

Электроннографическое исследование параметров ближнего порядка в аморфных пленках $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_2\text{S}_4$

© Э.Ш. Гаджиев, А.И. Мададзаде

Институт физики Азербайджанской национальной академии наук
Az1143 Баку, Азербайджан

(Получена 8 августа 2007 г. Принята к печати 4 сентября 2007 г.)

Получена кривая интенсивности рассеяния электронов в зависимости от угла рассеяния для аморфных пленок $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_2\text{S}_4$. Построена кривая радиального распределения атомов. Определены радиусы координационных сфер и парциальные координационные числа атомов в $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_2\text{S}_4$.

PACS: 61.43.Dq

1. Введение

Интенсивное развитие современной электроники на базе микроминиатюризации вызвано использованием тонкопленочных систем. Разработка научных основ технологии получения тонких пленок со стабильными заданными свойствами требует исследования структуры вещества, процессов фазообразования и фазовых превращений.

Данная работа посвящена изучению структур ближнего порядка в аморфных пленках $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_2\text{S}_4$. Исследуемые соединения относятся к новому классу аморфных материалов и являются перспективными для использования в различных приборах, в том числе в акустооптике [1–3].

2. Экспериментальная часть

Аморфные пленки $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_2\text{S}_4$ толщиной ~ 30 нм были получены путем термического испарения монокристаллического $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_2\text{S}_4$ из специально сделанных печей из вольфрам-рениевого сплава в вакууме при остаточном давлении $\sim 10^{-5}$ Па. Дозированное содержание примеси Sm в соединениях составляло 0.2%. В качестве подложек использовались свежесколотые кристаллы NaCl, KCl, а также аморфный целлюлоид, находящиеся при комнатной температуре. Скорость осаждения пленок была ~ 10 нм/с. Полученные аморфные пленки стабильны при комнатной температуре и кристаллизуются при температуре $T = 548$ К. Кристаллизация аморфных пленок показала идентичность состава аморфных и кристаллических пленок. Структура ближнего порядка в пленках $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_2\text{S}_4$ изучалась методом дифракции быстрых электронов (напряжение 75 кВ) с применением вращающегося вектора, что позволило выявить максимумы дифракционного отражения в дальнеугловой области. На кривой интенсивности рассеяния электронов в зависимости от угла рассеяния $I(s)$, где $s = 4\pi \sin \theta / \lambda$, θ — угол рассеяния, λ — длина волны электронов, наблюдаются 7 максимумов при $s = 11.0, 20.0, 34.0, 54.0, 72.0, 91.0, 108.0$ нм $^{-1}$ (рис. 1).

3. Результаты и их обсуждение

Для определения структуры аморфных пленок был использован метод радиального распределения атомов. Кривые радиального распределения атомов (КРРА) для аморфных соединений построены нами на основе известной формулы [4]

$$4\pi r^2 \sum_i \sum_j c_i k_i k_j \rho_{ij}(r) = 4\pi r^2 \rho_0 \left(\sum_i c_i k_i \right)^2 + \frac{2r}{\pi} a \int_0^s s [\alpha(s) - 1] \sin sr ds. \quad (1)$$

Здесь $\rho_{ij}(r)$ — парциальная функция радиального распределения атомной плотности атомов j -го сорта вокруг атомов i -го, r — расстояние, a — нормирующий множитель, $\alpha(s)$ — структурный фактор. Коэффициенты c_i в (1) учитывают относительное содержание атомов элементов, входящих в химическую формулу исследуемого соединения. Относительные рассеивающие способности атомов каждого химического элемента k_i определялись по формуле

$$k_i = \frac{k(s)}{\sqrt{\sum_{i=1}^3 c_i f_i^2(s)}}, \quad (2)$$

где $f_i(s)$ — атомный фактор рассеяния i -го элемента. Средняя атомная плотность ρ_0 исследуемых аморфных пленок вычислена нами по формуле

$$\rho_0 = \frac{\rho N_A}{\sum_i c_i A_i}, \quad (3)$$

где ρ — плотность кристаллического вещества в г/см 3 , A_i — атомные массы элементов, входящих в химическую формулу, $N_A = 6 \cdot 10^{23}$ моль $^{-1}$ — число Авогадро. Нормирующий множитель a для перехода от относительных единиц интенсивности к абсолютным, определенный нами по средней атомной плотности, оказался равным $a = 0.196$ для $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_2\text{S}_4$. Средняя атомная плот-

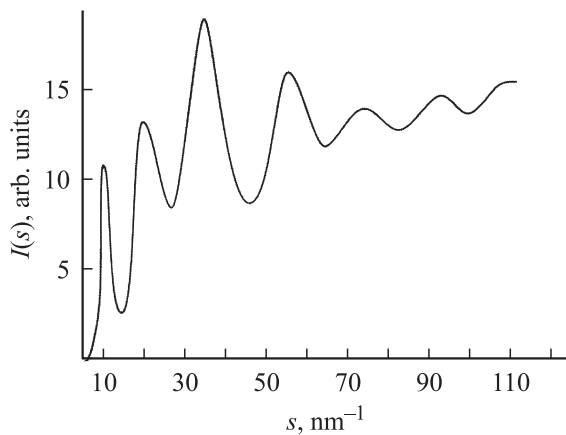


Рис. 1. Кривая интенсивности рассеяния электронов для аморфных пленок $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_2\text{S}_4$.

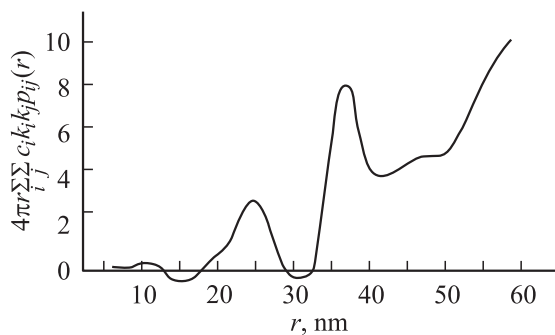


Рис. 2. Кривая радиального распределения атомов $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_2\text{S}_4$.

ность, вычисленная по (3), равна $\rho_0 = 0.339 \text{ нм}^{-1}$. Для рассеивающих способностей иттербия, мышьяка и серы получено: $k_{\text{Yb}} = 1.89$, $k_{\text{As}} = 1.03$, $k_{\text{S}} = 0.59$. На основе полученной экспериментальной интенсивности по формуле (1) была рассчитана и построена КРПА (рис. 2). Из КРПА были определены радиусы 1-й и 2-й координационных сфер, которые равны 0.244 и 0.372 нм соответственно. Уменьшение радиусов координационных сфер в $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_2\text{S}_4$ по сравнению с аморфным YbAs_2S_4 связано, по-видимому, с влиянием атомов Sm [5]. Первый координационный максимум на КРПА аморфного $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_2\text{S}_4$ отражает расстояние As–S, причем атомы мышьяка и серы соединены ковалентной связью. Это следует из того факта, что сумма ковалентных радиусов мышьяка и серы $r_{\text{As}} + r_{\text{S}} = 0.121 + 0.117 = 0.238 \text{ нм}$ близка к значению радиуса первой координационной сферы ($r_1 = 0.244 \text{ нм}$). Ионы Yb^{2+} в структуре аморфного $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_2\text{S}_4$ находятся во второй координационной сфере атомов мышьяка и являются ближайшими соседями атомов серы. Об этом свидетельствует близость суммы радиусов первой координационной сферы и иона Yb^{2+} ($r_1 + r_{\text{Yb}} = 0.244 + 0.107 = 0.351 \text{ нм}$) к значению радиуса второй координационной сферы ($r_2 = 0.372 \text{ нм}$). Парциальные координационные числа определялись ис-

ходя из формулы

$$\sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 c_i k_i k_j n_{ij} = Q, \quad (4)$$

где n_{ij} — число атомов сорта j вокруг одного атома сорта i ($i = 1-3$, $j = 1-3$). Индексом 1 обозначены атомы Yb, 2 — атомы As, 3 — атомы S.

Из площади под первым и вторым координационными максимумами на КРПА аморфного $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_2\text{S}_4$ определены парциальные координационные числа в первой во второй координационных сферах атомов мышьяка в аморфном $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_2\text{S}_4$: $n_{12} = 3$, $n_{13} = 0$, $n_{21} = 2$, $n_{23} = 4$, $n_{31} = 0$, $n_{32} = 1$, $n_{11} = n_{22} = n_{33} = 0$.

4. Заключение

Установлено, что при вакуумном осаждении монокристаллического $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_2\text{S}_4$ на подложки NaCl, KCl и на аморфный целлюлоид, находящиеся при комнатной температуре, получаются аморфные пленки. Определены радиусы координационных сфер и парциальные координационные числа атомов в полученных аморфных пленках. Показано, что атомы примеси Sm изменяют значения радиусов координационных сфер YbAs_2S_4 : радиусы первой и второй координационных сфер $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_2\text{S}_4$ уменьшаются по сравнению с YbAs_2S_4 .

Авторы приносят благодарность Д.И. Исмаилову за ценные замечания.

Список литературы

- [1] И.В. Золотухин. *Физические свойства аморфных металлических материалов* (М., Металлургия, 1986).
- [2] П.Г. Рустамов, О.М. Алиев, Т.Х. Курбанов. *Тройные халькогениды редкоземельных элементов* (Баку, Элм, 1981).
- [3] В.И. Балакший, В.И. Парыгин, Л.Е. Чирков. *Физические основы акустооптики* (М., Радио и связь, 1985).
- [4] А.Ф. Скрышевски. *Структурный анализ жидкостей и аморфных тел* (М., Высш. шк., 1980).
- [5] T.G. Efendiyev, E.Sh. Hajiyev. In: *XXV Int. Conf. on Physics of Semicond.* (Osaka, Japan, 2000).

Редактор Л.В. Шаронова

Electron diffraction study of the short-range order parameters in amorphous $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_2\text{S}_4$ films

E.Sh. Hajiyev, A.I. Madadzadeh

Institute of Physics,
Azerbaijan National Academy of Sciences,
Az1143 Baku, Azerbaijan

Abstract Electron scattering intensity curve from amorphous $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_2\text{S}_4$ films has been obtained by electron diffraction method depending on the scattering angle. Atom radial distribution curve has been plotted. The radii of coordination spheres and the partial coordination numbers of atoms have been determined in $\text{Yb}_{1-x}\text{Sm}_x\text{As}_2\text{S}_4$.