишку обох компонентів $AB_{1-x}(V_B)_x$ і $A_{1-y}B(V_A)_y$ вирази для структурних амплітуд і концентрацій дефектів x та y набувають вигляду

$$F_k = 4(f_B(1-x) - f_A), \quad F_h = 4(f_B - (1-y)f_A),$$

$$x = [F_{0h}]^2(1-R) / [32(\Delta f' f_B' + \Delta f'' f_B'')], \quad (3)$$

$$y = [F_{0h}]^2(R-1) / [32(\Delta f' f_A' + \Delta f'' f_A'')],$$

тут і надалі $R = I_{\text{екс}}/I_{\text{ст}}$ — відношення інтенсивностей для зразка і еталона, F_{0h} — структурна амплітуда для стехіометричного зразка, $\Delta f' = f_B' - f_A'$, $\Delta f'' = f_B'' - f_A''$ — різниці дійсних та уявних частин функцій атомного розсіювання відповідно.

Розглянемо тепер випадок дефектів Шотткі при надлишку компонента А і дефектів Френкеля при надлишку В ($AB_{1-x}(V_B)_x$; $AB_{1-y}(V_A)_y$). Вирази

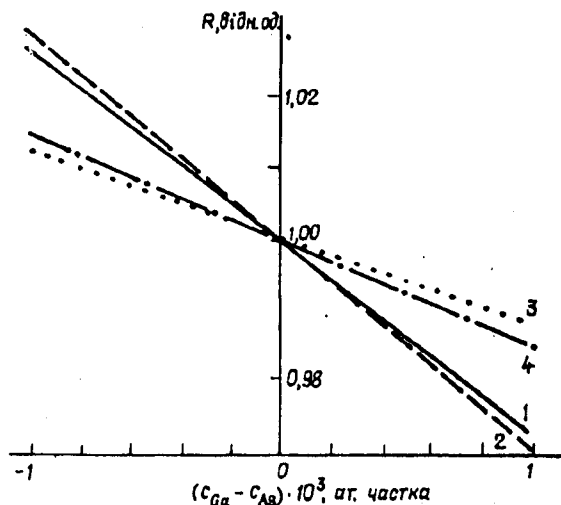


Рис.1. Залежність параметра R КЗР 200 та 600 ($\text{CuK}\alpha$ -випромінювання) від концентрації вакансій $x \sim c(V_{\text{As}})$, $y \sim c(V_{\text{Ga}})$ при розупорядкуванні за Шотткі в GaAs : 1 — V_{Ga} 200; 2 — V_{As} 200; 3 — V_{Ga} 600; 4 — V_{As} 600

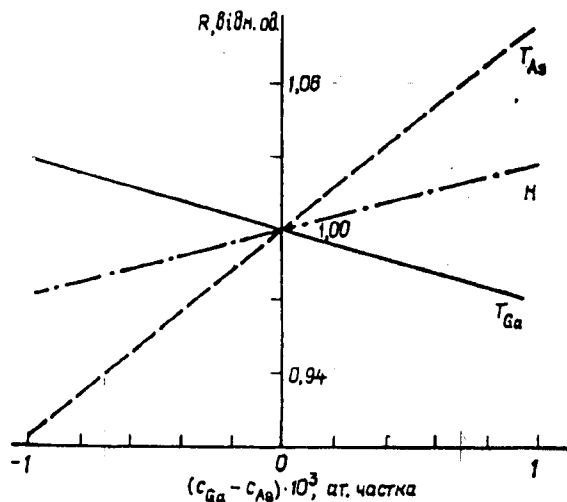


Рис.2. Залежність параметра R для рефлексу 200 ($\text{CuK}\alpha$ -випромінювання) від концентрації міжвузлових атомів As $y \sim c(\text{As}_i)$ ($c(\text{As}_i) \sim (c_A - c_B)$): T_{As} , T_{Ga} — тетраедричне оточення з атомів As та Ga , H — гексагональне оточення

для F_h і x у цьому випадку будуть аналогічними (3), а вираз для y залежить від розташування атома у міжвузловині:

1) тетраедричне оточення з атомів сорту А:

$$F_h = 4(f_B(1+y) - f_A),$$

$$y = [F_{0h}]^2(R-1) / [32(\Delta f' f_B' + \Delta f'' f_B'')]; \quad (4)$$

2) тетраедричне оточення з атомів сорту В:

$$F_h = 4(f_B(1-3y) - f_A),$$

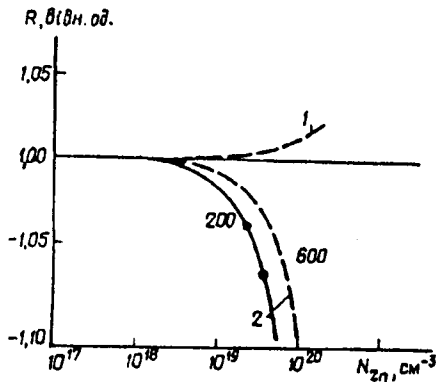


Рис. 3. Залежність зміни параметра R для КЗР 200 від концентрації легуючої домішки Zn в $GaAs$

$$y = [F_{0h}]^2(1 - R) / [96(\Delta f' f_B' r + \Delta f'' f_B'')] ; \quad (5)$$

3) гексагональне оточення:

$$F_h = 4(f_B(1 - y) - f_A),$$

$$y = [F_{0h}]^2(1 - R) / [32(\Delta f' f_B' r + \Delta f'' f_B'')] . \quad (6)$$

Для антиструктурних дефектів $AB_{1-x}(A_B)_x$ і $A_{1-y}(B_A)_y$

$$F_h = 4(f_B - f_A)(1 - y), \quad x = y = (1 - R)/2. \quad (7)$$

Розрахунок залежностей $R = f(x)$ і $R = f(y)$ проводився для довжин хвиль РП CuK_α і MoK_α та рефлексів 200, 600 для різних бінарних кристалів. У розрахунках використовувались значення функцій атомного розсіювання та дисперсійних поправок, одержаних у [6], та температурних факторів [7,8]. Аналіз результатів показує, що найбільш придатними для дослідження даним методом є кристали типу A^3B^5 , до яких належать, зокрема, $GaAs$ та $InSb$ завдяки близьким значенням функцій атомного розсіювання компонентів. Найбільш чутливими є вимірювання з використанням характеристичного MoK_α -випромінювання і рефлексу 200, а також довжин хвиль поблизу K -країв поглинання компонентів [2]. Як показують розрахунки, чутливість методу $c_A - c_B \sim 10^{-4}$ для MoK_α -випромінювання і $c_A - c_B \sim 5 \cdot 10^{-5}$ для K -країв поглинання при точності вимірювання Π близько 3 %.

На рис. 1, 2 наведено розрахункові залежності Π КЗР від концентрації ВТД, з яких випливає, що Π практично не залежить від типу дефектів (у випадку Шоттки) при надлишку будь-якого з компонентів сполуки. У випадку дефектів Френкеля з'являється можливість визначення типу

міжвузловини, де локалізуються дефекти, завдяки різному ходу концентраційних залежностей Π . Вплив антиструктурних дефектів на величину Π як випливає з розрахунків, досить незначний, тому їх аналіз цим методом з такою точністю вимірювання Π уявляється проблематичним.

Проаналізовано також вплив домішок на величину Π . У цьому випадку вираз для F_h при заміщенні домішковим атомом X атома B запишеться у вигляді

$$F_h = 4[x(f_X - f_B) + f_B - f_A], \quad (8)$$

де f_X — функція атомного розсіювання домішкового атома X .

Вираз для x в залежності від співвідношення f_X і f_B набуває вигляду

$$x = [F_{0h}]^2(R - 1) / [32((f_X - f_B)' \Delta f' + (f_X - f_B)'' \Delta f'')] \text{ при } f_X > f_B,$$

$$x = [F_{0h}]^2(1 - R) / [32((f_X - f_B)' \Delta f' + (f_X - f_B)'' \Delta f'')] \text{ при } f_X < f_B. \quad (9)$$

Аналогічні вирази легко отримати і для випадків заміщення атомом X атома A , а також при розміщенні атома X у відповідних міжвузловинах.

На рис. 3 наведено залежність параметра R від концентрації легуючої домішки Zn у монокристалах $GaAs$. Розрахунок показує, що у випадку заміщення атомами Zn вузлів Ga Π повинна зростати (крива 1 рис. 3). Протилежний хід експериментальних результатів (крива 2) дозволяє зробити висновок про розташування атомів Zn (згідно з (5)) у міжвузловинах з оточенням атомами As . Експериментальні точки свідчать про локалізацію атомів Zn в положеннях T_{As} .

Таким чином, проведений аналіз дозволяє зробити висновок про принципову можливість контролю відхилення концентрації від стехіометричної і визначення типу точкових дефектів у бінарних сполуках за допомогою вимірювання Π КЗР.

Автор висловлює подяку за корисну дискусію та критичні зауваження В.З. Лозовському.

1. Fujimoto I. // Jap. J. Appl. Phys. — 1984. — 23, N 5. — P. 1287 — 1289.
2. Кладько В.П., Кришталь Т.Г., Даценко Л.И. // Кристаллографія. — 1989. — 34, № 5. — С. 1083 — 1087.
3. Datsenko L.I., Klad'ko V.P., Kryshchab T.G. // Proc. 8th Internat. Summer School, Szczyrk, 1988. — Singapore: World Sci., 1988. — P. 59 — 67.
4. Кривошляк М.А. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах. — Киев: Наук. думка, 1983.
5. Harle D.T.J. // J. Phys. and Chem. Solids. — 1979. — 40, N 2. — P. 613 — 626.
6. International Tables for X-ray Crystallography. — Birmingham: Kynoch press, 1974. — Vol. 4.

1. *Молодкин В.Б., Кладько В.П., Гуреев А.И.* // *Металлофизика.* — 1984. — 6, № 5. С.103 — 106.
2. *Pletsch U.* // *Phys. status solidi A.* — 1985. — 87, N 1. — P.151 — 155.

Одержано 01.03.93

**ВЛИЯНИЕ ТИПА СОБСТВЕННЫХ ТОЧЕЧНЫХ
ДЕФЕКТОВ НА ИНТЕНСИВНОСТЬ
ДИФРАГИРОВАННЫХ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ
ДЛЯ КВАЗИЗАПРЕЩЕННЫХ РЕФЛЕКСОВ**

В.П. Кладько

Резюме

Проанализировано влияние концентрации и типа собственных точечных дефектов (СТД) на интенсивность дифракции рентгено-

вских лучей для квазизапрещенных отражений. Показана возможность определения локализации СТД по данным рентгенодифрактометрических измерений.

**THE INFLUENCE OF THE TYPE OF INTRINSIC POINT
DEFECTS ON THE DIFFRACTED BEAMS INTENSITY FOR
QUASIFORBIDDEN REFLECTIONS**

V.P. Klud'ko

S u m m a r y

The dependences of concentration and the type of intrinsic point defects (IPD) on the diffracted beams intensity for quasiforbidden reflections are analyzed. It is shown that an IPD location can be determined on the basis of X-ray measurements.