



## Session V, Tuesday, June 19

L18

### DEFECT STUDY IN EPITAXIAL SiGe GRADED MICROCRYSTALS

M. Meduňa<sup>1</sup>, F. Isa<sup>2,3</sup>, A. Jung<sup>2,3</sup>, C.V. Falub<sup>2</sup>, A. Marzegalli<sup>4</sup>, M. Albani<sup>4</sup>, G. Isella<sup>5</sup>, K. Zweiacker, L. Miglio<sup>4</sup>, H. von Känel<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Department of Condensed Matter Physics & CEITEC, Masaryk University, Brno, Czech Republic

<sup>2</sup>Laboratory for Solid State Physics, ETH-Zürich, Zürich, Switzerland

<sup>3</sup>Electron Microscopy Center, Empa, Dübendorf, Switzerland

<sup>4</sup>NESS, Department of Materials Science, Università di Milano-Bicocca, Milano, Italy,

<sup>5</sup>L-NESS, Department of Physics, Politecnico di Milano, Como, Italy

<sup>6</sup>Center for X-ray Analytics, Empa, Dübendorf, Switzerland

mjme@physics.muni.cz

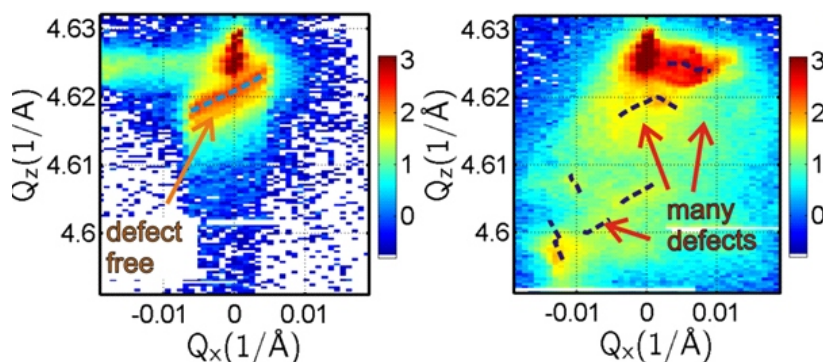
The defect free growth of various high-performance semiconductors on Si has been of high interest for many years. For Ge on Si, the mismatch of lattice (4.2 %) and thermal expansion coefficients (120.4 % at 300 K) leads to misfit dislocations (MDs) accompanied by threading dislocations (TDs) for layer thicknesses under critical value. Dislocations are a serious problem, since they negatively influence the performance of the devices. The thermal mismatch can even induce cracks in continuous heteroepitaxial layers depending on the growth temperature. These obstacles can be overcome by the heteroepitaxial growth on substrates patterned into a regular array of pillars at high aspect ratios [1] which eliminate the threading dislocation and cracks using the fast growth at out-of-equilibrium conditions. A very slow grading of Ge content in SiGe alloy from bottom of pillars up to their top [2] can eliminate the misfit dislocations. According to theory [3] a slow grading and a small base of the grown pillar can significantly eliminate misfit dislocations in highly mismatched, compositionally graded SiGe/Si heterostructures and this has been confirmed by our studies [2, 4].

In this work we focus on compositionally graded heteroepitaxial SiGe microcrystals with different base size grown at grading rates from 1.5 to 6%  $\mu\text{m}^{-1}$ . The microcrystals graded from 0 to 40% of Ge were investigated by a scanning X-ray nanodiffraction experiments performed at the ID01 beamline of the ESRF in Grenoble. Additionally the constant composition Ge microcrystals were measured with a standard high resolution X-ray diffraction in laboratory as well.

Using 3D reciprocal space mapping and scanning X-ray diffraction microscopy together on the compositionally graded microstructures [5], we were able to reconstruct the microcrystal shape and lattice tilt inside individual microcrystals as 3D distribution [4]. We have found that in compositionally graded SiGe microcrystals the crystal lattice relaxes by convex bending since the misfit strain dominates [4] however in constant composition Ge microcrystals the lattice bending is concave due to pure thermal strain [6]. After a detailed analysis we could resolve formation of some crystal defects within the graded crystal growth according to crystal size and grading rate, see Figure 1, especially at the crystal bottom close to SiGe/Si interface.

We acknowledge the staff of the ID01 beamline at the ESRF, Grenoble, of the FIRST Center for Micro- and Nanoscience of ETH Zürich, and of EMEZ electron microscopy ETH Zürich.

1. C.V. Falub, H. von Känel, F. Isa, R. Bergamaschini, A. Marzegalli, D. Chrastina, G. Isella, E. Müller, P. Niedermann, L. Miglio, *Science*, **335**, (2012), 1330.
2. F. Isa, M. Salvalaglio, Y.A.R. Dasilva, M. Meduňa, M. Barget, A. Jung, T. Kreiliger, G. Isella, R. Erni, F. Pezzoli, E. Bonera, P. Niedermann, P. Gröning, F. Montalenti, and H. von Känel, *Adv. Mater.* **28**, (2016), 884.
3. M. Salvalaglio and F. Montalenti, *J. Appl. Phys.*, **116**, (2014), 104306.



**Figure 1.** Example of details of the reciprocal space maps recorded close to the Si substrate peak close to the bottom of the crystal. (left) Pure elasticity is observed in the SiGe crystal with 2  $\times$  2  $\mu\text{m}$  base, (right) random plastic lattice bending is viewed as many irregular splits of the SiGe peak in the fast graded SiGe crystal.

4. M. Meduňa, F. Isa, A. Jung, A. Marzegalli, M. Albani, G. Isella, K. Zwiackner, L. Miglio, H. von Känel, J. Appl. Cryst., **51**, (2018), 368.
5. F. Isa, A. Jung, M. Salvalaglio, Y. A. R. Dasilva, I. Marozau, M. Meduňa, M. Barget, A. Marzegalli, G. Isella, R. Erni, F. Pezzoli, E. Bonera, P. Niedermann, O. Sereda, P. Gröning, F. Montalenti, and H. von Känel, Materials Science in Semiconductor Processing **70**, (2017) 117.
6. M. Meduňa, C.V. Falub, F. Isa, A. Marzegalli, D. Chrastina, G. Isella, L. Miglio, A. Dommann, and H. von Känel, J. Appl. Cryst., **49**, (2016) 976.

L19

## XRD determination of L21 and B2 phases contents in Ni<sub>2</sub>MnGa and Co<sub>2</sub>FeGe<sub>0.5</sub>Ga<sub>0.5</sub> alloys

### URČOVÁNÍ OBSAHU L21 A B2 FÁZÍ V HEUSLEROVÝCH SLITINÁCH Ni<sub>2</sub>MnGa AND Co<sub>2</sub>FeGe<sub>0.5</sub>Ga<sub>0.5</sub> POMOCÍ RENTGENOVÉ DIFRAKCE

Petr Cejpek, Daniel Král, Elen Duverger-Nédellec, Lukáš Horák, Václav Holý

*Katedra fyziky kondenzovaných látek, Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy, 121 16 Praha 2, Ke Karlovu 5*

Ni<sub>2</sub>MnGa a Co<sub>2</sub>FeGe<sub>0.5</sub>Ga<sub>0.5</sub> jsou Heuslerovy slitiny s velkým aplikačním potenciálem. Ni<sub>2</sub>MnGa je slitina s tvarovou pamětí, která se používá pro mikropumpy [1] nebo aktuátory [2] a Co<sub>2</sub>FeGe<sub>0.5</sub>Ga<sub>0.5</sub> má potenciál ve spintronice [3]. Jejich vlastnosti, které jsou klíčové pro aplikace, jsou spojeny s nízkoteplotní fází L2<sub>1</sub>, vysokoteplotní fáze B2 je pro aplikační účely nežádoucí. Uvážme-li obecný chemický vzorec pro Heuslerovu slitinu jako X<sub>2</sub>YZ, pak se pro B2 fázi prvky Y a Z mísí na svých pozicích v elementární buňce a tyto pozice začínou být ekvivalentní, což vede k vyšší symetrii. Přítomnost B2 fáze lze pozorovat například na *as cast* vzorcích, které nebyly dále žihány.

Tento příspěvek prezentuje stanovení obsahu L2<sub>1</sub> fáze pomocí rentgenové difrakce. Díky symetrii bychom pro L2<sub>1</sub> fázi měli pozorovat jen ty difrakce, které mají všechny indexy sudé nebo liché (*fcc* vyhasínací podmínka). Vyšší symetrie B2 fáze (kterou popíšeme stejně velkou elementární buňkou) vede k vyhasnutí difrakcí, které mají všechny indexy liché. Výpočet strukturních faktorů ukazuje, že difrakce se všemi indexy sudými zůstávají stejné v obou fázích. Poměr integrálních intenzit, které odpovídají difrakcím se všemi indexy lichými a všemi indexy sudými, by tak měl prokázat objemové zastoupení L2<sub>1</sub> fáze ve vzorku. Nicméně, celá problematika je více komplikovaná, nebo je nezbytné započítat všechny úhlově závislé korekce, jako je polarizace záření, Lorentzova

korekce, absorpce, ozářený objem a primární a sekundární extinkce.

Výsledky ukazují, že tato procedura funguje dobře na tenkých vrstvách a monokrystalech s malou mosaicitou. Pokud je mosaicita moc velká, komplikuje započítání korekcí – konkrétně korekce na ozářený objem a extinkci – protože je nejasné, jak velký objem z kterého zrna byl zrovna ozářen. Extinkční korekce je pak spojená s velikostí a rozorientací mozaikových bloků a tyto parametry musíme většinou odhadnout. Nicméně je například jasné vidět, že dobře provedené žihání může výrazně zvýšit obsah L2<sub>1</sub> fáze, protože celková intenzita citlivých difrakcí (všechny indexy liché) po žihání vzrostla (difrakce měřeny ve stejném experimentálním uspořádání ve všech případech).

1. A. R. Smith, A. Saren, J. Järvinen, K. Ullakko, *Characterization of a high-resolution solid-state micropump that can be integrated into microfluidic systems*, Microfluidics and Nanofluidics (2015) 18:1255–1263, doi: 10.1007/s10404-014-1524-6.
2. A. Hobza, C. L. Patrick, K. Ullakko, N. Rafla, P. Lindquist, P. Müllner, *Sensing strain with Ni-Mn-Ga*, Sensors and Actuators A **269** (2018) 137–144, doi: 10.1016/j.sna.2017.11.002.
3. Appl. Phys. Lett. **108**, 062401 (2016); doi: 10.1063/1.4941549.



L20

### Breaking bulks and binding powders in Fe-Al-Si system

## ROZBÍJENÍ BULKŮ A SPOJOVÁNÍ PRÁŠKŮ V SYSTÉMU Fe-Al-Si

J. Kopeček<sup>1</sup>, J. Remiášová<sup>1</sup>, L. Klimša<sup>1</sup>, P. Haušild<sup>2</sup>, M. Karlík<sup>2</sup>, F. Průša<sup>3</sup>,  
K. Novák<sup>3</sup>, P. Novák<sup>3</sup>, J. Šesták<sup>3</sup>, B. Severa<sup>3</sup>, F. Laufek<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Department of Functional Materials, Institute of Physics of the CAS, Prague, Czech Republic

<sup>2</sup>Department of Materials, Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague, Czech Republic

<sup>3</sup>Dep. Metals and Corrosion Engineering, Univ. of Chemistry and Technology Prague, Prague, Czech Rep.

<sup>4</sup>Czech Geological Survey, Prague, Czech Republic

Systém Fe-Al-Si je zajímavý materiál se slibnými korozními vlastnostmi. Jeho složky jsou laciné i dostupné, či ještě do nedávných politických šarvátek na mezinárodní scéně byly. Problémem konvenční přípravy takových materiálů jako i jiných vícesložkových směsí tvořících intermetalika, je velikost zrna a distribuce jednotlivých fází. V našem výzkumu jsme se rozhodli tento problém obejít práškovou metalurgií – spékáním metodou spark plasma sintering (SPS). Tak jsme se vyhnuli i přípravě homogenní předslitiny a jejímu napráškování, nebo v metodě SPS využíváme směs prášků čistých prvků. Cenou tohoto postupu je jemnozrná struktura s neznámým, a jak se nakonec ukázalo, i těžko zjistitelným složením.

Zatímco druhá část názvu přednášky tedy odkazuje k technice SPS samotné, první ukazuje na metodologický

úrok ke konvenčně, obloukovým tavením připraveným, referenčním slitinám, jež byly zkoumány pomocí XRD ve formě prášků, aby pak mohly být tyto fáze nalezeny v oblévaných slitinách pomocí metody difrakce zpětně odražených elektronů (EBSD), letos devadesátileté. Takto ověřené strukturní modely, typické změnami mřížovými parametry i stechiometrií oproti tabelovaným strukturám pak byly využity i k potvrzení struktury vzorků připravených metodou SPS z prášků. Příkladně je použita slitina Fe - 20 wt. % Al - 20 wt. % Si.

*Tato práce byla podporována projekty MEYS CR FUNBIO CZ.2.16/3.1.00/21568 (nákup SEM), LO1409 a LM 2015088 (provoz SEM) and GA ČR 17-07559S.*

## Session VII, Wednesday, June 20

L21

### Cambridge structure database of organic and organometallic compounds in 2018

## CAMBRIDGESKÁ STRUKTURNÍ DATABÁZE ORGANICKÝCH A ORGANOMETALICKÝCH SLOUČENIN V ROCE 2018

J. Hašek

Biotechnologický ústav AV ČR, Průmyslová 595, 252 50 Vestec, hasekj@seznam.cz

Nekomerční zájemci v České republice, kteří jsou členy konzorcia CSD organizovaného Krystalografickou společností ([https://www.xray.cz/xray/csca/data/r\\_form.htm](https://www.xray.cz/xray/csca/data/r_form.htm)), mají k dispozici Cambridgeskou strukturní databázi nepřetržitě již 45 let (od roku 1973). Licence placená Krystalografickou společností je platná pouze pro akademické uživatele. Komerční organizace si musí licenci vyžádat přímo na stránce <https://www.ccdc.cam.ac.uk>.

V současné době databáze CSD obsahuje téměř milion experimentálně stanovených organických a organometalických struktur a je doplněna rozsáhlým softwarovým vybavením užitečným nejen pro krystalografy ale i pro chemiky, biology, fyziky a pracovníky různých technologických oborů.

**Chemici** tento software využívají pro návrh a optimalizaci nových molekul, objasnění jejich funkce, některých chemických reakcí a k analýze krystalových struktur.

**Materiálová věda** jej účinně využívá pro návrh nových materiálů a optimalizaci jejich vlastností.

Strukturní biologové jej využívají pro pochopení funkce proteinů, pro analýzu vztahů uvnitř systémů biomolekul a interakcí mezi ligandy a bio-makromolekulami.

**Farmakologie a biochemie** využívá CSD k návrhu a optimalizaci léčiv.

Základem systému CSD jsou uživatelsky příjemné vyhledávací a prohlížečské programy **ConQuest** a **MERCURY**. Základ CSD je doplněn dalším softwarem směřovaným do materiálového výzkumu, k řešení struktur z práškových dat. Dále je doplněn znalostními databázemi