

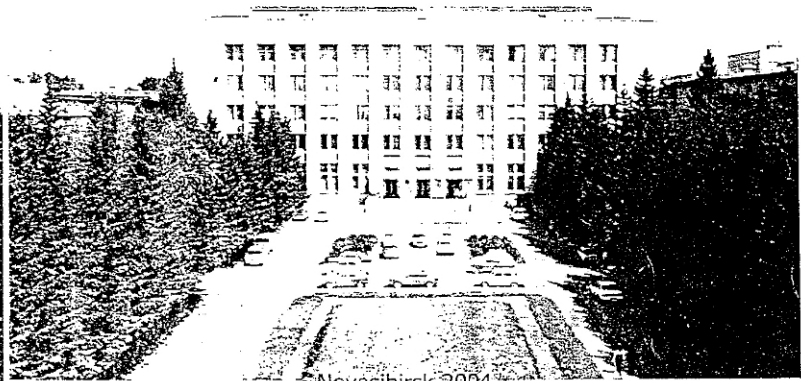
BUDKER INSTITUTE of NUCLEAR PHYSICS SB RAS  
SIBERIAN SYNCHROTRON RADIATION CENTER



# DIGEST REPORTS OF THE XV INTERNATIONAL SYNCHROTRON RADIATION CONFERENCE

July 19-23, 2004, Novosibirsk, Russia

Supported by:  
International Science & Technology Center (ISTC)  
Ministry of Science and Education of Russian Federation  
Russian Foundation For Basic Research (RFBR)  
ZAO RTI



Novosibirsk 2004

# СТРУКТУРА $\text{CdGeAs}_2$ - I, $\text{Cd}_{0.94}\text{Mn}_{0.06}\text{GeAs}_2$ - II

Г.С.Юрьев<sup>1</sup>, С.Ф.Маренкин<sup>2</sup>, А.Н.Генцелев<sup>3</sup>, А.В.Косов<sup>3</sup>, С.Г.Михайлов<sup>2</sup>, С.А.Варнавский<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ИНХ СО РАН, Новосибирск, <sup>2</sup>ИОНХ РАН, Москва, <sup>3</sup>ИЯФ СО РАН, Новосибирск

Дифракцией синхротронного излучения изучена структура  $\text{CdGeAs}_2$  полупроводника, обладающего высокими нелинейнооптическими свойствами [1].

Экспериментальные дифракционные картины снимались с образцов, приготовленных из монокристаллов, полученных направленной кристаллизацией расплава по методу Бриджмена, и регистрировались на дифрактометре  $\theta$ - $2\theta$  высокого разрешения с монохроматизацией ( $\Delta\lambda/\lambda = 4 \times 10^{-4}$ ) падающего и дифрагированного излучений (см. рис.1). Дифрактометр работает в автоматическом режиме [2], установлен на втором канале ускорителя-накопителя на встречных электрон-позитронных пучках - ВЭПП-3, ИЯФ СО РАН, Новосибирск. При регистрации картин дифрагируемое излучение мониторируется каждую секунду на падающее излучение.

Теоретические дифракционные картины рассчитывались на основании программы Pс.exe [3] с известными [4-6] параметрами кристаллической решетки и координатами атомов в элементарной ячейке (см. рис.2). На рис.1 представлены экспериментальные и рассчитанные дифракционные картины соединений I и II.

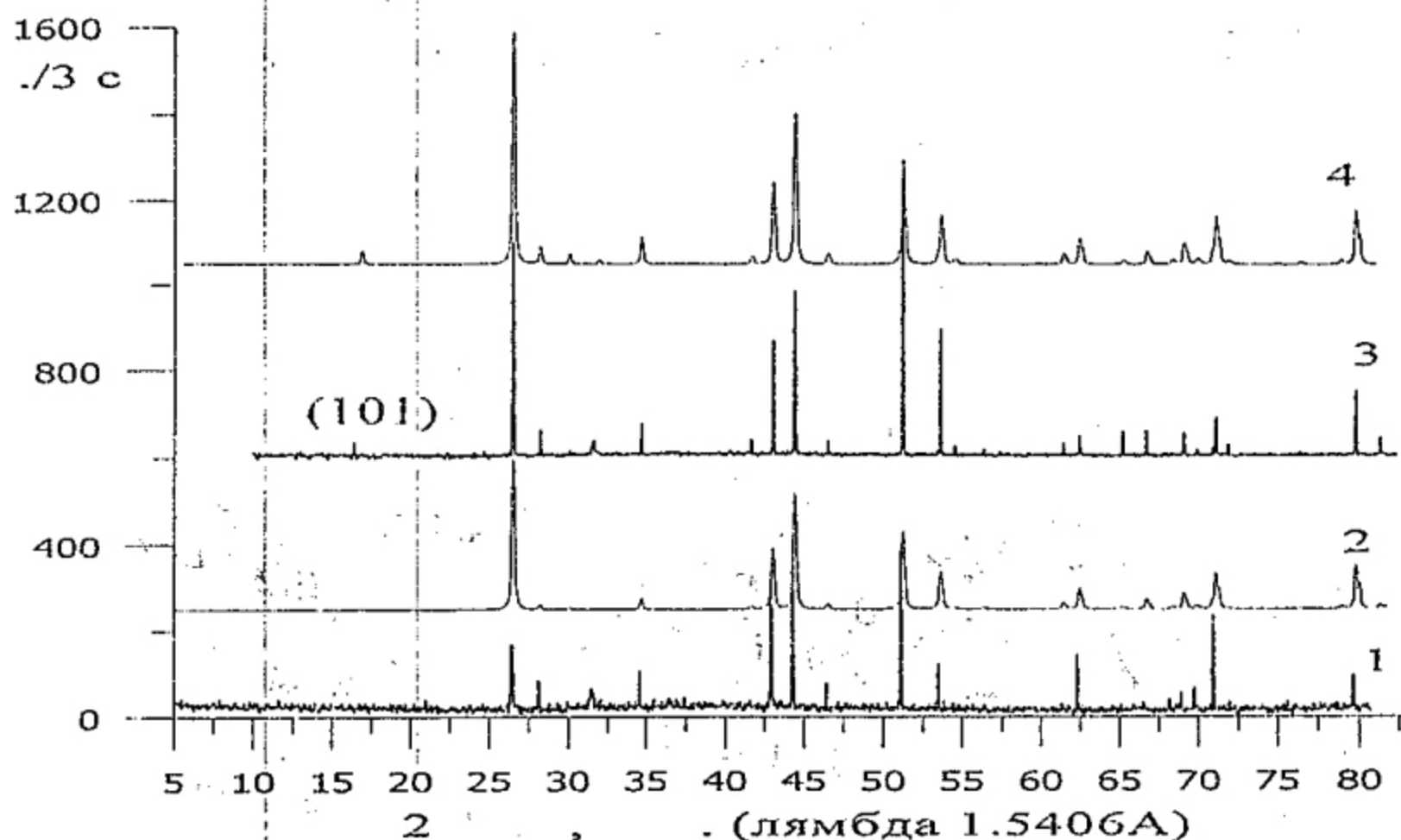


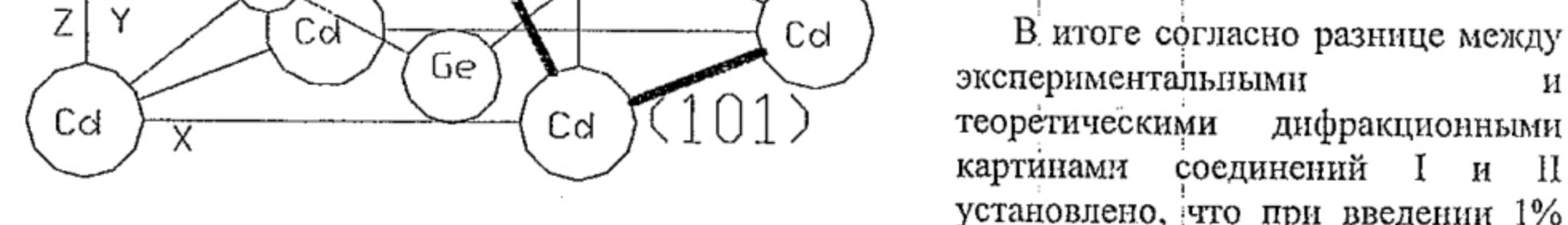
Рис.1. Дифракционные картины образцов  $\text{CdGeAs}_2$  - I,  $\text{Cd}_{0.94}\text{Mn}_{0.06}\text{GeAs}_2$  - II. Картины 1, 3 - экспериментальные картины образцов I и II. 2 - Теоретически рассчитанная картина образца I с параметрами [4]. 3 - Теоретически рассчитанная картина образца II с параметрами [4] и рассеивающей способностью атомов Cd равной рассеивающей способности ( $0.94\text{Cd} + 0.06\text{Mn}$ ).

Согласно экспериментальным дифракционным картинам (см.рис.1) соединений I и II разница между картинами представлена как более высокой интенсивностью отражений соединения II по сравнению с аналогичными отражениями соединения I, так и относительно

высокой интенсивностью отражения (101), которая практически отсутствует в соединении I.

Согласно рассчитанным дифракционным картинам (см.рис.1) соединений I и II разница между картинами, получена аналогичной экспериментальными картинами. При этом картина соединения II рассчитана с заменой 6 мол% рассеивающей способности атома Cd на 6 мол% рассеивающей способности атома Mn, т.е. рассеивающая способность атома Cd представлена как (94 мол% Cd + 6 мол% Mn.).

Рис.2. Схема элементарной ячейки  $\text{CdGeAs}_2$  согласно параметрам решетки и координатам атомов в элементарной ячейке [4]. Выделена кристаллографическая плоскость (101), в которой вероятно может находиться атом Mn.



атомов Mn в структуру образца I, атом Mn замещает в элементарной ячейке (см.рис.2) атом Cd (0.5, 0.5, 0.5) в кристаллографической плоскости (101) и обеспечивают соответствующее повышение интенсивности отражений кристаллографических плоскостей образца II, включающих атом с координатой (0.5, 0.5, 0.5).

- [1] В.Ю.Рудь и др. ФТП. 1999, Т.33, №11, С.1320-1322.
- [2] Г.С.Юрьев, А.Д.Шапоренко. Материалы «Рентгенография и кристаллохимия минералов». 15 Межд.совещ. 5-19.09.03. СПб-ГТУ, С.369-371.
- [3] W.Kraus, G.Nolze. Powder Cell for Windows, Version2.3 ([http://www.bam.de/a\\_v/v\\_1/powder/e\\_cell.html](http://www.bam.de/a_v/v_1/powder/e_cell.html)).
- [4] V.H.Pfister. Acta Crystallogr. 1958, No11, P.221-224.
- [5] А.А.Вайполин. ФТТ. 1973, Т.15, С.1430-1435.
- [6] С.Ф. Маренкин, Н.М. Новоторцев, С.Г.Михайлов, К.К. Палкина, В.Т. Калинин, Неорган. мат. 2004, Т.40, № 2, С. 135-137

Юрьев Геннадий Степанович, 630090 Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 3, yurjev@csd.inp.nsk.su