

УДК 548.731

PACS numbers: 61.10.Dp, 61.10.Lx, 61.72.Dd, 61.72.Ff

В. П. Кладько, С. И. Олиховский*, Л. И. Даценко

Інститут фізики полупроводників НАН України
Україна, 03028 Київ-28, просп. Науки, 45

*Інститут металлофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України
Україна, 03680 Київ-142, бульв. Акад. Вернадського, 36

ВЛИЯНИЕ КУЛОНОВСКИХ ДЕФЕКТОВ И НЕСТЕХИОМЕТРИИ В GaAs НА ЭНЕРГЕТИЧЕСКУЮ ЗАВИСИМОСТЬ ХАРАКТЕРИСТИК ДИНАМИЧЕСКОЙ БРЭГГ-ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

На основе динамической теории рассеяния рентгеновских лучей реальными кристаллами получены выражения для когерентной и диффузной составляющих полной интегральной отражающей способности (ПИОС) в случае брэгг-дифракции. Полученные формулы справедливы в случае сильного поглощения, а также в условиях значительного вклада аномальной дисперсии $\chi_{ih} \gg \chi_{th}$. Проанализировано поведение интерференционного коэффициента поглощения для структурных и квазизапрещенных рефлексов (КЗР) в кристаллах GaAs. Установлена слабая чувствительность диффузного рассеяния для КЗР к дефектам кулоновского типа, что дало возможность определить параметр отклонения химического состава бинарных кристаллов от идеального при измерениях энергетических зависимостей ПИОС.

На основі динамічної теорії розсіяння рентгенівських променів реальними кристаллами одержано вирази для когерентної та дифузної складових повної інтегральної відбиваючої здатності (ПІВЗ) у випадку брэгг-дифракції. Отримані формулі справедливі у випадку сильного поглинання, а також в умовах значного вкладу аномальної дисперсії $\chi_{ih} \gg \chi_{th}$. Проаналізовано поведінку інтерференційного коефіцієнта поглинання для структурних та квазізаборонених рефлексів (КЗР) в кристалах GaAs. Встановлено слабку чутливість дифузного розсіяння для КЗР до дефектів кулонівського типу, що дало можливість визначити параметр відхилення хімічного складу бінарних кристалів від ідеального при вимірюваннях енергетичних залежностей ПІВЗ.

The formulae for the coherent and diffuse components of the X-ray total integral reflectivity (XTIR) of the Bragg-diffracted beams taking into account the anomalous dispersion phenomena are obtained on the basis of the dynamical scattering theory for actual crystals containing homogeneously distributed Coulomb defects (clusters). The obtained expressions are true for the case of strong absorption when the imaginary part of the Fourier coefficient of susceptibility exceeds the real part. The behaviour of the interference absorption coefficient for the 'structural' and quasi-forbidden reflections (QFR) is analysed for GaAs crystals with a wide region of wavelengths situated between the absorption K-edges. A weak sensitivity of diffuse scattering for the QFRs in measured energetic dependence of the XTIR to structure defects is shown that permitted us to determine the parameter describing the deviation of chemical composition of binary crystal from stoichiometric composition.

Ключевые слова: динамическая дифракция, квазизапрещенные отражения, нестехиометрия, кулоновские дефекты, когерентное и диффузное рассеяние, рентгеновские лучи.

Введение

Проблеме брэгговской дифракции рентге-

новских лучей (РЛ) в реальных кристаллах посвящен целый ряд работ [1–5]. Этот интерес вызван возможностью получать такую же

информацию о структуре кристаллов, как и в случае Лауэ, но со значительно меньшими экспериментальными затратами. В частности, в [2, 3] были рассчитаны угловые зависимости для брэгговской (когерентной) и диффузной составляющих полной интегральной отражающей способности (ПИОС), а также введены эффективные коэффициенты поглощения для типичных случаев кулоновских дефектов при различных условиях дифракции. Несмотря на детальный анализ чувствительности ПИОС к характеристикам дефектов (концентрации, протяженности полей деформации) при различных уровнях поглощения, в этих работах отсутствует обсуждение особенностей дифракции в условиях значительного влияния явления аномальной дисперсии. Это влияние может приводить к специфическим ситуациям, когда мнимая часть коэффициента Фурье поляризуемости существенно превышает действительную ($\chi_{ih} \gg \chi_m$), включая случай $\chi_{ih} = 0$, которые возникают вблизи K -краев поглощения компонентов кристалла. Первые попытки прояснить ситуацию в этой области длин волн для GaAs сделаны в [6, 7] для структурных (разрешенных) рефлексов. Однако полный теоретический анализ наблюдаемых экспериментальных данных, учитывающий особенности дефектных структур в реальном кристалле, в них отсутствует.

Как уже отмечалось в [8–11], особенно чувствительными к дефектам структуры, вызванным изменением химического состава (стехиометрии), являются квазизапрещенные рефлексы (КЗР). Эта чувствительность возрастает вблизи K -краев поглощения компонентов за счет дисперсионных поправок, особенно в области $\chi_m = 0$ [12]. Недостатком цитированных работ следует считать то обстоятельство, что в основу анализа экспериментальных результатов положена теоретическая модель, рассматривающая рассеяние РЛ как кинематическое, когда влиянием дефектов структуры I и II рода по классификации Кривоглаза при рассмотрении ПИОС можно пренебречь [13]. На возможность практической реализации этого случая для структурных рефлексов в ус-

ловиях динамической дифракции указано в [14], а для КЗР — в [15]. В [16] теоретически проанализирован случай $\chi_{ih} \gg \chi_m$ для идеального кристалла.

Цель данной работы — теоретическое и экспериментальное исследование особенностей брэгг-дифракции в условиях сильного поглощения и значительного вклада явления аномальной дисперсии, а также влияния дефектов структуры типа кулоновских центров и нестехиометрии на характер рассеяния РЛ в области K -краев поглощения GaAs с выяснением возможности определения этих характеристик из экспериментальных энергетических зависимостей ПИОС.

Теоретические основы

Компоненты фурье-разложения поляризуемости χ_h являются пропорциональными структурному фактору бинарного кристалла F_h

$$F_h = \sum c_j f_j \exp(-M_j) \exp(2\pi i h r_j);$$

$$\chi_{ih} = (e^2/mc^2)(\lambda^2/\pi V) F_{ih}; \quad \chi_m = (e^2/mc^2)(\lambda^2/\pi V) F_m; \quad (1)$$

$$\chi_h = \chi_m + i\chi_{ih}, \quad \chi_{ih} = \chi_m + i\chi''_{ih}, \quad \chi_{ih} = \chi_{ih} + i\chi'''_{ih},$$

где e^2/mc^2 — классический радиус электрона, χ_m , χ_{ih} — соответственно действительная и мнимая части поляризуемости для отражения с дифракционным вектором h , λ — длина волны РЛ, r — радиус-вектор j -го атома, c_j — атомная концентрация компонентов кристалла, M_j — температурный множитель Дебая—Валлера.

Рассмотрим сначала выражение для ИОС идеального поглощающего кристалла, которое согласно [17], можно записать в виде

$$R_{coh} = R_0 \zeta P(g_0, \kappa_0, t), \quad (2)$$

где $R_0 = (8/3) \frac{|\chi_m \chi_h|^{1/2}}{\sin 2\theta}$ — ИОС идеального не-

поглощающего кристалла, $\zeta = \sqrt{\frac{1+2s_0}{1-2s_0}}$,

$$P(g_0, \kappa_0, t) = \frac{3}{8} \int_{-\infty}^{\infty} r(g_0, \kappa_0, t, z) dz, \quad 9 — брэгговский$$

угол, а t — толщина кристалла.

Запишем в общем случае важный для ана-

лиза параметр $|\chi_{hh}| = |\psi_h|^2 (1 - \kappa_0^2 + 2ip_0)$, где действительная часть коэффициента Фурье может принимать также нулевое значение. Тут

$$|\psi_h|^2 = |\chi_{hh}|^2 + |\chi_{ih}|^2, \quad \kappa_0 = \sqrt{2} \frac{|\chi_{ih}|}{|\psi_h|},$$

$$p_0 = (\chi_{hh}\chi_{ih} + \chi_{ih}\chi_{hh})/\psi_h^2, \quad s_0 = (\chi_{hh}\chi_{ih} - \chi_{ih}\chi_{hh})/\psi_h^2;$$

$$g_0 = -|\chi_{ih}| \frac{\sqrt{b} + 1/\sqrt{b}}{2C\psi_h}, \quad b = \gamma_0/|\gamma_h|. \quad (3)$$

Здесь γ_0 и γ_h — косинусы углов, образуемых волновыми векторами падающей и рассеянной волн с внутренней нормалью к входной поверхности кристалла.

Для центросимметричного полубесконечного совершенного кристалла $R_{coh}(\Delta\vartheta)$ не зависит от толщины

$$R_{coh}(\Delta\vartheta) = \zeta(L - \sqrt{L^2 - 1}), \quad (4)$$

где $L = \frac{z^2 + g_0^2 + [(z^2 + \kappa_0^2 - g_0^2 - 1)^2 + 4(zg_0 - p_0)^2]^{1/2}}{[(1 - \kappa_0^2)^2 + 4p_0^2]^{1/2}}$,

а $z = \frac{\Delta\vartheta \sin 2\vartheta}{C\psi_h}$ определяет обобщенный безразмерный параметр отклонения дифракционных условий от положения дифракционного максимума $y = -\frac{z + ig_0}{\sqrt{1 - \kappa_0^2 + 2ip_0}}$, $\Delta\vartheta$ — угловое отклонение волнового вектора падающей волны от точного брэгговского направления.

В реальном кристалле, как известно, кроме когерентной составляющей R_{coh} появляется диффузная компонента. Обобщая, согласно [2—4], приведенные выше формулы (3), (4) на случай реального кристалла путем замены ψ_h на $\psi_h \exp(-L)$, а также χ_{ih} на $(|\chi_{ih}| + \mu_{ds}/K)$, где μ_{ds} — коэффициент дополнительных потерь энергии за счет диффузного рассеяния на дефектах, $K = 2\pi/\lambda$, можно получить когерентную составляющую рассеяния в кристаллической среде с дефектами. Тогда $g = g_0(1 + \mu_{ds}C^2/\mu_0)\exp(L)$, а $\bar{R}_{ih} = R_{ih}E$, $E = \exp(-L)$.

Анализ кривых отражения для когерентной составляющей показывает, что увеличение соотношения $|\chi_{ih}|/|\chi_{hh}|$ приводит к смещению углового положения дифракционных максимумов в сторону отрицательных значений параметра y . Изменение величины ука-

занного соотношения ощущимо при измерениях энергетической зависимости ИОС между K -краями поглощения компонентов (χ_{ih} меняется резко за счет поправок Хенля, а χ_{hh} — слабо меняется в этом интервале длин волн РЛ).

Диффузная компонента коэффициента отражения кристалла с однородно распределенными дефектами, проинтегрированная по углам выхода, может быть представлена в виде [5]

$$R_d(\Delta\vartheta) = F_{\text{diff}}(\Delta\vartheta) \frac{\mu_{ds}(k_0)\gamma_0}{2\mu(\Delta\vartheta)}, \quad (5)$$

где $\mu_{ds}(k_0) = nC^2 E^2 m_0 J_0(k_0)$, $m_0 = \pi a^3 (H|\psi_h|/\lambda)^2 / 4$, $J_0(k_0) = b_2 \ln \frac{e(k_m^2 + \mu_i^2)}{k_0^2 + \mu_i^2} + b_3 \left(\frac{k_0^2}{2k_m^2} - 1 \right)$ при $|k_0| \leq k_m$,

$$J_0(k_0) = [b_2 - (1/2)b_3] \frac{k_m^2}{k_0^2} \text{ при } |k_0| \geq k_m. \quad (6)$$

Здесь H — вектор обратной решетки, n — концентрация кулоновских дефектов, R_0 — их радиус, e — основание натурального логарифма, а $k_0 = K\Delta\vartheta \sin(2\vartheta)$, $k_m = 2\pi/R_0$ — волновые векторы. Параметры рассеяния $b_2 = B_1 + B_2 \cos^2(\vartheta/2)$, $b_3 = B_2 \cos^2 \vartheta (1 - 2 \operatorname{tg}^2 \vartheta)/2$ для модели сферических кластеров зависят от их деформационных характеристик $B_1 = 0$, $B_2 = (4\pi A_{cl}/a^3)^2$, $A_{cl} = \Gamma \varepsilon R_0^3$, $\Gamma = (1 + \nu)/[3(1 - \nu)]$, ε — параметр деформации, ν — коэффициент Пуассона.

Полученное выражение для диффузной компоненты кривой отражения содержит множители, которые описывают характерное распределение интенсивности с экстинкционным провалом в области полного внешнего отражения $|y| \leq 1$ для структурного рефлекса 400 и его отсутствие для КЗР 200 (рис. 1) в области длин волн $\lambda_K^{A_2} \leq \lambda \leq \lambda_K^{A_1}$. Такое различие в поведении углового распределения диффузного рассеяния для этих рефлексов объясняется ходом интерференционного коэффициента поглощения $\mu_i \rightarrow \mu = \frac{\mu_0}{2\gamma_0} (1 + b)/2[1 + (r/|g|)]$, который возрастает в области $|y| \leq 1$ до значения $\mu_i = \pi/\Lambda$ (рис. 2). Поскольку $\Lambda_{200} \geq \Lambda_{400}$, а $t_a \approx \Lambda_{200}$, то экстинкционный провал для КЗР отсутствует. Здесь использованы такие обозначения: $r = \sqrt{\frac{1}{2}(\sqrt{u^2 + v^2} - u)}$, $u =$

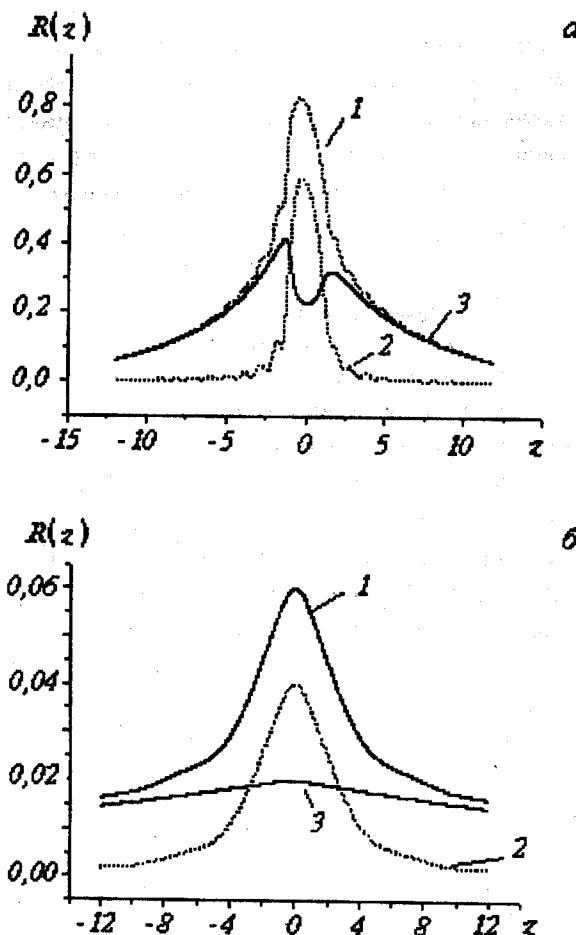


Рис. 1. Угловое распределение ИОС (1) и ее составляющих: когерентной (2) и диффузной (3) для рефлексов 400 (а) и 200 (б). Расчет приведен для значений параметров кластеров: $R_0 = 1 \text{ мкм}$, $n_0 = 3 \times 10^9 \text{ см}^{-3}$ и длины волны РЛ $\lambda = 0,1095 \text{ нм}$

$$= z^2 - g_0^2 + \kappa_0^2 - 1, v = 2(zg_0 - p_0).$$

ИОС когерентной и диффузной составляющих определялись путем интегрирования по угловой переменной $u \sim \Delta\theta$. Таким образом, приведенные выше формулы (1)–(6) позволяют количественно описывать поведение полной ИОС в широкой угловой области и для кулоновских дефектов произвольных размеров и концентраций. Выражение для ПИОС запишется в виде суммы когерентной и диффузной [5] составляющих

$$R_i = R_{coh} + R_{ID}. \quad (7)$$

В отличие от аналогичных выражений для ИОС [2, 3, 5], они позволяют рассчитывать R_i для реального кристалла и в случае, когда $\chi_m =$

= 0. Энергетические зависимости $R_i(\lambda)$ рассчитывались по формуле (7) с учетом (2) и (5), а также зависимости параметров рассеяния от длины волны и дисперсионных поправок.

Методика эксперимента

Энергетические зависимости ИОС в области длин волн между K -краями поглощения GaAs получены с помощью однокристального спектрометра ($\theta = 2\theta$ -сканирование). Система коллимирующих щелей позволяла получить спектральное окно шириной $\Delta\lambda = 0,0025 \text{ \AA}$. Учитывая распределение интенсивности в падающем пучке в зависимости от расходимости $\Delta\theta$ и ширины спектрального окна $\Delta\lambda$ излучения непрерывного спектра, можно записать выражение для ПИОС в этом случае

$$R_i = P_i / P_0, \quad (8)$$

$$\text{где } P_i = \int_{\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} d\lambda I(\lambda) \int_{-\Delta\theta}^{\Delta\theta} d(\Delta\theta) (R_{coh}(\Delta\theta) + R_{ID}(\Delta\theta)), P_0 = \int_{\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} d\lambda I(\lambda), \lambda_{min} = \lambda_0 - \frac{\Delta\lambda}{2}, \lambda_{max} = \lambda_0 + \frac{\Delta\lambda}{2}, -\Delta\theta =$$

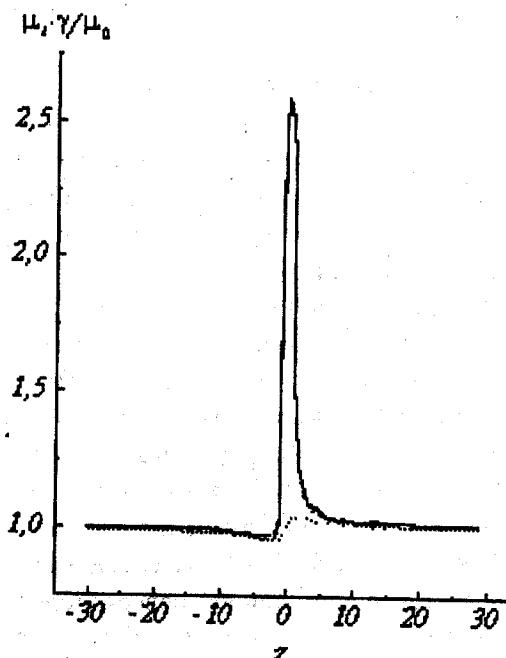


Рис. 2. Угловая зависимость интерференционного коэффициента поглощения в GaAs для рефлексов 400 (сплошная) и 200 (штриховая)

$$= \vartheta_B - \frac{\Delta\vartheta}{2}, \Delta\vartheta = \vartheta_B + \frac{\Delta\vartheta}{2}.$$

Поскольку значения ИИ при регистрации 200 брэгг-отражения в этой области длин волн были близки к фону ($k_f = i_f/i_d = 2,0$, где i_f , i_d — соответственно плотность импульсов при измерении фона и полезного сигнала), то необходимая точность измерений 1% достигалась путем набора количества импульсов и многократного числа проходов по энергиям. Статистическая ошибка измерений ИИ в присутствии фона определяется согласно [18] как

$$\varepsilon(i_d) = \frac{1}{\sqrt{i_d T}} \sqrt{1 + 2k_f}, \quad (9)$$

где T — время измерения ИИ. Для нашего случая $k_f = 2,0$ и при $\varepsilon \approx 0,01$ время измерения в каждой точке, в зависимости от длины волны, при условии выполнения нормального закона распределения ошибок составляло 40+200 с.

Для обработки результатов и расчета параметров дефектов использовалась процедура подгонки теоретической зависимости к экспериментальной. Эта процедура в предположении выполнения нормального закона распределения ошибок сводится к поиску минимума функции

$$\Phi = \sum_{i=1}^n (R_i^{\text{exp}} - \bar{R}_i)^2 / \delta_i^2, \quad (10)$$

где n — число измерений, δ_i — статистическая ошибка счета, R_i^{exp} — экспериментальные значения ИОС. Процедура подгонки более детально описана в [19].

Влияние рассеянного и флюоресцентного фонов учитывалось с помощью методики [20]. Температурные поправки к функциям атомного рассеяния брались из работы [21]. Дисперсионные поправки рассчитывались по формулам работы [22] с учетом сил осцилляторов, взятых из [23]. При измерениях использовались рефлексы 200 и 400. Исследуемые кристаллы GaAs с ориентацией поверхности (001) имели плотность дислокаций $\sim 10^4 \text{ см}^{-2}$, а также микродефекты (прецесситаты). W -образное распределение дислокаций в кристаллах обеспечивало неоднородное распределение собст-

венных компонентов (нестехиометрия), а также легирующих примесей [24]. Определение характеристик доминирующих типов микродефектов в исследуемых кристаллах производилось также по анализу хвостов диффузного рассеяния [25], полученных с помощью ДКС.

Результаты и их обсуждение

С целью выяснения чувствительности ИОС для различных порядков отражений к дефектам структуры проводились расчеты влияния относительного вклада R_D в полную ИОС от концентрации n (рис. 3, а) и размеров R_0 (рис. 3, б) кулоновских центров для фиксированных длин волн. Из анализа этих зависимостей следует, что ИОС структурного рефлекса 400 яв-

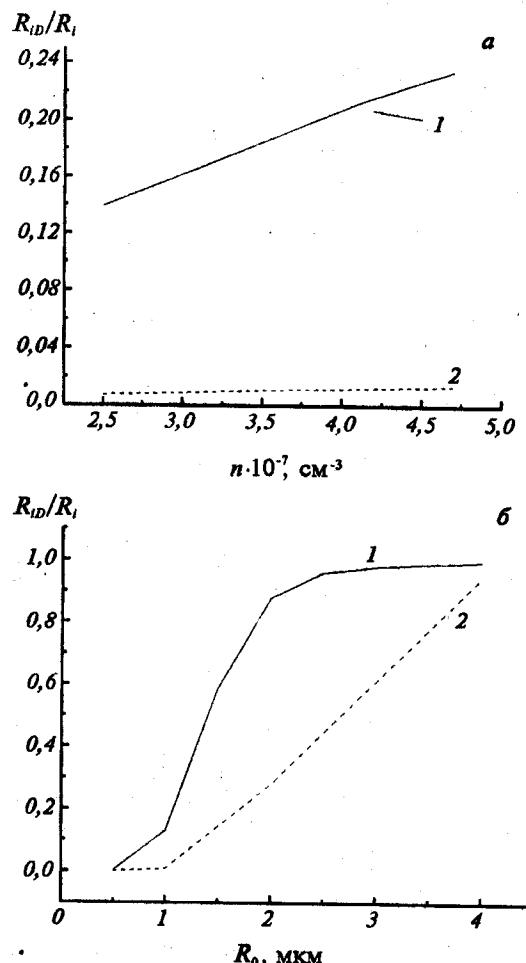


Рис. 3. Зависимость относительного вклада диффузной составляющей в полную ИОС от концентрации ($R_0 = 1 \text{ мкм}$) (а) и размеров ($n = 2,5 \cdot 10^8 \text{ см}^{-3}$) (б) кластеров для кристалла GaAs. Отражения: 1 — 400, 2 — 200

ляется более чувствительной к дефектам, чем КЗР 200. Изменение когерентной составляющей ПИОС учитывалось величиной статического фактора L_h , который имеет вид [13]

$$L_h = (1/2)cm\eta^2 \text{ при } \eta^2 \leq 10,$$

$$L_h = cm\eta^{3/2} \text{ при } \eta^2 \geq 10, \quad (11)$$

где $\eta = \Gamma / |\epsilon| R_0 H$. Стремление к единице зависимости $R_{ID}/R_i = f(R_0)$ при больших значениях размеров дефектов ($R_0 \geq 2$ мкм) для рефлекса 400 вызвано тем, что величина статического фактора в этом случае приближается к единице. Для КЗР 200 это происходит при больших значениях размеров дефектов.

Экстинкционные эффекты учитывались параметром $\mu_d(\Delta\theta)$, определенным формулой (6). Незначительный вклад R_{ID} в полную ИОС для КЗР 200 дает основания считать, что структурные дефекты не окажут значительного влияния на положения минимумов энергетических зависимостей $R_i = f(\lambda)$ в кристаллах с различной степенью отклонения от стехиометрии (рис. 4). Присхождение этих минимумов детально описано в [26, 27]. Энергетические зависимости относительного вклада R_{ID} в R_i

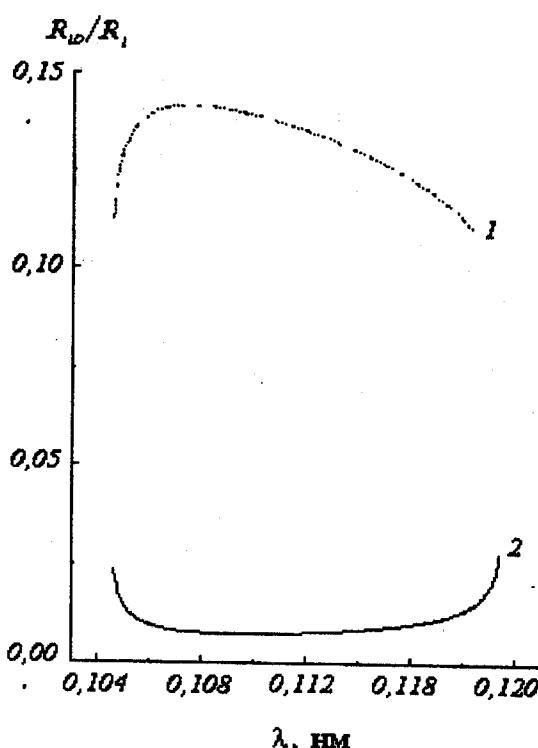


Рис. 5. Энергетические зависимости относительного вклада R_{ID} в ПИОС для рефлексов 400 (1) и 200 (2) в GaAs ($n = 2,5 \cdot 10^8 \text{ см}^{-3}$, $R_0 = 1 \text{ мкм}$)

для рефлексов 400 и 200 показаны на рис. 5. Поведение этих функций свидетельствует, что вклад диффузной компоненты в ПИОС для 200 рефлекса значительно меньше, чем для 400 во всем исследуемом интервале длин волн. Оценки влияния этого вклада на положение минимумов $R_i = f(\lambda)$ показывают, что им можно пренебречь при определении отклонений от стехиометрии на уровне $\sim 10^{-5}$.

Таким образом, проведенные расчеты показывают, что использование динамического приближения для описания поведения ИОС для КЗР 200 в кристаллах с дефектами имеет под собой реальные основания. Вообще говоря, это приближение, согласно [17], можно использовать, когда динамический параметр $A = \pi t/\Lambda$ является достаточно большим. Согласно [28], для граничного значения достаточно, чтобы $A \geq 3$. В нашем случае для КЗР 200 его величина изменяется в пределах 2-5, т. е. $t \geq \Lambda$. Диффузная компонента ИОС формируется в данном случае всей глубиной проникновения РЛ и ее интенсивность пропорциональна t/Λ . Поэтому очевидно, что ее

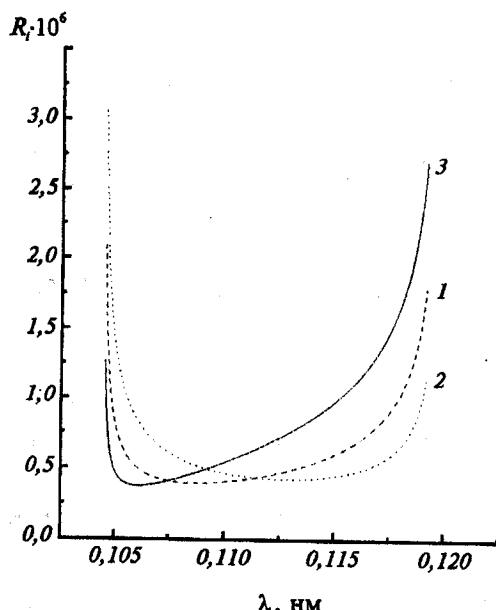


Рис. 4. Энергетические зависимости когерентной компоненты ИОС для КЗР 200 GaAs, рассчитанные для кристаллов: 1 — стехиометрического состава; 2 — с избытком Ga ($c_{Ga} - c_{As} = 0,05$); 3 — с избытком As ($c_{Ga} - c_{As} = -0,05$)

вклад в ИОС для случая сильного поглощения и слабых интерференций является неизначительным. Это свидетельствует о том, что дефекты структуры приводят к уменьшению когерентной составляющей, которое не может быть компенсировано вкладом R_D . Поэтому значения R_i в реальном кристалле могут иметь значения ИОС меньше, чем в идеальном кристалле. Сказанное выше иллюстрируется поведением экспериментальных энергетических зависимостей ИОС (точки) для рефлексов 200 и 400 в образцах GaAs с различной степенью структурного совершенства (рис. 6, а, б). Здесь же приведены зависимости для идеального кристалла, а также подгоночные расчетные зависимости для реальных образцов. Как следует из рисунка, экспериментальные графики хорошо согласуются с подгоночными как для КЗР 200, так и для разрешенного рефлекса 400. Определение параметра нестехиометрии из энергетических зависимостей для КЗР 200 осуществлялось при использовании значений параметров дефектов n и R_0 , полученных при подгонке теоретических кривых для рефлекса 400, более чувствительного к дефектам структуры.

Эти данные, а также полученные при подгонке значения статических факторов L_i и параметров дефектов для структурного 400 и квазизапрещенного 200 рефлексов приведены в таблице. Отметим, что результаты определения параметров нестехиометрических кристаллов GaAs данным способом хорошо коррелируют с полученными ранее методом маятниковых осцилляций интенсивности КЗР [19]. Значения параметров дефектов, полученные данным способом подгонки теоретических зависимостей $R_i = f(\lambda)$, также хорошо коррелируют с результатами, полученными методом анализа двухкристальных кривых отражения ($\text{Cu}K_{\alpha}$ -излучение, рефлекс 400).

В заключение рассмотрим характер поведения энергетической зависимости $R_i(\lambda)$ для образца с механически нарушенной (шлифованной) поверхностью (зависимость 5 на рис. 6,

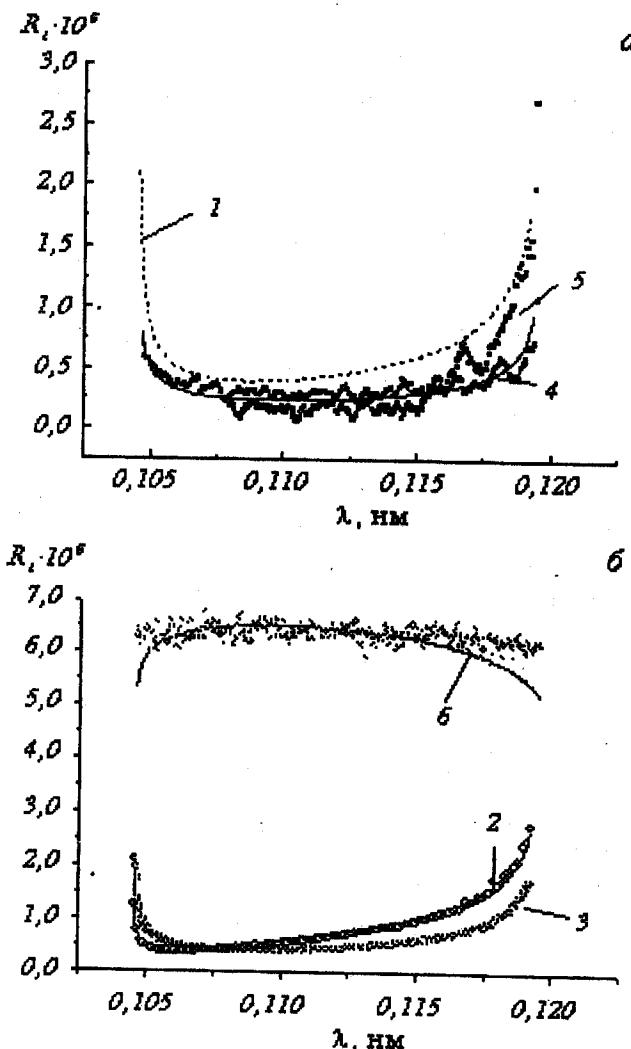


Рис. 6. Экспериментальные энергетические зависимости $R_i = f(\lambda)$ для кристаллов GaAs: 1 — расчетная для идеального стехиометрического кристалла; 2—4 — экспериментальные зависимости для кристаллов GaAs; 5 — образец с механически нарушенной поверхностью. 1—5 — отражение 200, 6 — отражение 400

a). Кривая отражения от нарушенного слоя (НС) имеет широкое угловое распределение и при данном спектральном окне прибора не все рассеянное излучение попадает в детектор. Кроме того, НС приводит к сильному подавлению когерентной составляющей от неискаженной части кристалла. Ход этой зависимости описывается кинематическим приближением с учетом толщины НС и поглощения в нем интенсивности падающего на кристалл пучка РЛ. Следует отметить, что такая опасность (неполного учета R_D) существует и для образцов, содержащих мелкие дефекты с ши-

Характеристики дефектов и параметры нестехиометрии для образцов GaAs. Номера кристаллов соответствуют приведенным на рис. 6.

Номер образца	Отражение						
	400			200			
	<i>L</i>	<i>R₀</i> , мкм	<i>n₀</i> ·10 ⁻⁸ , см ⁻³	<i>L</i>	<i>R₀</i> , мкм	<i>n₀</i> ·10 ⁻⁹ , см ⁻³	$\Delta = c_{\text{Ga}} - c_{\text{As}}$
3	0,029(3)	0,20(2)	3000(30)	0,005(1)	0,31(5)	2800(80)	-0,0003
2	0,22(5)	0,57(5)	200(10)	0,075(5)	0,7(1)	29(3)	-0,0037
4	0,14(3)	1,0(1)	5(1)	0,035(3)	4,0(3)	6(1)	+0,0012

П р и м е ч а н и е. Фактор $R = 100 \cdot [\Phi^2 / \sum_{i=1}^N (R_i^{\text{exp}} / \sigma_i^{\text{exp}})^2]$, где $\Phi^2 = \sum_{i=1}^N [(R_i^{\text{exp}} - R_{i0}) / \sigma_i^{\text{exp}}]^2$ находится в пределах от 2,8% (образец 3) до 13% (образец 4).

роким угловым распределением интенсивности ДР, интегральный вклад которого в ПИОС может быть определяющим. Однако, как показано выше, это ни в коей мере не может влиять на определяемый по положению минимумов энергетических зависимостей параметр нестехиометричности. Увеличение же в эксперименте величины спектрального окна, приводящее к более полному учету ДР, нежелательно, с другой стороны, с точки зрения ухудшения определения энергетического положения минимума ПИОС. Поэтому необходим оптимальный выбор ширины щелей коллиматора для удовлетворения обоих требований, что требует специального исследования.

Выводы

Таким образом, в работе получены выражения для диффузной и когерентной составляющих дифференциальной и ПИОС при дифракции по Брэггу в кристаллах с кулоновскими центрами в условиях сильного поглощения и влияния аномальной дисперсии. Теоретически проанализировано поведение интерференционного коэффициента поглощения для рефлексов 200 и 400, а также условия и характер дифракции РЛ в зависимости от параметров дефектов и вектора дифракции в кристаллах GaAs. Установлена слабая чувствительность ДР к дефектам структуры для КЭР. При этом показано, что формулы динамической теории брэгговской дифракции для реального кристалла справедливы и в случае сильного поглощения при выполнении условий

вий $|\chi_{ii}| \gg |\chi_{in}|$, включая случай $|\chi_{in}| = 0$. Экспериментальная реализация данного условия в области длин волн вблизи К-краев поглощения позволила при сочетании измерений для рефлексов 400 и 200 определять параметры нестехиометричности кристаллов GaAs.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Государственного комитета по науке и технологиям Украины.

1. В. Г. Барыжтар, А. Н. Гуреев, В. В. Кочебаб и др. // Металлофизика. — 1989. — 11, № 3. — С. 73.
2. Е. Н. Гаврилова, Е. Н. Кисловский, В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский // Металлофизика. — 1992. — 14, № 3. — С. 70.
3. В. Г. Барыжтар, Е. Н. Гаврилова, В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский // Металлофизика. — 1992. — 14, № 11. — С. 68.
4. В. Г. Барыжтар, В. В. Немошканенко, В. Б. Молодкин и др. // Металлофизика. — 1993. — 15, № 12. — С. 18.
5. В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, Е. Н. Кисловский и др. // Металлофиз. новейшие технол. — 1997. — 19, № 12. — С. 25.
6. T. Fukamachi, S. Hosoya, M. Okunuki // Acta Crystallogr. Sect. A. — 1976. — 32, No. 2. — P. 245.
7. T. Fukamachi, S. Hosoya, M. Okunuki // Acta Crystallogr. Sect. A. — 1976. — 32, No. 1. — P. 104.
8. F. Mücklich, H. Oettel, G. Petzow // Z. Metallkd. — 1993. — 84, No. 6. — P. 419.
9. G. Cockerton, G. S. Green, B. K. Tanner // Mat. Res. Symp. Proc. — 1989. — 138. — P. 65.
10. I. Fujimoto // Jap. J. Appl. Phys. — 1984. — 23, No. 5. — P. L287.
11. I. Fujimoto // Jap. J. Appl. Phys. — 1986. — 25, No. 2. — P. 291.
12. В. П. Кладько // Металлофиз. новейшие технол. —

1998. — 20, № 1. — С. 3.
13. *M. A. Кривоглаз.* Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов искаженными кристаллами. — Москва: Наука, 1967.
14. *T. Fukamachi, T. Kawamura* // *Acta Crystallogr. Sect. A*. — 1993. — 49, No. 3. — P. 384.
15. *Л. И. Даценко, В. П. Кладько* // *Кристаллография*. — 2000. — 44, № 4. — С. 57.
16. *T. Fukamachi, R. Negishi, W. Yoshizawa et al.* // *Acta Crystallogr. Sect. A*. — 1993. — 49, No. 4. — P. 573.
17. *З. Г. Пинскер.* Рентгеновская кристаллооптика. — Москва: Наука, 1982.
18. *Д. М. Хейкер.* Рентгеновская дифрактометрия монокристаллов. — Ленинград: Машиностроение, 1973.
19. *Л. И. Даценко, В. П. Кладько, В. М. Мельник, В. Ф. Мачулин* // *Металлофиз. новейшие технол.* — 1999. — 21, № 8. — С. 46.
20. *E. Бругрен, О. Ефимов, Е. Персон* // *ФТТ*. — 1968. — 10, № 9. — С. 2716.
21. *U. Pietsch* // *Phys. Status Solidi A*. — 1985. — 87, No. 1. — P. 151.
22. *T. Fukamachi, S. Hosoya, T. Kawamura, M. Okuniko.* X-Ray Intensity Measurements on Large Crystals by Energy-Dispersive Diffractometry. Preprint of the Institute for Sol. Stat. Phys. the University of Tokyo. — Tokyo, 1976. — № 760.
23. *D. T. Cromer* // *Acta Crystallogr.* — 1965. — 18, No. 10. — P. 17.
24. *В. Т. Бублик, К. Д. Щербачов* // *Кристаллография*. — 1994. — 39, № 6. — С. 1105.
25. *P. H. Dederichs* // *Phys. Rev. B*. — 1971. — 4, No. 1. — P. 1041.
26. *В. П. Кладько, Л. И. Даценко, В. Ф. Мачулин* // *УФЖ*. — 1999. — 44, № 9. — С. 1118.
27. *F. Mücklich, H. Oettel* // *Phys. Status Solidi A*. — 1992. — 129, No. 1. — P. 323.
28. *B. W. Batterman* // *Rev. Mod. Phys.* — 1964. — 36, No. 3. — P. 681.
- Получено 14.04.1999