СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Минакова И. И., Назаров В. И., Панов В. И. Деп. ВИНИТИ № 1805—82. М., 1982. [2] Панов В. И., Станков П. Р.//Радиотехн. и электроника. 1986. 31, № 1. С. 213—216. [3] Абрамов А. А., Царапкин Д. П.//Стабилизация частоты и прецизионная радиотехника (ВИМИ). М., 1983. Ч. 1. С. 28—32. [4] Зубиетов П. И., Минакова И. И., Минина Г. П., Панов В. И.//Изв. вузов, сер. Радиоэлектроника. 1981. 24, № 7. С. 29—33. [5] Лебединский С. А., Минакова И. И., Назаров В. И.//Радиотехн. и электроника. 1985. 3, № 1. С. 94—101.

Поступила в редакцию
17.03.86

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1986. Т. 27, № 6

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 539.26:548.53

УЧЕТ ИСКАЖЕНИЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ВБЛИЗИ ПОВЕРХНОСТИ В ТЕОРИИ СКОЛЬЗЯЩЕЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ

М. А. Андреева

(кафедра физики твердого тела)

Дифракция в скользящей геометрии — новый метод исследования нарушений в тонких поверхностных слоях кристаллов [1]. Теория скользящей дифракции развита только для простейших случаев идеального кристалла и идеального кристалла с аморфной или кристаллической пленкой. Развитая в настоящей работе теория позволяет рассматривать произвольные профили изменения параметров среды вблизи поверхности.

В [2] получена система линейных дифференциальных уравнений для тангенциальных компонент электрического и магнитного полей блоховских волн, являющаяся обобщением уравнений Такаги на случай дифракции в условиях полного отражения:

$$\frac{d}{dz}\begin{pmatrix} \mathbf{H}_{1t} \\ [\mathbf{qE}_1] \\ \mathbf{H}_{2t} \\ [\mathbf{qE}_2] \end{pmatrix} = ik \begin{pmatrix} -n_1 I & (1+\chi_0)I-\mathbf{b}_1\cdot\mathbf{b}_1 & 0 & \chi_{\bar h} I \\ I-\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{a}_1(1-\chi_0) & -n_1 I & \chi_{\bar h}\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{a}_2 & 0 \\ 0 & \chi_h I & -n_2 I & (1+\chi_0)I-\mathbf{b}_2\cdot\mathbf{b}_2 \\ \chi_h \mathbf{a}_2\cdot\mathbf{a}_1 & 0 & I-\mathbf{a}_2\cdot\mathbf{a}_2(1-\chi_0) & -n_2 I \end{pmatrix} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{1t} \\ [\mathbf{qE}_1] \\ \mathbf{H}_{2t} \\ [\mathbf{qE}_2] \end{pmatrix}, \qquad (1)$$

где $\mathbf{q}$ — единичный вектор нормали к поверхности (оси z), $\mathbf{H}_{it}=I\mathbf{H}$, $I=1-\mathbf{q}\cdot\mathbf{q}$; индексы 1, 2 относятся к проходящей и дифрагированной волнам соответственно; $\chi_{0,h,\bar h}$ — фурье-компоненты восприимчивости; $\mathbf{b}_{1,2}$ — тангенциальные компоненты волновых векторов (в единицах ω/c); $\mathbf{a}_i=[\mathbf{b}_i\mathbf{q}]$; $n_1=\sin\vartheta_1$, ϑ_1 — угол скольжения падающей волны, $n_2=\sin\vartheta_1+(\boldsymbol{\tau}\mathbf{q})$, $\boldsymbol{\tau}$ — вектор обратной решетки (в единицах ω/c). Точка между векторами в (1) обозначает их внешнее произведение (диаду).

Система из восьми дифференциальных уравнений (1) описывает как взаимодействие проходящей и дифрагированной волн, так и преобразование поляризации. Разделение собственных поляризаций в (1) возможно непосредственно, только когда падающая, зеркально отраженная и дифрагированные волны лежат в одной плоскости. При дифракции в скользящей геометрии собственные поляризации граничной и дифракционной задач не совпадают; однако эффект «зацепления» ортогональной поляризации мал [3], поэтому для случая скользящей дифракции имеет смысл «расцепить» в системе (1) π- и σ-поляризации приближенно. Пренебрегая для собственных векторов $\mathbf{H}_{it}$ и $[\mathbf{qE}_i]$ проекциями $\mathbf{b}_i$ в случае σ-поляризации (а в случае π-поляризации проекциями на $\mathbf{a}_i$) и расписывая (1) в базисе $\mathbf{a}_i$, $\mathbf{b}_i$ ($i=1$ для первых четырех строк и столбцов, $i=2$ для остальных), получаем для σ-поляризации приближенную систему четырех уравнений:

$$\frac{d}{dz}\begin{pmatrix} |\mathbf{H}_{1t}| \\ |[\mathbf{qE}_1]| \\ |\mathbf{H}_{2t}| \\ |[\mathbf{qE}_2]| \end{pmatrix} = ik \begin{pmatrix} -n_1 & 1 & 0 & 0 \\ 1-\mathbf{b}_1^2+\chi_0 & -n_1 & \chi_{\bar h} & 0 \\ 0 & 0 & -n_2 & 1 \\ \chi_h & 0 & 1-\mathbf{b}_2^2+\chi_0 & -n_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\mathbf{H}_{1t}| \\ |[\mathbf{qE}_1]| \\ |\mathbf{H}_{2t}| \\ |[\mathbf{qE}_2]| \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Аналогичную систему получаем для π-поляризации (с заменой $\chi_{h,\bar h}$ на $\chi_{h,\bar h}\cos 2\vartheta_Б$, где $\vartheta_Б$ — угол Брэгга, и $\mathbf{H}\rightleftarrows\mathbf{E}$, причем вторая замена несущественна для конечного результата).

Для решения граничной задачи в случае полубесконечного кристалла с нарушенным поверхностным слоем необходимо ввести связь между амплитудами поля проходящей и дифрагированной волн в идеальной части кристалла:

$$\begin{pmatrix} |\mathbf{H}_{2t}| \\ |[\mathbf{qE}_2]| \end{pmatrix} = X \begin{pmatrix} |\mathbf{H}_{1t}| \\ |[\mathbf{qE}_1]| \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Матрицу связи X несложно найти, переходя к собственным волнам:

$$X = \frac{1}{\xi^{(1)}-\xi^{(2)}} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} (\xi^{(1)}+n_1)\,x^{(2)}-(\xi^{(2)}+n_1)\,x^{(1)} & x^{(1)}-x^{(2)} \\ (\xi^{(1)}+n_1)(\xi^{(2)}+n_2)\,x^{(2)}-(\xi^{(2)}+n_1)(\xi^{(1)}+n_2)\,x^{(1)} & (\xi^{(1)}+n_2)\,x^{(1)}-(\xi^{(2)}+n_2)\,x^{(2)} \end{pmatrix}, \quad (4)$$

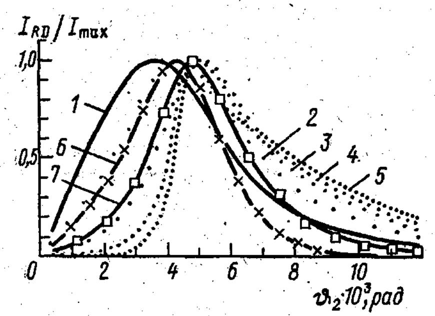
где $\xi^{(1,2)}$ — собственные значения матрицы распространения, соответствующие двум проходящим собственным волнам, $x^{(i)}$ — дифракционное отношение:

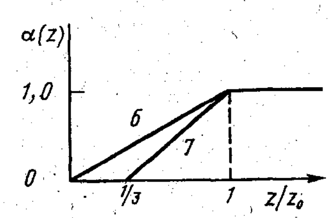
$$x^{(i)} = -(1-(k^{(i)}/k)^2+\chi_0)/\chi_{\bar h},\ i=1,2.$$

Формальное решение задачи может быть представлено в виде

$$\begin{pmatrix} H_R \\ H_{RD} \end{pmatrix} = \left[\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ \sin\vartheta_1 & 0 \end{pmatrix} + (l_1+l_2X)(l_3+l_4X)^{-1}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & -\sin\vartheta_2 \end{pmatrix}\right]^{-1}\begin{pmatrix} 1 \\ \sin\vartheta_1 \end{pmatrix} H_0, \quad (5)$$

где $\begin{pmatrix} l_1 & l_2 \\ l_3 & l_4 \end{pmatrix} = L^{-1}(z_0)$ —мультипликативный интеграл, определяющий решение (2) в нарушенной части кристалла (l_1, l_2, l_3, l_4 — 2×2 блоки матрицы L^{-1}), H_0, H_R и





Нормированные дифференциальные кривые рентгеновской дифракции в условиях полного отражения (РД ПВО) для идеального кристалла (*1*), кристалла с аморфной пленкой толщиной 50 (*2*), 100 (*3*), 150 (*4*), 200 Å (*5*) и для двух моделей постепенного изменения $\chi_{h\bar h}$ в поверхностном слое ($z_0=150$ Å), схематически изображенных справа (*6* и *7*); $\vartheta_1=0{,}004$ рад

* Для сокращения времени счета мультипликативного интеграла имеет смысл использовать формулу «интегрирования по частям» [4].

H_{RD} — амплитуды падающей, зеркально отраженной и зеркальной дифрагированной волн соответственно; ϑ_2 — угол выхода зеркальной дифрагированной волны $\left(\sin\vartheta_2 = \sqrt{1-b_2^2}\right)$. Интенсивность зеркальной дифрагированной волны равна $I_{RD} = |H_{RD}|^2 \sin\vartheta_2/\sin\vartheta_1$.

При проведении конкретных расчетов, результаты которых представлены на рисунке (рассматривалось (2 2 0) отражение Cu K_α-излучения от кремния), для простоты полагалось $\chi_0(z) = \text{const}$, $\chi_{h,\bar{h}}(z) = \alpha(z)\chi_{h,\bar{h}}$, где действительный коэффициент изменяется от 0 до 1 в нарушенном слое («степень аморфизации»). Наличие переходного слоя между идеальной частью кристалла и аморфной пленкой приводит к сдвигу кривой скользящей дифракции в область меньших углов выхода и ее сужению.

В заключение автор выражает благодарность Я. А. Сорникову за помощь в проведении расчетов и С. А. Степанову за полезное обсуждение проблемы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Андреева М. А., Борисова С. Ф., Степанов С. А.//Поверхность. 1985. № 4. С. 5—26. [2] Andreeva M. A., Rosete C., Khapachev Yu. P.// //Phys. Stat. Sol. (a). 1985. 88. P. 455—462. [3] Андреева М. А., Борисова С. Ф.//Кристаллография. 1985. 30, № 5. С. 849—856. [4] Андреева М. А., Сорников Я. А., Хапачев Ю. П.//Тез. докл. III Всесоюз. совещ. «Когерентное взаимодействие излучения с веществом» (17—19 сент. 1985 г., г. Ужгород). М., 1985. С. 86—87.

Поступила в редакцию
07.02.86

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1986. Т. 27, № 6

УДК 621.315.592

О НЕКОТОРЫХ ОСОБЕННОСТЯХ ЗАРЯДОВЫХ СОСТОЯНИЙ КИСЛОРОДА В ВЫСОКООМНОМ АРСЕНИДЕ ГАЛЛИЯ

В. А. Морозова, В. В. Остробородова

(кафедра физики полупроводников)

Электронные параметры высокоомного GaAs часто определяют донорные (Д) уровни атомов кислорода, расположенных в узлах As(O_{As}), или атомов As в узлах Ga(As_{Ga}, центры *EL2*), отстоящие от зоны проводимости (*c*), по данным различных работ, на $\mathscr{E}_{Дc} \approx 0{,}63$—$0{,}83$ эВ [1—6]. Для правильной идентификации центров необходимо знать отличительные особенности уровней. Обычно в литературе сообщается об исследовании *n*-GaAs(O) с темновыми удельными сопротивлениями при 300 К $\rho = 10^6$—10^8 Ом·см; при этом, как правило, рассматриваются переходы электронов с O^0-центров в *c*-зону. Сведения о фотоионизации дырок в валентную (*v*) зону с O^+-центров немногочисленны [3]; именно с этими переходами мы связывали оптическое поглощение (ОП) высокоомного *p*-GaAs(Cr), когда высказывали гипотезу о том, что в области $h\nu > 0{,}75$ эВ оно определяется не хромом, а всегда присутствующими в таком материале атомами O^+ [7]. С целью проверки этой гипотезы, а также для определения энергии ионизации и температурного смещения Д-уровня О мы предприняли сравнительные исследования темновых и фотохолловских параметров, ОП, фотопроводимости (ФП) образцов GaAs(O) с разным заполнением Д-уровня электронами. Предельно высокоомные (ПВ) образцы после исключения поверхностной проводимости имели $\rho \approx 2\cdot10^9$ Ом·см и эффективную энергию ионизации в области 290—500 К $\mathscr{E}^0_{Дc} \approx 0{,}70$—$0{,}75$ эВ; при этом постоянная Холла R для $T \gg 370$ К превышала собственную R_i, т. е. была *np*-биполярна. Остальные образцы имели ρ от 10^4 («низкоомные», Н) до 10^8 («высокоомные», В) Ом·см, $R < R_i$ и $\mathscr{E}^0_{Дc} = 0{,}8$ эВ [2].

У ПВ- и В-образцов с изменением интенсивности $I = 10^{13}$—10^{15} см$^{-2}\cdot$с$^{-1}$ собственного либо примесного с $h\nu = 1{,}1$ эВ освещения величины R дважды меняли знак, и проводимость в интервале изменения $\rho, \rho^* \approx 5\cdot10^7$—$5\cdot10^4$ Ом·см определялась дырками с эффективной холловской подвижностью $\mu_p^* \lesssim 400$ см^2/(В·с) (спектры ОП и ФП записаны в этих условиях). В образцах с $\rho < 10^6$ Ом·см ФП при освещении всегда остается электронной [8].