

图4 肖脱基垒太阳能电池结构

这种肖脱基位垒型电池的特点是：(1)肖脱基位垒的金属功函数大，因此开路电压 V_{oc} 大；(2)这种结构的势垒电场强度很大，可以帮助光生载流子的扩散运动，以增大对光生载流子的收集，有利于提高转换效率；(3)由于在衬底和无掺杂的非晶态硅间有一很薄的 $n^+a-Si:H$ 作欧姆接触，使串联电阻大大下降，从而可提高短路电流 J_{sc} 和填充因子 FF；(4)在无光照时，肖脱基二极管的 $I-V$ 特性很接近于理想二极管的特性，势垒高度为 1.1 eV，使 V_{oc} 可达 865 mV；(5)表面有抗反射涂层，以防止 FF 和 V_{oc} 的下降。

非晶态硅太阳能电池除肖脱基势垒型外，还

有异质结和 p-I-n 结型，其性能见表 1^[7]。

非晶态硅太阳能电池都是薄膜结构的，不需要单晶材料和严格的工艺过程，因此省原料、工艺简单，又可作成大面积，还可随衬底的形状而改变，以利于生产的连续化和自动化，这样就能大幅度地降低成本和提高生产率，这对于太阳能在地面上的广泛利用是极其有益的，它为广泛利用太阳能开辟了一个新的领域。

有关 c-Si 和 a-Si 太阳能电池性能的比较，见表 2^[8]。

参 考 文 献

- [1] 白木靖宽, 応用物理, 46-5 (1977), 540;
W. E. Spear, The Physics of Non-Crystalline Solids, Trans. Tech. Publications, (1977), 77;
Science, 197-4306(1977), 851.
- [2] D. Adler, Electronics, 43-20(1970), 61.
- [3] N. F. Mott, E. A. Davis, Electronic Processes in Non-Crystalline Materials, Oxford, (1971), 188—269.
- [4] H. Fritzsche, Solid-State Technology, 21-1(1978), 55.
- [5] D. E. Carlson et al., ECA. Rev., 38-2(1977), 211.
- [6] W. E. Spear, P. G. Le Comber, Solid-State Communications, 17-9(1975), 1193.
- [7] D. E. Carlson, IEEE Tran., ED-24(1977), 449.
- [8] 吉田学、福地顺, National Technical Report, 24-2(1978), 352.

同步辐射在固体物理研究中的应用

顾本源 范海福

(中国科学院物理研究所)

一、引 言

二十年前，人们对固体中的电子态就已经有较深的了解，但是只限于金属材料的费米能级附近的电子态和半导体材料中价带顶与导带底附近的电子态。其原因在于：与这些电子态相联系的光学跃迁过程所涉及到的光学频段是红外光、可见光和紫外光，而这些频段的光源制作与探测技术又比较成熟。随着对固体光学性

质研究的深入，要获得固体中价带深处和原子的核心能级的资料，就必须扩展到真空紫外频段。在这个频段上，经典的放电管发出的真空紫外光强度较弱，并且阴极溅射造成很厉害的污染，制作工艺也较复杂，所以这种光源显然不够好。电子同步加速器发出的辐射 (Synchrotron Radiation 简称同步辐射) 具有强度高、频谱范围宽 (从红外区域直至硬 X 射线)，可以连续地调节改变输出频段以及其它特点 (见本文第二节)，因此同步辐射源成为研究固体性质的强有

力的工具。

同步辐射的真空紫外频段是研究原子和分子核心能级和固体中远离价带顶的低能电子态的良好光源。同步X射线辐射用于材料的结构分析,有独特优点,并且已经取得可喜的结果。

电子同步加速器早在1946年就有产品。由于它是核物理研究的重要手段,所以长期以来,这类机器的设计和研制多数是由从事核物理研究的单位承担。同步辐射是他们不希望有的副产品。由于通常光谱学专家不熟悉这类机器,因而到了较晚的时候,人们才认识到同步辐射的独特性质,并学会使用它。十年前,只有为数不多的几台电子同步辐射加速器用于光谱学实验,它们分别安装在美国国家标准局、意大利、日本和西德的汉堡。目前世界上已有二十多个地方正在使用或者筹建同步辐射源。

本文将简单地介绍同步辐射的原理和特性、同步辐射真空紫外频段用于研究固体中电子态和同步X射线辐射用于材料的结构分析研究。

二、同步辐射的特性

在经典电动力学中,我们已经知道,当带电粒子作加速运动时,会辐射光波。在电子同步辐射加速器或电子储存环中,高能电子在强大的磁场偏转力的作用下,会发射一种极强的光辐射。这种光辐射就叫做“同步辐射”或称“同步磁辐射”。

同步辐射的出现对提高同步加速器中回旋电子的能量是不利的。随着加速器能量愈来愈高,辐射损失也愈加严重,在一定程度上限制了电子同步加速器能量的提高。于是人们转向研究同步辐射的性质,并且力图找到它的用处。1949年逊格尔(Schwinger)根据经典的电磁场理论,对同步辐射的能耗、能谱分布、角分布等进行了详尽的推算。1956年,汤博林(Tomboulia)和哈特曼(Hartman)对美国康奈尔大学的一台300 MeV的电子同步加速器辐射源进行了仔细研究,测定其角分布和能谱分布,发现它

具有强度高、稳定性好、光谱范围宽、角分布范围窄、线偏振等特点,是一种难得的真空紫外光和软X射线源。下面介绍一下同步辐射的特点^[1-4]。

1. 辐射光波的强度高,稳定性好

我们知道,一个在圆形轨道上运动的电子,将发射光波,其辐射光的强度 I 依赖于电子能量 E 和轨道半径 R ,即

$$I = 6.76 \times 10^{-19} E^4 / R^2 (\text{W}). \quad (1)$$

由此可见,随着 E 增大, I 急剧地增大。例如,设 $E = 400 \text{ MeV}$,脉冲流强为 100 mA , $R = 1 \text{ m}$,那末, $I \approx 1700 \text{ MW}$,可以与目前激光器输出的强脉冲功率相比。一台能量为 2 GeV ,流强为 500 mA 的储存环所发射的X射线强度在不同波长处比通常的X射线管发射的X射线强度分别大 $10-10^4$ 倍。

由于储存环内的电子能量可以准确地加以调节改变,所以同步辐射源的稳定性特别好。

2. 光谱范围十分宽广

人们通过改变加速器或储存环中电子的能量,就可以得到特征波长 λ_c (峰值波长 $\lambda_p = 0.42\lambda_c$)位于各个不同频段上的同步辐射,可提供从红外区直到硬X射线整个光谱范围内的强光。图1是目前已经正式运转的几台储存环发

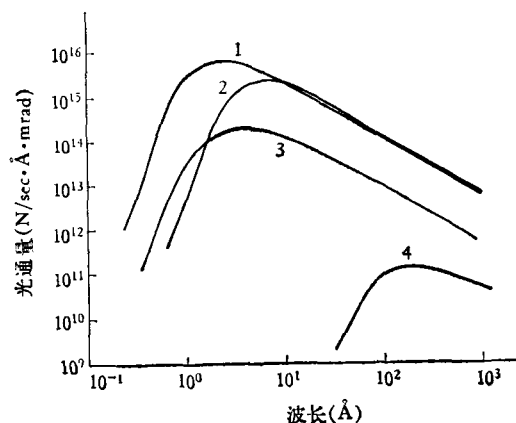


图1 同步辐射强度对波长的依赖关系 I 与各条曲线相应的储存环名称、电子能量和流强如下:

1. DESY (3 GeV, 250 mA);
2. CEA (3.2 GeV, 15 mA);
3. SLAC (2.2 GeV, 250 mA);
4. TANTI (0.24 GeV, 10 mA). N 为光子数

射的光辐射通量对波长的依赖关系曲线。

3. 辐射光在电子运动轨道平面的垂直方向上的角分布窄

以接近光速做圆周运动的电子，其辐射光波几乎集中在以电子行进方向为中心的细长光锥内，如图 2(a) 所示。一台环状机器所产生的辐射的空间图样，类似于雨点落在快速旋转的撑开的雨伞上时，所形成的沿伞面切线飞向四方的晶莹水珠分布 [见图 2(b)]。在与电子轨道平面垂直的方向上，辐射半角宽 ψ 为

$$\psi = \frac{m_0 c^2}{E} = \frac{1}{\gamma}. \quad (2)$$

设 $E = 500 \text{ MeV}$ ，那末， $\psi \approx 1 \text{ mrad}$ 。

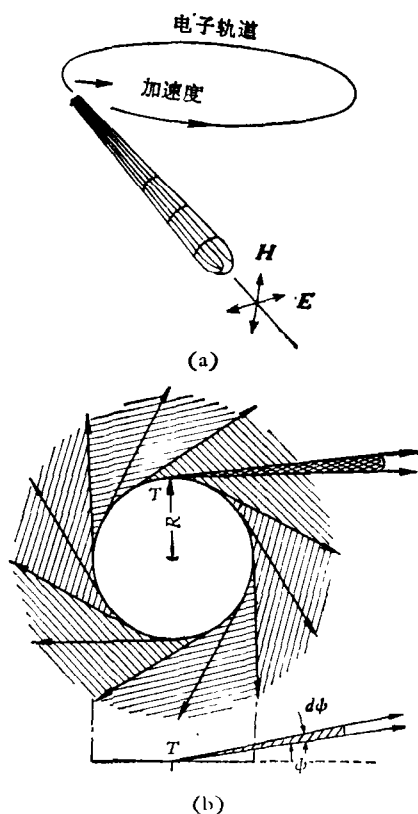


图 2 同步辐射的空间分布图样

4. 输出偏振光

在电子轨道平面上，同步辐射是很纯的线偏振光，而偏离此平面时，则为椭圆偏振光。在真空紫外区和 X 射线频段，高强度的线偏振光源是很难得到的。

5. 具有时间结构的脉冲光源

同步辐射是一种脉冲光源。电子同步加速器中，为了使电子加速，要求电子通过加速区时，它的运动方向与加速电场方向相匹配(即同步加速)。因此电子注入轨道时是一团一团地间歇注入，团与团之间的时间间隔是确定的，它取决于加速电子的谐振腔的射频频率。因此可以把圆状轨道分成若干段，其中每一段被具有稳定轨道的电子所充满。所以在轨道上某一固定观察点所观测到的光波，是由一系列窄脉宽的光脉冲组成。例如美国的威斯康辛大学有一台 250 MeV 的储存环，它所发射的光脉冲的宽度为 3 ns，相继的两脉冲间隔为 30 ns。这种光源特别适于进行光谱学实验，研究电子态的寿命。

6. 辐射特性可以精确地进行设计

人们可以借助于少数几个参量，设计出满足预定要求的光源，因此，它可以作为光强度的标准源。这在真空紫外区和 X 射线区是很难得到的。

7. 洁净的光源

通常放电管发出的光，即使是连续谱，也总是不可避免地会混入为光源本身所固有的(例如由放电管中所充的气体产生的)若干条吸收线与发射谱线，它会干扰测试结果。同步辐射发射连续谱，不含有任何线状谱，十分“干净”。另外，普通放电管式的光源多半具有电极，在放电过程中，电极材料经常要溅射并沉积到放置于管内的各种光学元件的表面上，引起污染，使光学元件性能逐渐变差。同步辐射是无电极光源，整个系统处于超高真空中，十分洁净。

三、同步辐射应用于研究 固体中电子态^[1,2]

通过对固体的吸收光谱、反射光谱、散射光谱、发光光谱、光电发射谱和电子激发态寿命等研究，可以获得有关固体结构和电子能态方面

许多重要资料。同步辐射是不可多得的真空紫外频段光源。本节简要介绍它在固体电子态研究中的应用。

1. 吸收光谱与反射光谱

有关固体能带结构方面的许多资料，可以通过研究固体的吸收光谱和反射光谱得到。例如，研究这些光谱，可以直接给出能隙与特征能级。

光与物质的相互作用通常可以采用复数介电常数 $\epsilon(\omega)$ 来描述，即

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + j\epsilon_2(\omega). \quad (3)$$

固体中的光吸收过程，在单电子近似下，可以简单地理解为系统吸收一个光子，电子从低能态激发到高能态，吸收系数 α 正比于介电常数的虚部 $\epsilon_2(\omega)$ ， $\epsilon_2(\omega)$ 可写成

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{\hbar^2 e^2}{\pi m_0^2 \omega^2} \int_{BZ} d^3k \cdot |\mathbf{e} \cdot \mathbf{M}_{vc}|^2 \delta(E_c - E_v - \hbar\omega), \quad (4)$$

式中 \mathbf{k} 为布洛赫波矢； \mathbf{e} 为入射光偏振方向单位矢量； E_v 为电子初态能级； E_c 是末态能级； BZ 表示积分区域遍及第一布里渊区； \mathbf{M}_{vc} 为偶极矩跃迁矩阵元，一般依赖于 \mathbf{k} ， ω 。

有些材料中， \mathbf{M}_{vc} 可以近似地看成常数，这时吸收系数 $\alpha(\omega)$ 可表示成

$$\alpha(\omega) \propto \int_{BZ} d^3k \delta(E_c - E_v - \hbar\omega),$$

即正比于联合态密度。因此通过测量吸收谱，可以获得能带联合态密度的资料。测出 $\alpha(\omega)$ 值时的频谱范围愈宽，则由 $\alpha(\omega)$ 值推算得到的联合态密度就愈精确，而一般经典光源只能测到 $\hbar\omega \lesssim 12$ eV 的吸收系数值。同步辐射源的频带很宽，可以把位于价带深处能级和核心能级上的电子，激发到远离导带底高达几百电子伏特以上的空态中去，因此可以提供很宽范围内的 $\alpha(\omega)$ 的值，从而可以较精确地给出联合态密度，并且由此检验各种理论模型的合理性。

由西德汉堡的同步辐射源 DESY 测得的氙气的吸收曲线如图 3 所示。图 4 给出硅单晶的 $L_{II,III}$ 吸收谱，通过消卷积分方法，可以将 L_{II}

和 L_{III} 分离开，在图上还给出理论计算出来的导带态密度曲线。由图可见，态密度曲线上的三个峰位置与吸收峰的位置符合得相当好。在吸收阈附近，吸收曲线偏离态密度曲线，这是由于理论模型尚不够完善，没有计及电子-空穴之间的相互作用。

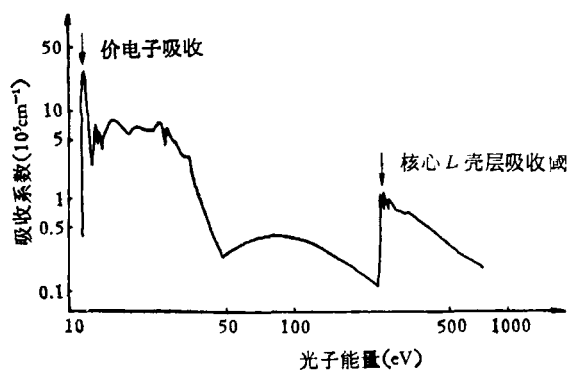


图 3 氙气的吸收谱

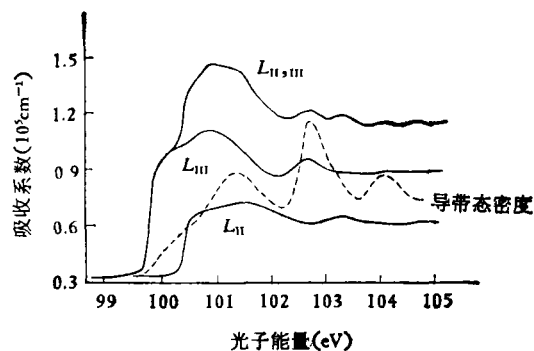


图 4 硅单晶的 $L_{II,III}$ 吸收谱与理论计算得到的导带态密度曲线

2. 光电发射

研究固体的光电发射谱，也可以获得有关固体中电子态的许多资料。不过现有的数据多半是使用经典光源测得的，光子能量 $\lesssim 12$ eV。近几年来，采用同步辐射源，将紫外光区的光电发射谱与 X 射线频段的光电发射谱衔接起来，填补空白频段，因此对固体电子态的研究起着重要的作用。

体光电发射的一级过程，可以唯象地描述成：入射光激励体内电子，受激的电子输运到固体表面，然后再穿过表面势垒逸出固体之外。光电发射强度在一定的近似条件下，同样地正

比于电子联合态密度。此外,它还依赖于观测方向与固体表面法向之间的相对取向(θ, ϕ)。表面电子态和体内电子态的波函数很不相同,所以,通过光电发射谱的研究分析,可以区分这两者。利用这个方法,可以研究表面吸附层内的电子态和塔姆态。

利用同步辐射源研究固体的光电发射谱对入射光的偏振状态的依赖关系,以及空间取向分布情况,可以提供更多的有价值的资料。例如对于氯化钾单晶(100)面,得到光电发射强度对方位角 ϕ 的依赖关系的极坐标图(见图5),由此可以提供 k 空间中态密度的三维分布情况。

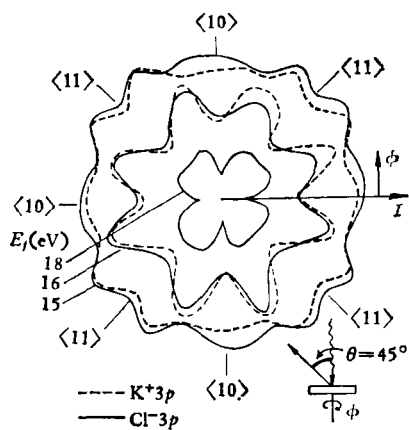


图 5

3. 局域激发

通常碱卤晶体的禁带宽度约为 10 eV,吸收阈位于紫外区或远紫外区。吸收阈之上的吸收谱一般是连续谱,对应于电子由价带跃迁到导带。但是在低温下,在吸收阈附近出现一系列分立的吸收线(带),同时又不伴有光电导现象。为了解释这个现象,夫伦克耳首次引进激子概念。他认为,当入射光子的能量小于禁带宽度 E_g 时,晶体中价带顶的电子吸收光子,被激发到电子与空穴所组成的系统的激发态中去,产生激子谱。用经典光源只能研究 $\hbar\omega \lesssim 12$ eV 的激子谱。

同步辐射源的频带很宽,通过适当的设计,可以做到从真空紫外区直到软 X 射线区都具有较强的光强。因此它特别适用于研究碱卤晶体、

固态稀有气体和绝缘体中的电子-空穴相互作用及核心能级的激子谱。由激子谱可以获得价带能级的自旋-轨道劈裂情况的资料,检验配位场理论模型的合理性,研究电子-空穴的各种相互作用。

4. 激发态衰减过程

为了研究激发态的衰变过程和能量转移过程,通常需要高强度的、窄脉宽的脉冲光作为抽运光源。可调节改变的具有时间结构的同步辐射,正是这样一种光源。利用同步辐射源,可以相当精确地去激发预定的电子态,并研究其衰变过程。目前,这一领域十分活跃。

Heaps 等人利用储存环 Tantalus I 所辐射的光脉冲(脉宽为 4 ns, 脉冲的重复时间间隔为 31.3 ns),测定了 $\text{LaF}_3 : \text{Ce}^{3+}$ 的紫外荧光(3050 Å)的寿命为 20 ns。

目前,使用同步辐射源研究稀有气体的发光光谱与光电发射谱的工作,特别引人关注,因为它有可能为人们找到适于在真空紫外频段工作的激光材料。此外,利用同步辐射源去研究激子的动力学过程,电子-电子散射过程以及各种能量转移过程等方面的探索工作刚刚开始,可以说还处在十分年青的阶段。

5. 表面效应的研究

同步辐射源十分“洁净”,又处于超高真空环境中,所以特别适合于研究表面效应。但是由于研究表面物理所需的仪器比较复杂,近几年来才逐渐建立起专用设备,并与同步辐射源相匹配,开展有关的研究工作。目前主要集中于研究能量在 10—200 eV 范围内的光电发射谱,其它方面的研究工作报道很少。Eastman 使用同步辐射(光子能量 7—25 eV)研究 Si, Ge 和 GaAs 中的表面电子态,发现在 Ge 的(111)表面及 GaAs 的(110)表面中存在着表面空电子态。不久,在其它的 III-V 族半导体中,也发现未被电子占据的表面态。利用同步辐射源研究 GaAs(111)表面的氧化问题,研究吸附在 Pd 和 Ni 表面上的 CO 的电子态,以及有关分子吸附

与化学催化作用的机理等方面的工作，都刚刚开展起来，十分活跃。

6. 多体效应的研究

固体能谱中的许多特征谱线，都与组成该固体的原子或分子处在自由状态时的谱线很相近，但并不完全相同。通过分析它们之间的差异，可以提供固体中原子或分子所处的环境的资料。但是，由于晶场作用引起能级多重劈裂，内部电子关联效应都会改变能谱图样，使得特征谱线难于辨认。为了分辨谱的精细结构，要求入射光的单色性十分好。经典光源强度本来就不高，高单色性、高光强的光难于由它得到。同步辐射源可以产生强度高的单色性很好的光波，供测试使用，可以分辨谱线的精细结构。

四、同步 X 射线辐射在结构分析中的应用

1. 同步 X 射线辐射的特点

(1) 同步 X 射线辐射是连续谱，其波长范围从 0.1—400 Å，而一般 X 射线源的连续谱波长范围只有 0.07—3 Å。同步 X 射线辐射的这一特点，便于用来研究与波长相关的各种效应。

(2) 发散度小，约 0.1°。这一特点，使得有可能大大增加试样至光源以及试样至探测器之间的距离，而同时保证足够的分辨能力。这就便于在试样周围附设各种装置，以便在各种非寻常条件下进行 X 射线分析。

(3) 同步 X 射线辐射的通量按连续谱计算，可以比一般 X 射线源约大 10^5 倍。这一特点利于研究一些特别微弱的效应，或作动态观察，并可大大缩短记录时间和提高信号噪音比。

(4) 几乎 100% 线偏振。这有利于提高单色化的效率和进行各向异性研究。

2. 应用例子

同步 X 射线辐射由于有上述许多特点，目前已经在结构分析方面取得了一些有意义的成

果。

(1) 根据 X 射线吸收谱的广延精细结构 (EXAFS) 来研究非晶态结构

通常用 X 射线研究非晶态结构是利用散射强度求出一个所谓“径向分布函数”，从这个函数可以得到有关原子近邻距离和配位数的资料。但是，对于由两种以上的半径相近的原子所组成的非晶态材料，有关每一种原子的近邻距离和配位数的信息会相互干扰。Stern 等人提出了利用 X 射线吸收谱的广延精细结构来研究非晶态结构的理论和实验方法^[5-7]。

X 射线入射到物质中会被吸收，其机理之一是：核心能级上的电子，吸收 X 射线光子，被激发到未占据的高能级上去。这种吸收机制所造成的物质的 X 射线质量吸收系数随入射光能量的改变而有复杂的行为。首先，吸收曲线上存在着一个吸收边。当入射光子的能量低于吸收阈时，不会被吸收，对应于 K 壳层电子被激发情形，称作 K 吸收边。其次，在吸收边之上，吸收系数陡峭地上升，然后随着入射光子能量的增加，吸收曲线上出现振荡起伏变化的小峰。当光子能量大于 1 keV 以上时（从吸收边算起），吸收曲线单调地下降。通常我们把能量在吸收边以上 30—1000 eV 范围内的 X 射线质量吸收系数曲线的精细结构，称为 X 射线吸收广延精细结构（英文的缩写为 EXAFS）。对 EXAFS 数据作适当的傅里叶分析，可以确定受激原子周围的近邻原子的位置，确定非晶态固体和化合物材料的结构。这个方法与通常用的 X 射线衍射法确定结构相比较，有着它的独特优点。它可以分别提取与不同种类原子有关的近邻距离和配位数的信息。但是，使用普通 X 射线源作这种实验，需要很长的时间，而且实验误差也较大。Kincaid 等人用斯坦福大学的储存环 SPEAR 作为光源，通过分析 X 射线吸收谱的广延精细结构，研究了 Kr, Br₂ 以及 GeCl₄ 中的 Ge 的近邻环境^[8]。同普通 X 射线源相比，实验时间从两星期缩短为 30 分钟，信噪比从 300 提高到 10000。他们的实验还表明 Stern 的理论^[5] 同实验结果只能定性地符合，因而这个理论尚待

进一步完善。另外,用普通X射线研究K吸收谱,很难适用于比Cr更轻的元素,而用同步X射线辐射,适用范围原则上可扩展到Li。

(2) 用X射线形貌术研究晶体缺陷

X射线形貌术早已广泛应用于研究晶体的完整性。采用同步X射线辐射可以大大提高它的效能。

使用普通X射线源,拍摄一张形貌照片往往需要几十个小时,使用同步辐射则只需几秒钟,如果采用更先进的记录手段,时间还可以大大缩短,这有利于进行动态观察。

在普通的X射线形貌照相中,要达到 2μ 左右的分辨能力,试样至底片的距离一般不得大于1 cm。使用同步辐射后,这个距离可增至10 cm。这样一来,一方面扩大了试样周围的空间,以便添加各种装置;另一方面又便于用连续谱来拍形貌照片,而不至使不同方向的衍射相互重叠,分辨不清。

Bordas等人借助于同步辐射的X射线形貌术,轻易地跟踪了BaTiO₃的相变过程^[9]。Tanner等人观察到反磁材料KNiF₃在外磁场增强时的畴壁移动^[10]。Tuomi等人从一张连续谱的形貌照片,测定出Burger矢量^[11]。以上几个实验,如果使用普通的X射线源,实验过程就要困难得多,或者甚至根本无法进行。

(3) 单晶体结构分析

根据衍射强度在倒易空间中的分布,来测定原子在晶胞中的几何位置,要遇到所谓相位问题。因为我们的记录手段只能录下衍射束的强度,而无法记录衍射波从晶体发出时的初位相。几十年来,这个问题一直是单晶结构分析技术的中心问题。

原则上,利用晶体中一部分原子对X射线的反常散射效应,在一定条件下,有可能找回被丢失的位相。但是反常散射效应一般比较微弱,使用一般X射线源时信噪比不够大,而且对于一般X射线源,往往不易选择到适合于特定试样所需要的波长。如果使用同步X射线辐射,上述两个问题都较容易解决。

把上述方法应用于晶态生物大分子结构的

测定将有明显的好处。目前,测定晶态生物大分子的结构,一般都用所谓同晶形置换法。这种方法通常需要制备出三个或者更多个重原子位置各不相同的同晶型样品。许多生物大分子由于无法满足这种要求而使结构分析工作根本无法进行。如果利用反常散射效应的方法,能够获得成功,那末就有可能减少制作同晶型样品的个数,甚至根本不需要同晶型样品。这将使生物大分子结构分析提高到一个新的水平。Phillips等人已开始在这方面作了一点试验^[12]。虽然目前他们离目的地还有一段较长的距离,但这仍然是一个有希望取得突破的方向。

总之,同步X射线辐射用于结构分析仅仅是个开始。目前虽已显示出不少优越性,但它的全部潜力尚待大力挖掘。已经做过的试验多局限于照搬使用普通X射线源时的常规方法和技术。今后,为了充分发挥同步辐射的作用,应更多地着眼于针对同步辐射的特点,研究出新的结构分析方法和技术来。此外,同步辐射在固体研究中的应用,除结构分析外,已探索用于固体加工方面。例如,正在研究用它制备集成电路亚微米图象的可能性,由于这不是本文讨论的问题,所以文中未作论述。

参 考 文 献

- [1] E. E. Koch et al., *Physics Reports*, **29C**(1977), 155.
- [2] F. C. Brown, *Solid State Phys.*, **29**(1974), 1.
- [3] R. P. Godwin, *Springer Tracts in Modern Physics*, **51** (Edited by G. Höhler, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York 1969), 1.
- [4] K. Codling, *Rep. Progr. Phys.*, **36**(1973), 541.
- [5] E. A. Stern, *Phys. Rev.*, **B10**(1974), 3027.
- [6] F. W. Lytle et al., *Phys. Rev.*, **B11**(1975), 4825.
- [7] E. A. Stern et al., *Phys. Rev.*, **B11**(1975), 4836.
- [8] B. M. Kincaid et al., *Phys. Rev. Lett.*, **34**(1975), 1361.
- [9] J. Bordas et al., *Phil. Mag.*, **32**(1975), 471.
- [10] B. K. Tanner et al., *J. Appl. Phys.*, **10**(1977), 91.
- [11] T. Tuomi et al., *Phys. Stat. Sol.*, (a)**25**(1974), 93.
- [12] J. C. Phillips et al., *Acta Cryst.*, **A33**(1977), 445.