

## Nowa metoda identyfikacji typu dyslokacji na podstawie topografii rentgenowskiej Langa

Topografie rentgenowskie dostarczają danych o rozkładzie przestrzennym i gęstości defektów. Umożliwia to prowadzenie badań nad wpływem defektów na jakość materiałów półprzewodnikowych [1-10]. W pewnych zagadnieniach, gdzie bada się mechanizmy formowania się dyslokacji, ważna jest umiejętność określenia typu dyslokacji. Przez typ należy rozumieć zestaw wartości: wektor Burgersa i wektor kierunkowy dyslokacji. Poniżej podano metodę znacznie upraszczającą procedurę ustalania typu dyslokacji.

Metoda topografii rentgenowskiej Langa, dla której opracowano poniższą metodę, omawiana była w pracach [11-12].

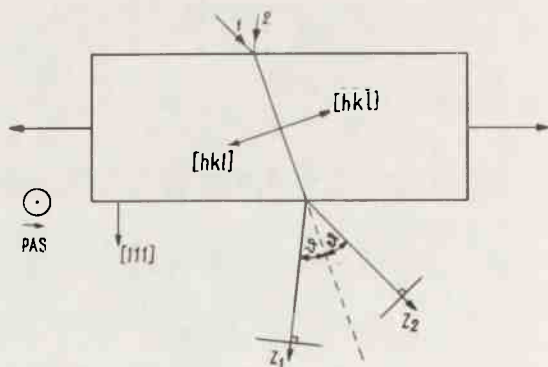
Istotną trudnością przy określaniu typu dyslokacji jest ustalenie kierunku jej osi. Na topografiach w zasadzie jedynie kierunki pionowy i poziomy nie ulegają przemieszczeniu. Jednak i w tym przypadku istnieje możliwość nałożenia się kilku kierunków krystalograficznych na osie układu odniesienia topografii.

W metodzie tej założono, że

- rozbieżność wiązki można zaniedbać

- błona fotograficzna jest ustawiona prostopadle do kierunku wiązki ugiętej.

Przyjęto, że topografie oglądane są od strony licznika i wprowadzono na nich naturalny układ odniesienia: oś X poziomo w prawo, oś Y pionowo do góry, oś Z pokrywa się z kierunkiem biegu wiązki ugiętej. W rozważaniach uwzględniono fakt, że istnieje możliwość odbić od obu stron tej samej płaszczyzny krystalograficznej.



Rys. 1. Szkic do metody wyznaczenia wektora kierunkowego osi dyslokacji. Widok z góry

Kierunek  $\vec{Z}_i$  ( $i=1,2$ ) otrzymuje się wykonując działania:

$$\vec{Z}_i = a : (\vec{PAS} \times [h,k,l]) + (-1)^{(i+1)} \cdot [h,k,l]$$

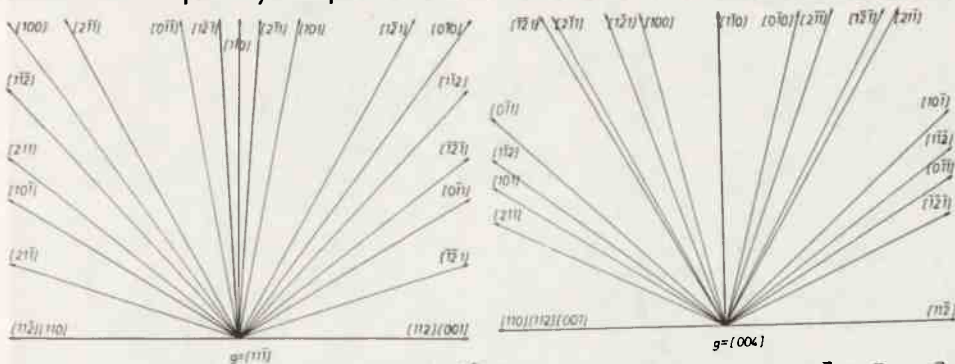
gdzie:  $\vec{PAS}$  - wektor pasa krystalograficznego refleksu  $[h,k,l]$ ,  
 $a$  - stała dobrana w ten sposób, aby kąt między wektorami  $[h,k,l]$  oraz  $\vec{S} = \vec{PAS} \times [h,k,l]$  równy był  $90^\circ$ , czyli kątowi Bragga dla danego refleksu  $h, k, l$ .

Oś  $\vec{Y}_1$  jest identyczna z  $\vec{Y}_2$ . Są to po prostu osie równoległe do  $\vec{PAS}'a$ . Natomiast kierunki osi  $\vec{X}_i$  uzyskuje się przez

$$\vec{X}_i = \vec{PAS} \times \vec{Z}_i \quad (i = 1, 2)$$

Przy wprowadzonym w ten sposób układzie odniesienia można obliczyć składowe rzutów dowolnych wektorów sieci na płaszczyznę filmu, obliczając rzuty zadanego wektora na osie  $\vec{X}_i$  oraz  $\vec{Y}_i$ .

Dla sieci krystalicznej typu diamentu Hornstra [13] podał dopuszczalne wektory osi dyslokacji. Na rys. 2 podano przykładowo zrzutowane osie dla promieniowania  $K\alpha_1$  molibdenu, monokryształu krzemu o powierzchni zorientowanej prostopadle do kierunku  $[1\ 1\ 1]$ , dla refleksów  $[1\ 1\ 1]$  i  $[0\ 0\ 4]$ . Przykładając powyższe schematy do topografii można otrzymać kierunki osi oglądanych dyslokacji. W przypadkach, gdy na podstawie jednej topografii nie można ustalić tego kierunku jednoznacznie, pomagając sobie innymi topografiami można wybrać właściwy kierunek spośród wydawałoby się przedtem równouprawnionych kierunków. Oczywiście im większa liczba topografii potwierdza jeden kierunek, tym większe prawdopodobieństwo trafnej identyfikacji.



Rys. 2. Przykłady schematów zrzutowanych osi dyslokacji z pracy [13] Si  $[1\ 1\ 1]$ , Mo  $K\alpha_1$ :  
 a/ refleks  $[1\ 1\ 1]$ , b/ refleks  $[0\ 0\ 4]$

Do obliczania powyższych rzutów napisany został program w języku FORTRAN. W celu zilustrowania metody podano dla przykładu fragmenty topografii wykonanych dla monokryształu krzemu o orientacji  $[1\ 1\ 1]$ , dla promieniowania  $K\alpha_1$  molibdenu i  $K\alpha_1$  srebra. Na każdym zdjęciu w prawym dolnym rogu oznaczono wektor dyfrakcji  $g = h, k, l$ , w lewym dolnym rogu opis orientacji płytki Si, tzw. pionowo w górę kierunek pasa krystalograficznego refleksu i kierunek do

niego prostopadły leżący w płaszczyźnie próbki. Pozostałe kierunki zaznaczone na topografii - to odczytane ze schematów prawdopodobne kierunki osi dyslokacji znajdującej się na każdym zdjęciu w centrum.

Ze zdjęć wyraźnie widać, że jedynym powtarzającym się na wszystkich topografiach kierunkiem jest  $\vec{l} = [2\ 1\ \bar{1}]$ . Uwzględniając ponadto, że dla refleksów  $Ag\ [\bar{1}\ \bar{1}\ 1]$  i  $Mo\ [0\ 0\ 4]$  dyslokacja była niewidoczna, łatwo stwierdzić, że wektor Burgersa badanej dyslokacji  $\vec{b} = \frac{1}{2} [1\ \bar{1}\ 0]$ . Wynik ten uzyskano porównując

wartości  $(\vec{g} \cdot \vec{b})z$  kontrastem dyslokacji dla danego refleksu  $\vec{g}$ . Ponieważ badana dyslokacja jest dyslokacją mieszaną [13], pomocniczo porównywano także wartości  $\vec{g} \cdot (\vec{b} \times \vec{l})$ , podane wyrażenia opisujące kontrast wywołany obecnością dyslokacji w kryształach pochodzą z pracy [15]. Dyslokacje o płaszczyźnie poślizgu  $[1\ 1\ \bar{3}]$ , jak ta zidentyfikowana powyżej, obserwowano już na transmisyjnym mikroskopie elektronowym [14].

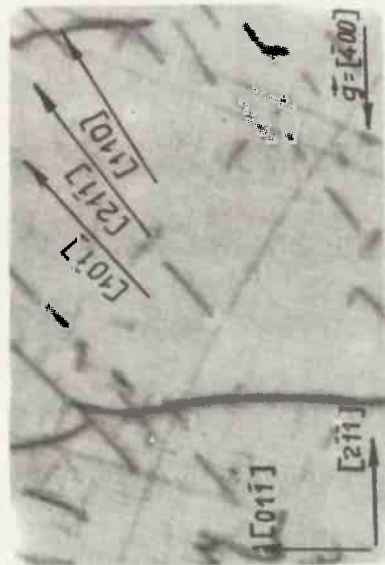
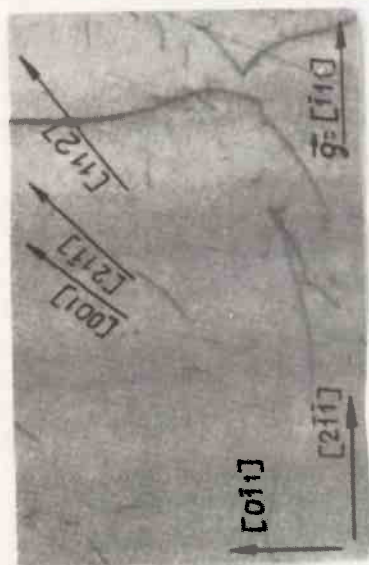
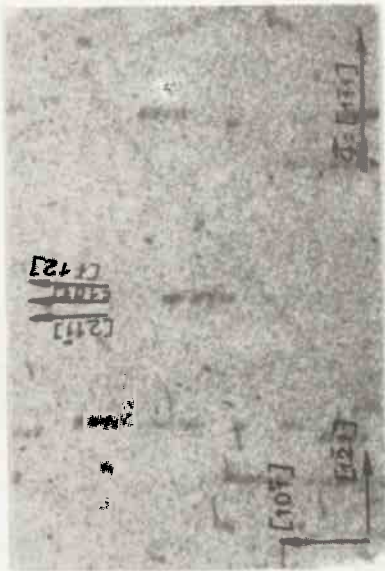
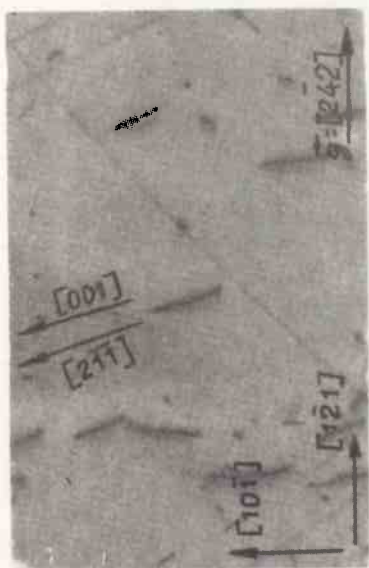
Powyższa metoda może być stosowana dla innych monokryształów, innych orientacji, a nawet dla potrzeb mikroskopii elektronowej.

Dane doświadczalne dla przetestowania metody dostarczył mgr Jerzy Gronkowski, odbitki zaś wykonał Pan Jerzy Bondziul; autor serdecznie im dziękuje za okazaną pomoc.

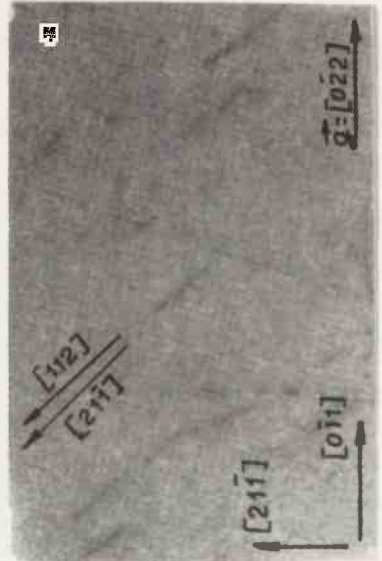
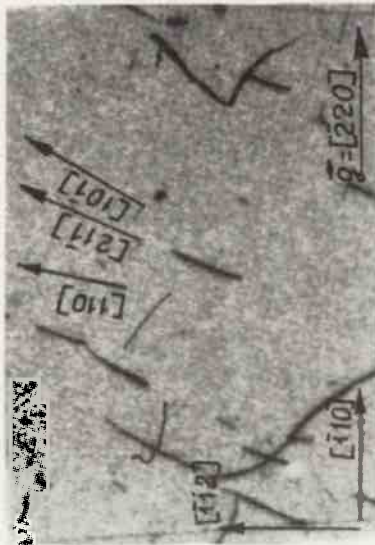
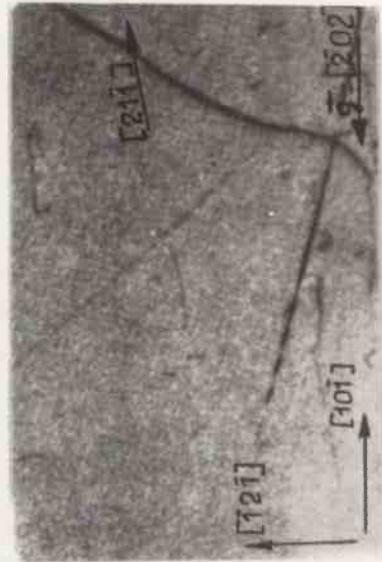
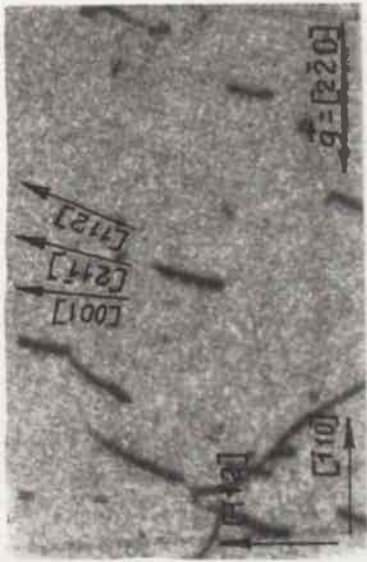
W załączniku 1 przedstawiono program zastosowany w tej pracy do obliczeń.

#### Literatura

1. Goetzberger A. i in.: J. Appl. Phys. 34, 1591, 1963
2. John H.E.: Prac. IEEE 55, 1249, 1967
3. Jungbluth E.D. i in.: J. Appl. Phys. 36, 1967, 1965
4. Lawrence I.E.: J. Electrochem. Soc. 113, 819, 1966
5. Russell L.K. i in.: J. Electrochem. Soc. 114, 277, 1967
6. Goetzberger A. i in.: J. Appl. Phys. 34, 1821, 1969
7. Queisser H.J.: Solid State Electr. 5, 1, 1962
8. Duffy M.C. i in.: J. Electrochem. Soc. 115, 84, 1968
9. Queisser H.J. i in.: Phil. Mag. 8, 1063, 1963
10. Barson F. i in.: J. Electrochem. Soc. 111, 1263, 1964
11. Lang A.R.: Acta Met. 5, 358 /1957/; tenże - J. Appl. Phys. 30, 1798, 1958; tenże - Acta Cryst. 12, 249, 1959; tenże - Brit. J. Appl. Phys. 14, 904, 1963; tenże - Z. Natur. 20a, 636, 1965
12. Jenkinson A. E.: Philips Techn. Rev. 23, 82, 1961
13. Hornstro J.: J. Phys. Chem. Solids 5, 123, 1958
14. Wójcik M.: /informacja prywatna/
15. Sugita Y. i in.: J. Appl. Phys. 40, 3089, 1969



Rys. 3. Przykładowe topografie: a-c) promieniowanie Mo K $\alpha_1$ , d-h) promieniowanie Ag K $\alpha_1$



Rys. 3. Przykładowe topografie: a-c) promieniowanie  $Mo K\alpha_1$ , d) promieniowanie  $Ag K\alpha_1$

## ZAŁĄCZNIK 1

```

REAL LAMB1,LAMB2,K,L,KM,LM
DIMENSION H(4),K(4),L(4),U(21),V(21),W(21)
READ 1, ASI,LAMB1,LAMB2,PI
READ 2,H
READ 2,K
READ 2,L
READ 3,U
1 FORMAT (F7.4,3(F8.5))
2 FORMAT (4F3.0)
3 FORMAT (21F3.0)
4 FORMAT (1X,5X,2(F8.6,3X),2X,2(3 F3.0,1X), 4X,2(F6.3,2X),3X,C3
(F3.0,1X),3F3.0)
5 FORMAT (1X,45X,2(F6.3,2X,3X,3(F3.0,1X),4X,2(F6.3,2X)
6 FORMAT (1X,7X,5HTETA1,6X,5HTETA2,7X,1HH,3X,1HK,3X,1HL,9X,1HX,
7X,C1HY,8X,1HU,3X,1HV,3X,1HW,9X,1HX,7X,1HY,7X,2H-H,2X,2H-K,
2X,2H-L,C3X,1HP,2X,1HA,2X,1HS)
7 FORMAT (1X,2X,2(2I3,F6.2),19X,2(F6.3,2X),3X,3(F3.0,1X),4X,C2
(F6.3,2X))
DO 102 I=1,4
PRINT 6
IF (H(I)-K(I)) 1001, 1000, 1001
1000 CONTINUE
P=1
A=-1
S=0
GO TO 1002
1001 CONTINUE
P=-0.5*H(I)
A=P
S=H(I)
1002 CONTINUE
COT1=SQRT(((2*ASI/LAMB1)**2/(H(I)**2+K(I)**2+L(I)**2)-1)

```



```

Z=ATAN(1/COT1)
Z1=180/PI*Z
KAT1=INT(Z1)
MNT1=INT ( 60 *(Z1-FLOAT(KAT1)))
SEK1=3600*(Z1-FLOAT(KAT1) -FLOAT(MNT1) /60)
COT2=SQRT ( 2*ASI/LAMB2)**2/ ( H(1)**2+K(1)**2+L(1)**2 -1)
COT2=ATAN(1/COT2)
Z1=180/PI*COT2
KAT2=INT(Z1)
MNT2=INT(60 *(Z1-FLOAT(KAT2)))
SEK2=3600 *(Z1-FLOAT(KAT2) -FLOAT(MNT2)/60)
CALL WEKTOR ( P,A,S,H(1),K(1),L(1),A1,A2,A3 )
CALL NORMA ( H(1),K(1),L(1),A5)
CALL NORMA(A1,A2,A3,A4)
B=A1*A5/A4 *COT1+H(1)
C=A2*A5/A4*COT1+K(1)
D=A3*A5/A4 *COT1+L(1)
B1=B-2*H(1)
C1=C-2*K(1)
D1=D-2*L(1)
DO 103 J=1,21
CALL SKALAR (U(J),V(J),W(J),P,A,S,A6)
CALL NORMA (P,A,S,A7)
T=A6/A7
CALL WEKTOR ( P,A,S,B,C,D,A8,A9,A10)
CALL SKALAR (U(J),V(J),W(J),A8,A9,A10,A11)
CALL NORMA ( A8,A9,A10,A12 )
Q1=A11/A12
CALL WEKTOR(P,A,S,B1,C1,D1,A8,A9,A10)
CALL SKALAR (U(J),V(J),W(J),A8,A9,A10,A11)
CALL NORMA A8,A9,A10,A12
Q2=A11/A12
HM=-H(1)

```

```

KM=-K(I)
LM=-L(1)
IF ( J-1 ) 100,101,100
101 CONTINUE
PRINT 4,Z,COT2,H(1),K(1),L(1),Q1,T,U(1),V(1),W(1),Q2,T,HM,KM,LM,
CP,A,S
GO TO 103
100 CONTINUE
IF ( J-2 ) 107,108,107
108 CONTINUE
PRINT 7,KAT1, MNT1,SEK1,KAT2,MNT2,SEK2,Q1,T,U(2),V(2),W(2),Q2,T
GO TO 103
107 CONTINUE
PRINT 5,Q1,T,U(J),V(J),W(J),Q2,T
103 CONTINUE
102 CONTINUE
STOP
END
SUBROUTINE NORMA (A,B,C,D)
D=SQRT ( A**2+B**2+C**2 )
RETURN
END
SUBROUTINE SKALAR (A,B,C,D,E,F,G)
G=A*D+B*E+C*F
RETURN
END
SUBROUTINE WEKTOR ( A,B,C,D,E,F,G,H,R)
G=B*F-C*E
H=C*D-A*F
R=A*E-B*D
RETURN
END

```