

Czynnik struktury jako mikrosonda defektów w półprzewodnikach

Ilona Frymark

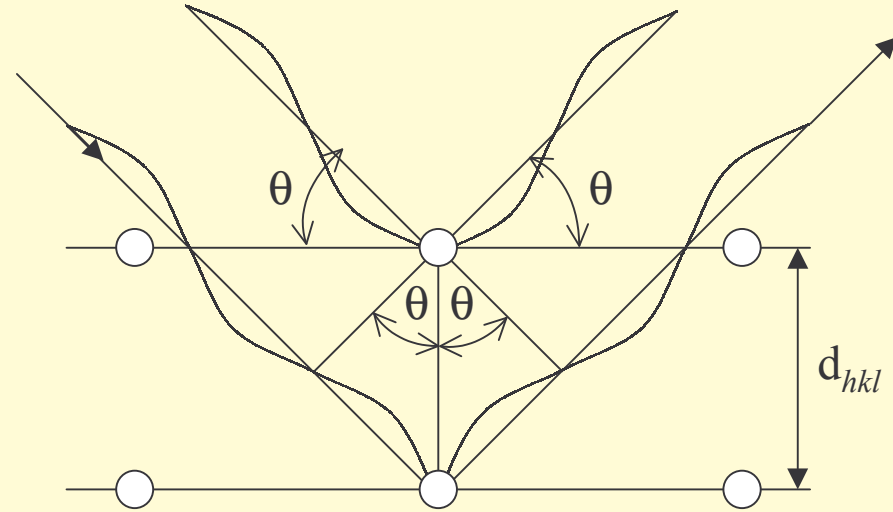
Symposium IFD 2004

Plan

- Czynniki struktury
- Defekty punktowe
- Wpływ defektów punktowych na czynniki struktury
- Wyniki doświadczalne

Równanie Bragga

$$n\lambda = 2d_{hkl}\sin\theta$$

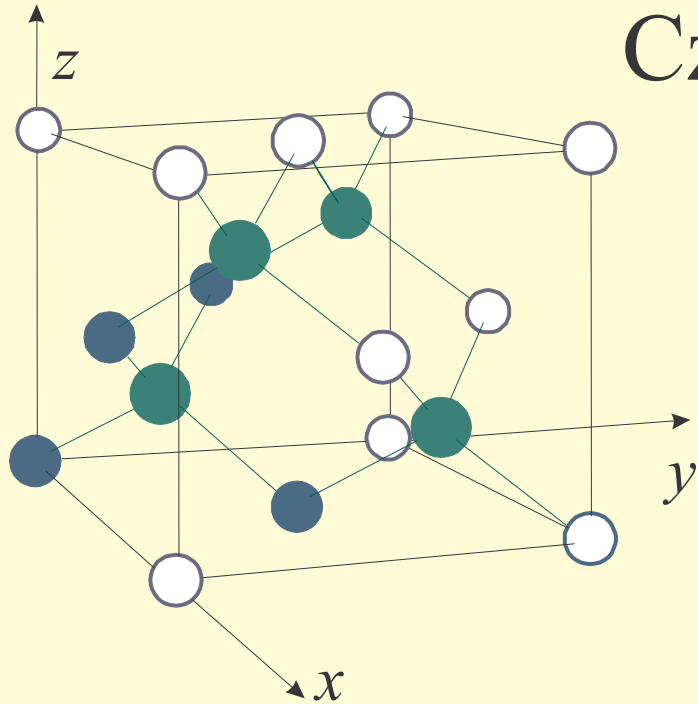


Natężenie wiązki ugiętej

Czynnik struktury

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^n f_j \exp[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)]$$

Czynnik struktury dla GaAs



- atomy Ga ● atomy As
- atomy Ga należące do sąsiednich komórek elementarnych

$$4 \text{ Ga: } (0 \ 0 \ 0), \left(\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ 0\right), \left(\frac{1}{2} \ 0 \ \frac{1}{2}\right), \left(0 \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}\right)$$

$$4 \text{ As: } \left(\frac{1}{4} \ \frac{1}{4} \ \frac{1}{4}\right), \left(\frac{3}{4} \ \frac{3}{4} \ \frac{1}{4}\right), \left(\frac{3}{4} \ \frac{1}{4} \ \frac{3}{4}\right), \left(\frac{1}{4} \ \frac{3}{4} \ \frac{3}{4}\right)$$

$$F_{hkl} = [f_{\text{Ga}} + f_{\text{As}} e^{\pi i(h/2 + k/2 + l/2)}][1 + e^{\pi i(h+k)} + e^{\pi i(h+l)} + e^{\pi i(k+l)}]$$

Refleksy bardzo słabe (pseudozabronione)

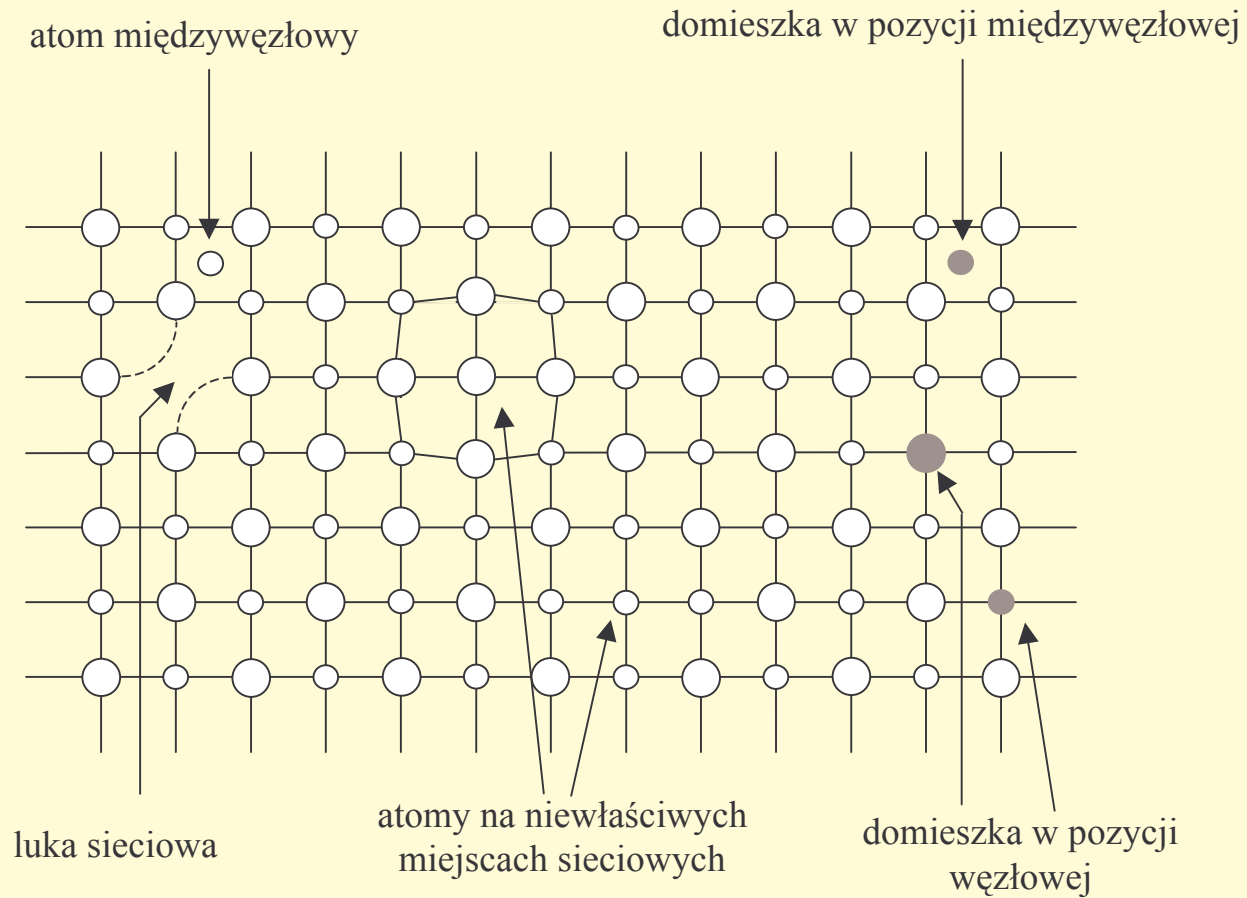
$$F = 4(f_{\text{Ga}} - f_{\text{As}}) \quad \text{gdy } h + k + l = 4n + 2$$

$$I \propto |F|^2$$

Plan

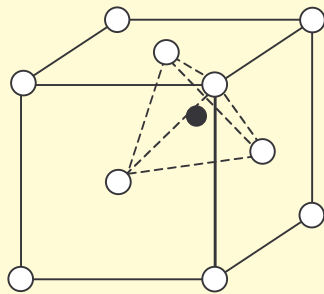
- Czynniki struktury
- Defekty punktowe
- Wpływ defektów punktowych na czynniki struktury
- Wyniki doświadczalne

Defekty punktowe

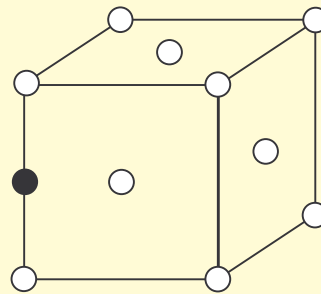


Atomy międzywęzłowe w sieci krystalicznej fcc

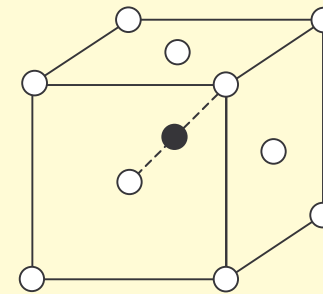
położenie
tetraedryczne



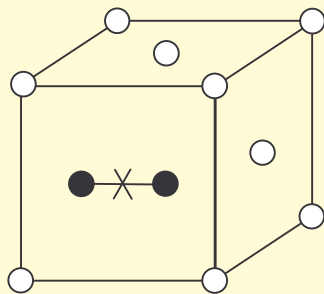
położenie
oktaedryczne



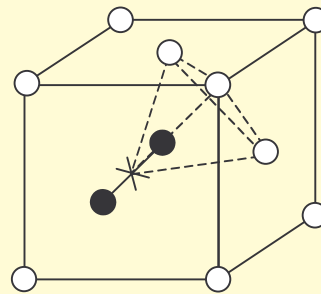
konfiguracja "kraudionowska"



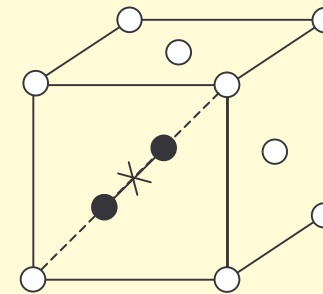
hantle (ang. split interstitials)



$\langle 100 \rangle$



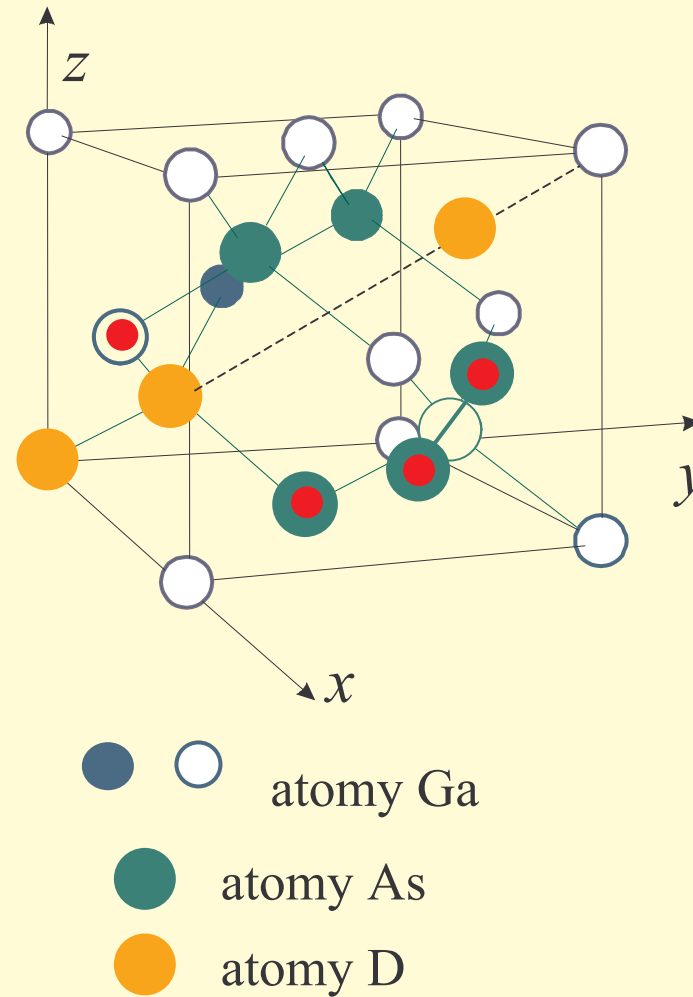
$\langle 111 \rangle$



$\langle 110 \rangle$

Defekty punktowe w LT GaAs

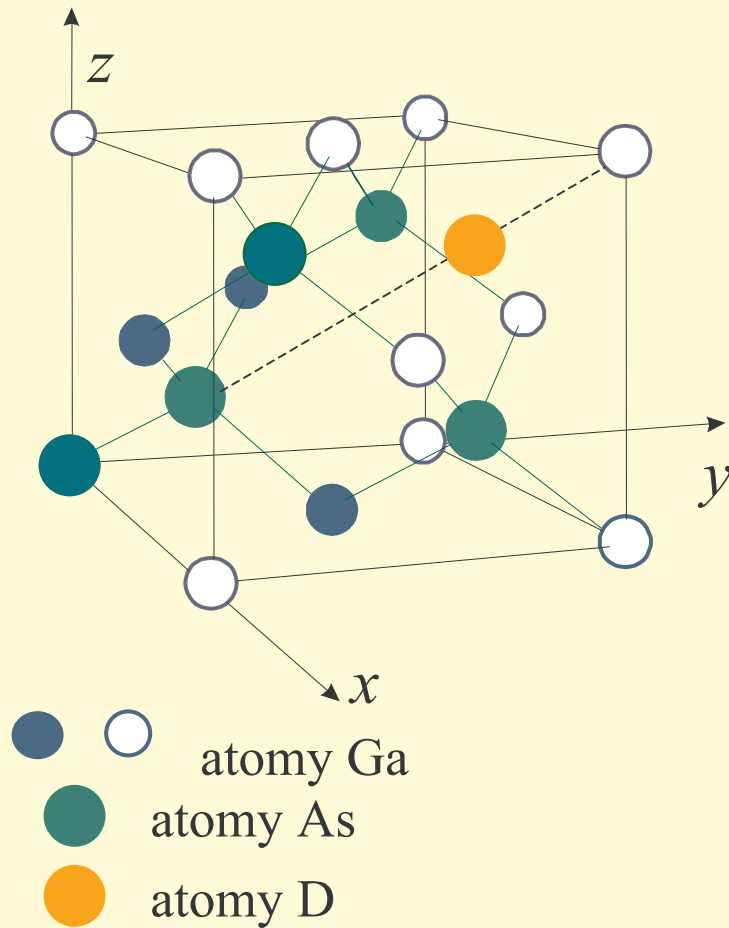
- As_{Ga} (EL2)
- As_i (hantle ułożone wzdłuż osi $\langle 110 \rangle$)
- V_{Ga}
- D_{Ga}
- D_{As}
- D_i



Plan

- Czynniki struktury
- Defekty punktowe
- Wpływ defektów punktowych na czynniki struktury
- Wyniki doświadczalne

Obcy atom w sieci



D w polozeniu tetraedrycznym

$$F = 4[f_{\text{Ga}} - f_{\text{As}} + (D/4N)f_{\text{D}} \cos(4n\pi/9)]$$

$$F_{00n} = 4 (f_{\text{Ga}} - f_{\text{As}}) \quad n = 2, 6$$

D → Ga

Czynnik struktury dla pojedynczej komórki elementarnej:

$$F_{\text{D} \rightarrow \text{Ga}} = 3f_{\text{Ga}} + f_{\text{D}} - 4f_{\text{As}}$$

Sredni czynnik struktury dla całego kryształu:

$$F_{\text{D} \rightarrow \text{Ga}} = 4[f_{\text{Ga}} + (D/4N)(f_{\text{D}} - f_{\text{Ga}}) - f_{\text{As}}]$$

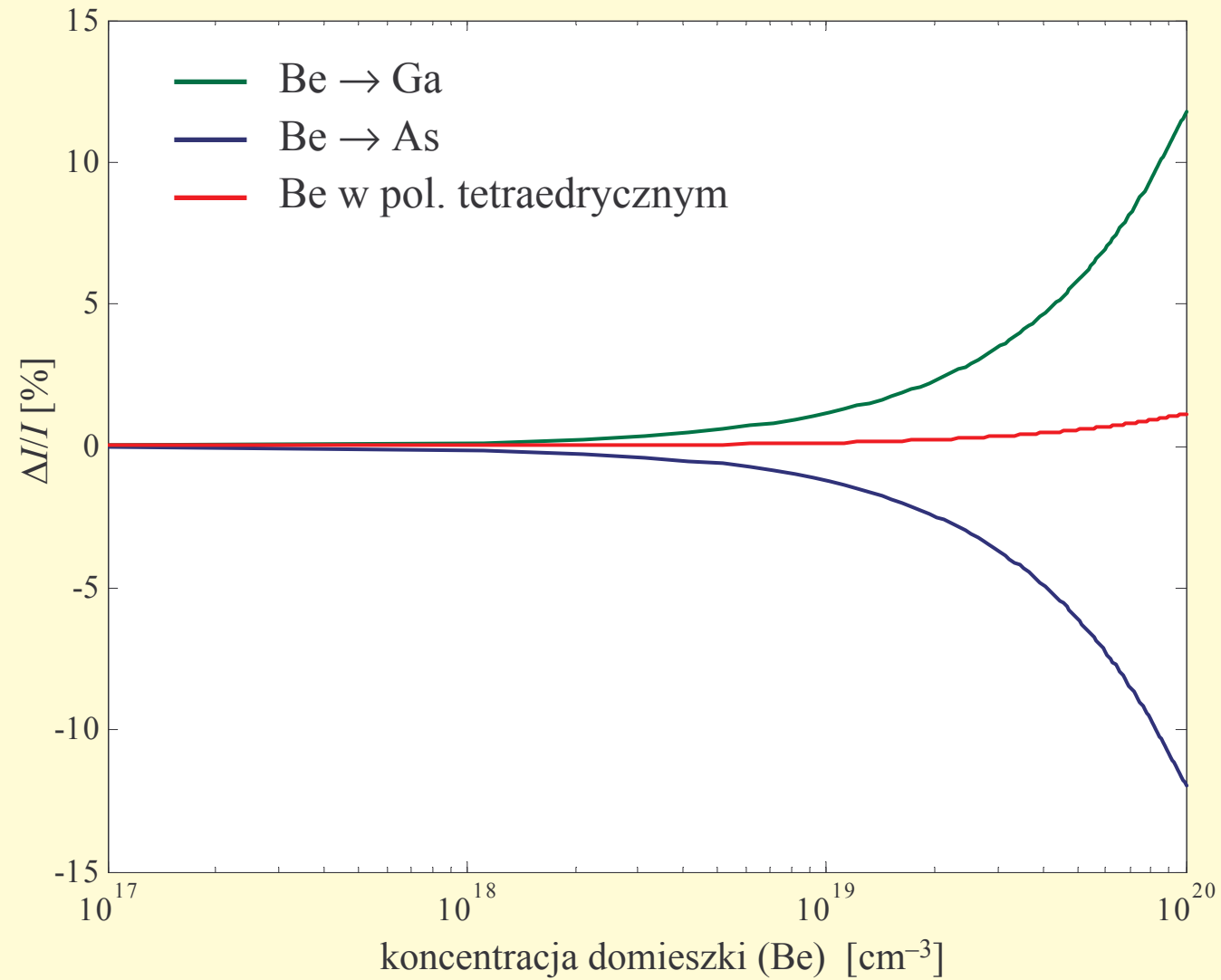
D – koncentracja domieszki [cm^{-3}]

N – liczba komórek elementarnych w 1 cm^3 arsenku galu

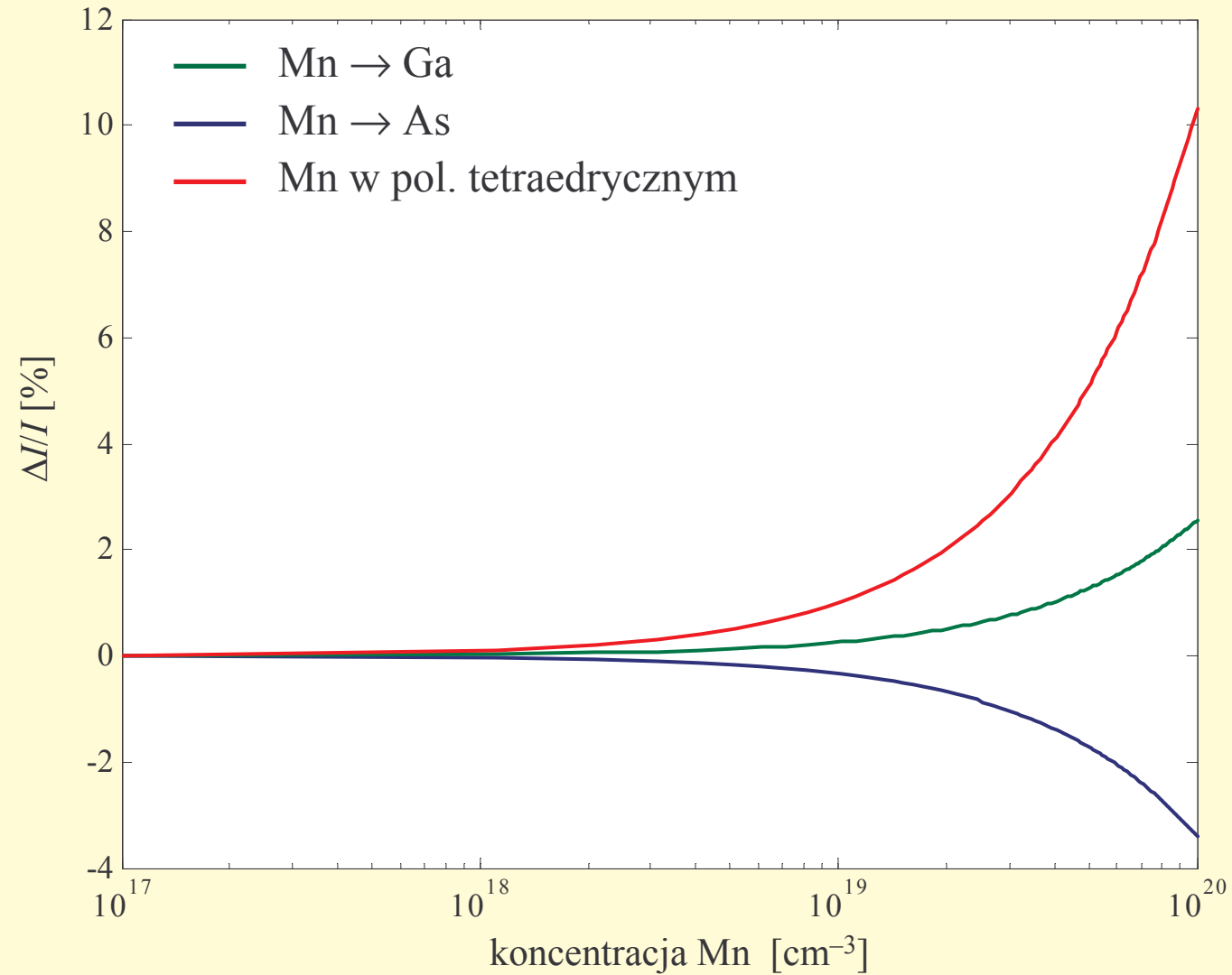
D → As

$$F_{\text{D} \rightarrow \text{As}} = 4[f_{\text{Ga}} + (D/4N)(f_{\text{As}} - f_{\text{D}}) - f_{\text{As}}]$$

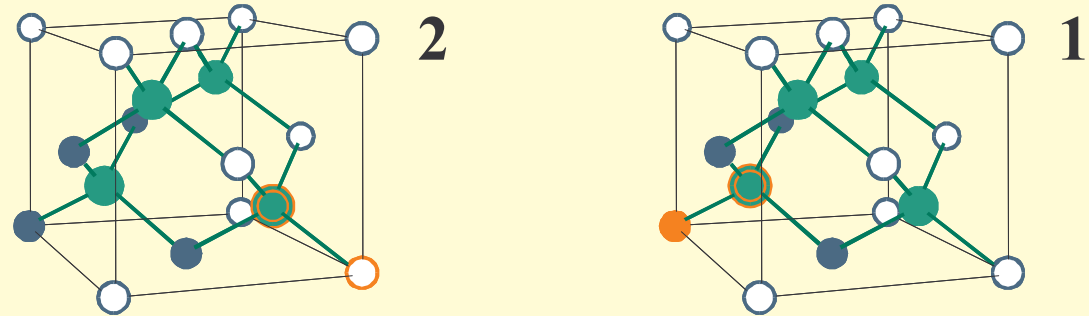
Teoretyczna zależność całkowitego natężenia promieniowania ugiętego od koncentracji berylu



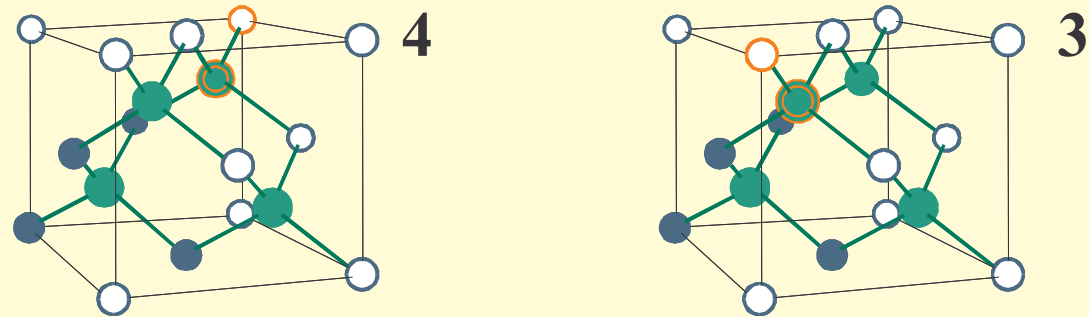
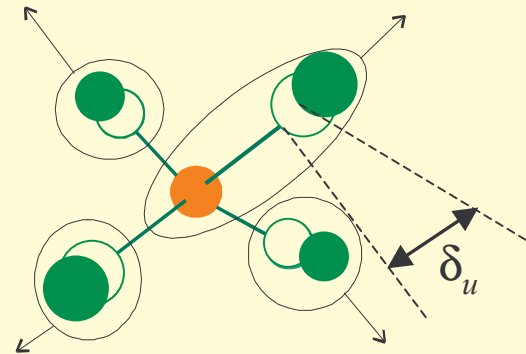
Teoretyczna zależność całkowitego natężenia promieniowania ugiętego od koncentracji manganu



Deformacja I strefy koordynacyjnej



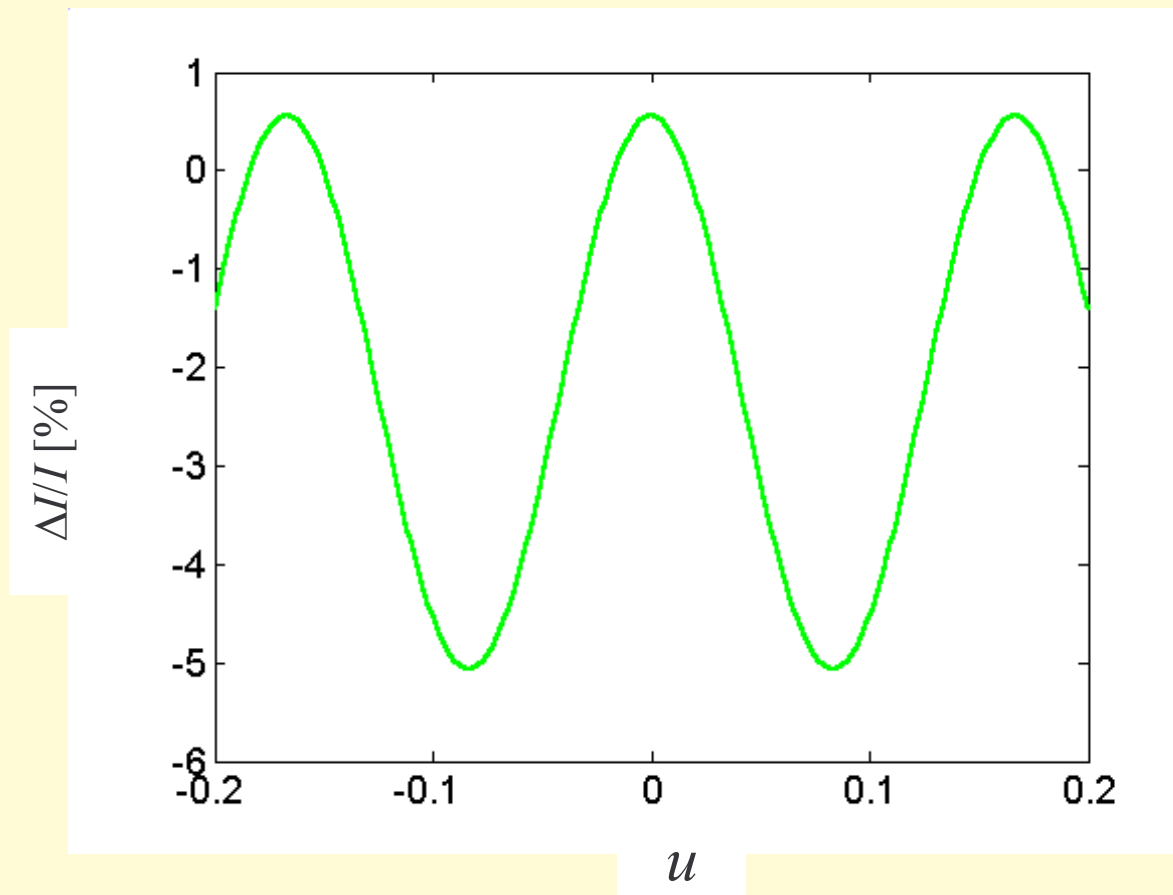
- atomy Ga ● atomy As
- atomy domieszki



$$F_{00n} = 4[f_{\text{Ga}} + (D/4N)(f_{\text{D}} - f_{\text{Ga}}) - f_{\text{As}}(1 - D/N) - (D/N)f_{\text{As}} \cos(2\pi nu)]$$

gdzie $u = d_u/(a\sqrt{3})$

Teoretyczna zależność całkowitego natężenia promieniowania ugiętego od przesunięcia atomów w I strefie koordynacyjnej



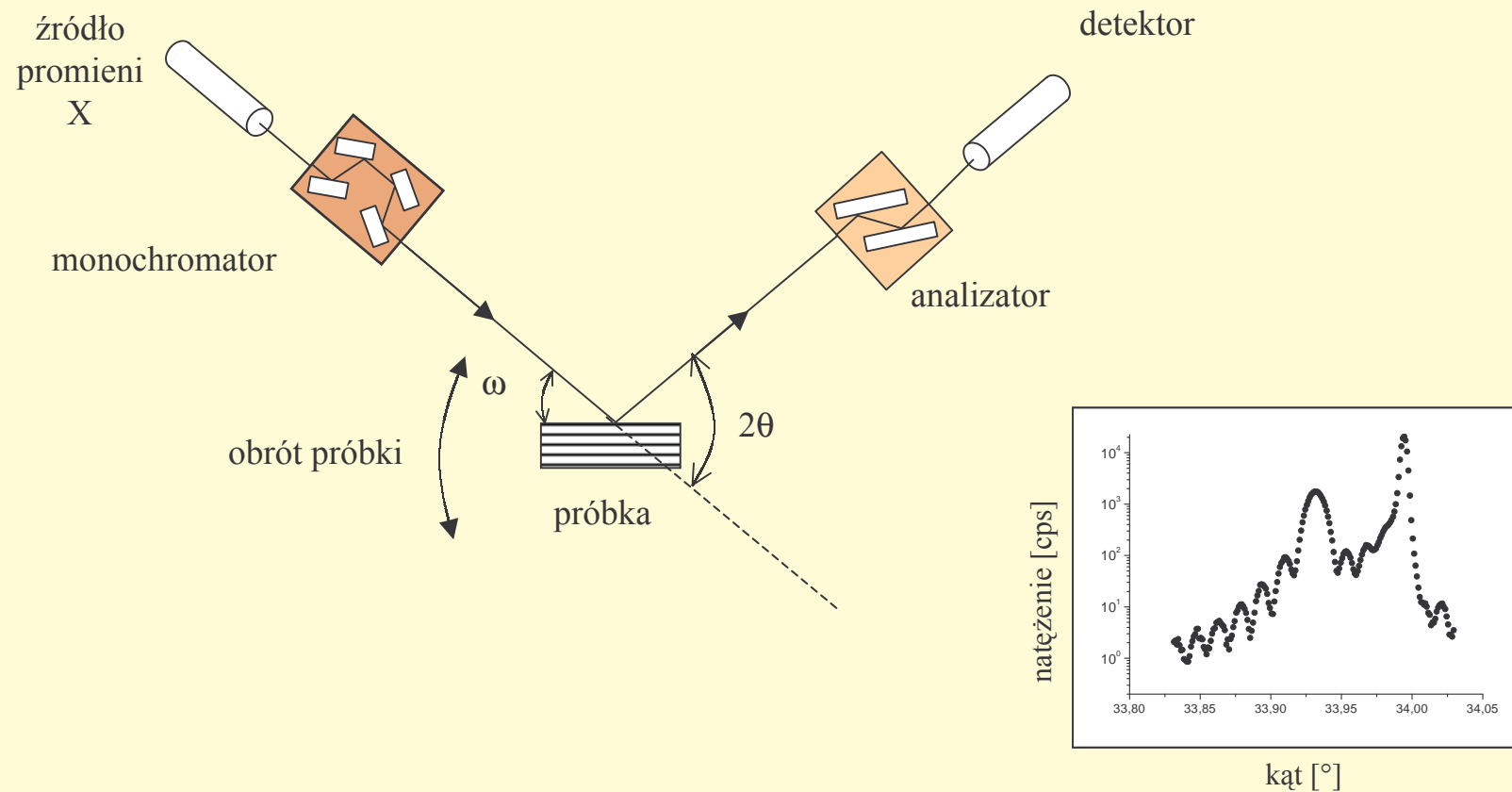
Refleks 006, $c_{\text{Be}} = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$

Plan

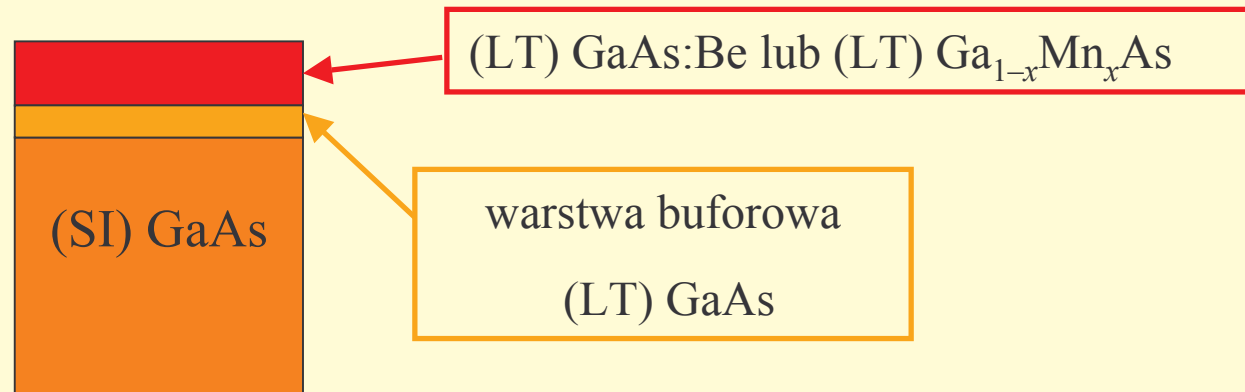
- Czynniki struktury
- Defekty punktowe
- Wpływ defektów punktowych na czynniki struktury
- Wyniki doświadczalne

Schemat dyfraktometru wysokorozdzielczego

- krzywa odbić
- krzywa odbić z analizatorem



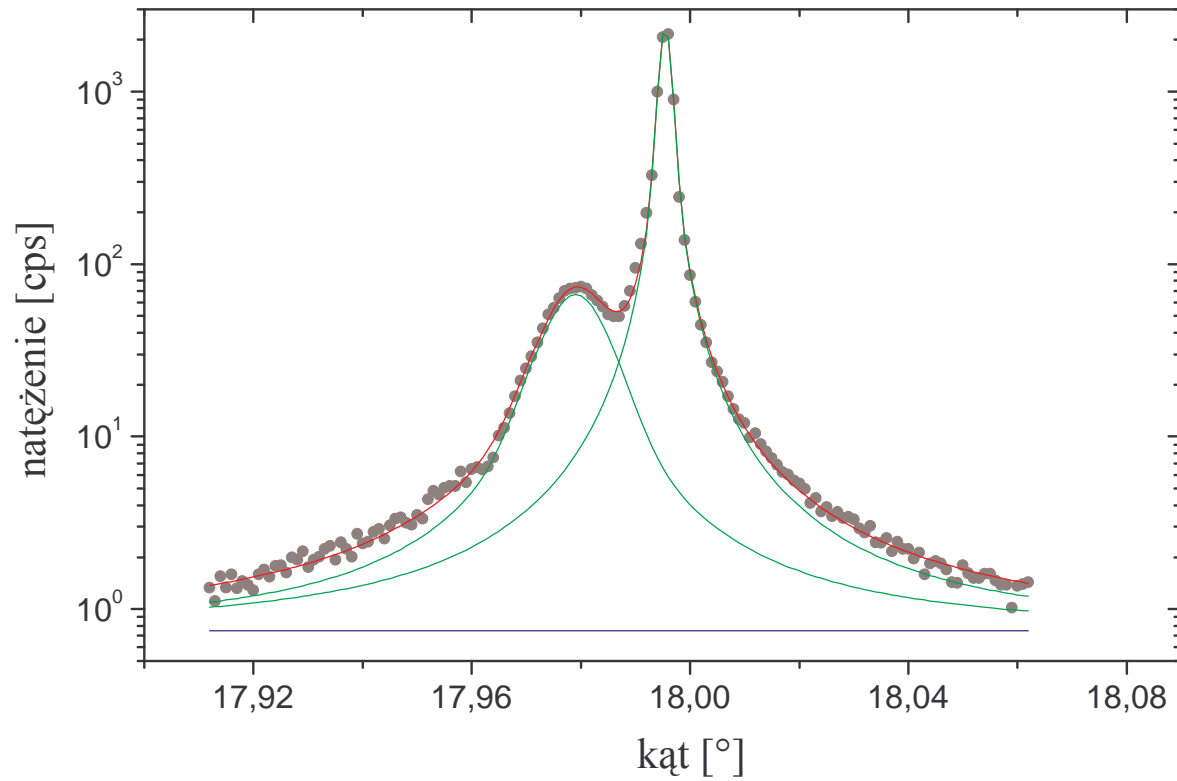
Badane próbki



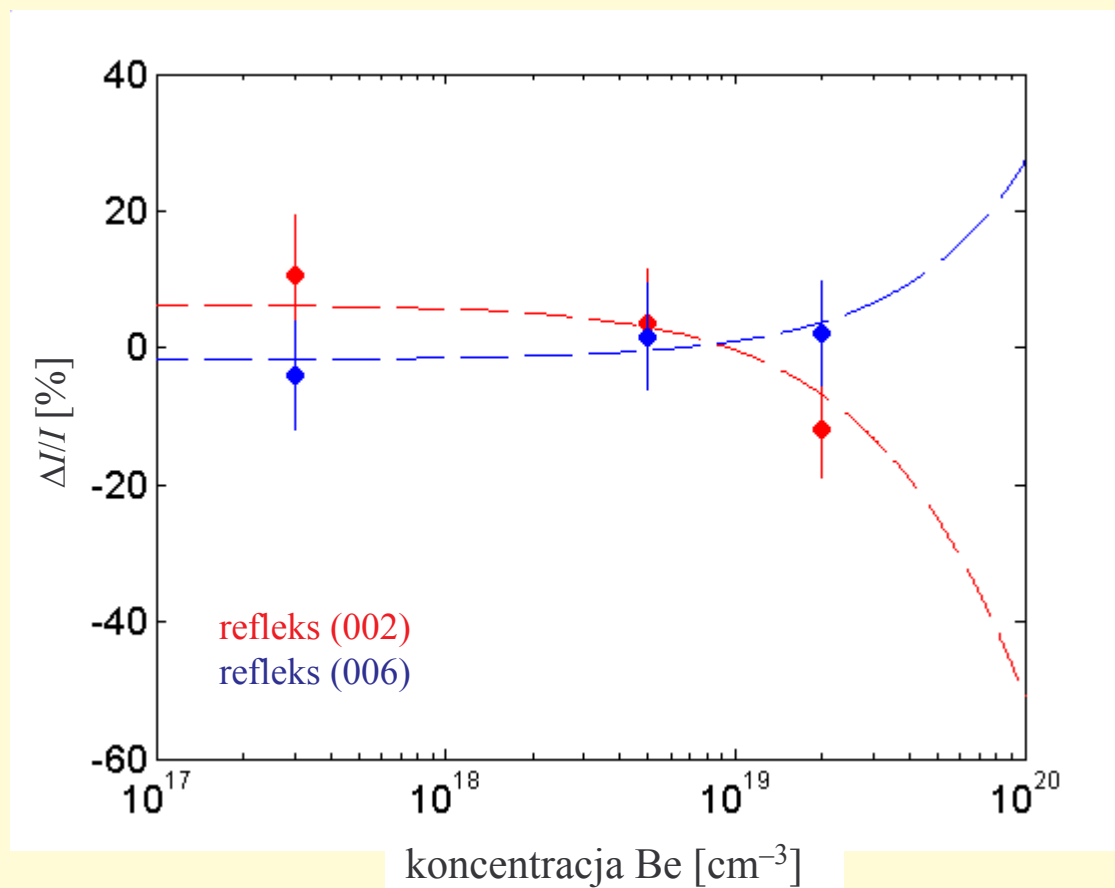
GaAs:Be
 $c_{\text{Be}} = 3 \cdot 10^{17}, 5 \cdot 10^{18}$ lub $2 \cdot 10^{19}$ [cm⁻³]

Ga_{1-x}Mn_xAs
 $x = 0,005-0,2$

Krzywa odbić dla refleksu bardzo słabego 002
kryształ $\text{Ga}_{0,992}\text{Mn}_{0,008}\text{As}$



Zależność całkowitego natężenia promieniowania ugiętego od koncentracji berylu



Be \rightarrow Ga

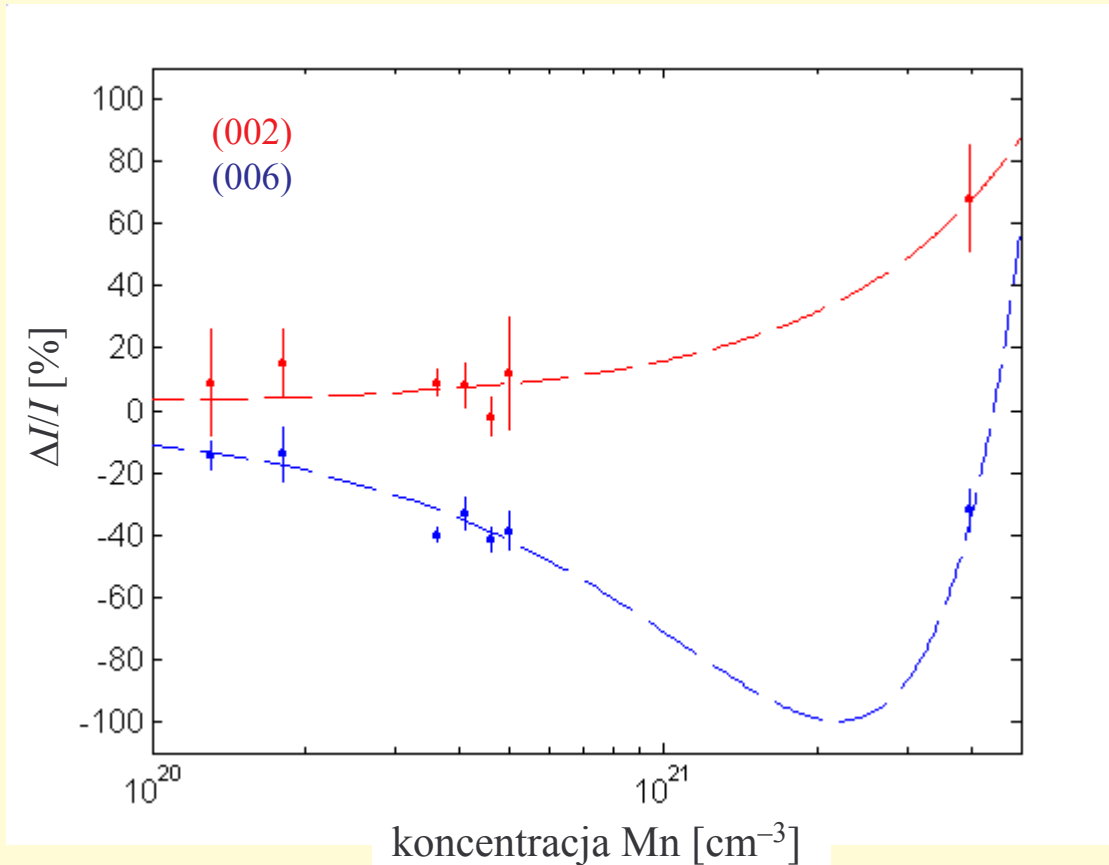
Wyznaczone koncentracje defektów:

- $\text{As}_{\text{Ga}} = 5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$,
- $\text{V}_{\text{Ga}} = 7 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$,
- $\text{As}_i = 6 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$.

Wyznaczone przesunięcia atomów:

- w I strefie $1,66 \text{ \AA}$,
- w II strefie $0,21 \text{ \AA}$,
- hantle $3,19 \text{ \AA}$.

Zależność całkowitego natężenia promieniowania ugiętego od koncentracji manganu



Wyznaczone koncentracje defektów:

- $\text{As}_{\text{Ga}} = \text{As}_{\text{Ga}}(\text{Mn})$
- $\text{V}_{\text{Ga}} = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$,
- $\text{As}_i = 8 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$,
- $\text{Mn}_{\text{Ga}} = 81\%$,
- $\text{Mn}_i = 19\%$ (położenie tetraedryczne).

Wyznaczone przesunięcia atomów:

- w I strefie $0,29 \text{ \AA}$,
- w II strefie $0,09 \text{ \AA}$,
- hantle 2 \AA .

Zalety metody

- uśrednia fluktuacje koncentracji defektów
- nieniszcząca
- nie wymagająca specjalnego przygotowania próbek