

文章编号: 0253-2239(2005)10-1365-6

HgCdTe 组分不均性对 X 射线反射率的影响*

王庆学 杨建荣 魏彦锋 方维政 陈新强 何力

(中国科学院上海技术物理研究所半导体材料与器件研究中心, 上海 200083)

摘要: 本征反射率是 X 射线衍射摇摆曲线计算机模拟的基础。用 X 射线动力学理论研究了组分不均匀对 HgCdTe 材料 X 射线反射率的影响。研究表明, 横向组分不均匀性直接影响摇摆曲线的峰形, 峰值反射率和半峰全宽随组分不均匀的增大而分别减小和增大, 且与组分不均匀性的均方差近似成指数关系, 但其积分反射率却基本保持不变; 采用多层模型对具有线性组分梯度的 HgCdTe 半导体材料反射率的计算结果则表明, 纵向组分梯度除导致反射率峰值强度下降外, 还会引起摇摆曲线产生单边干涉效应, 摇摆曲线的半峰全宽和干涉峰间距随组分梯度的增加而增大, 而干涉峰间距与干涉周期之间的关系则随组分梯度的增加其偏离线性的程度增大。

关键词: 光学材料; HgCdTe; X 射线反射率; 组分不均匀性; X 射线动力学

中图分类号: TN307 文献标识码: A

Effect of HgCdTe Composition Ununiformity on Its X-Ray Reflectivities

Wang Qingxue Yang Jianrong Wei Yanfeng Fang Weizheng Chen Xinqiang He Li

(Research Center for Advanced Materials and Devices, Shanghai Institute of Technical Physics,
The Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083)

Abstract: Calculation of reflectivities is foundation of computer simulation of X-ray rocking curve. The effect of HgCdTe composition ununiformity on X-ray reflectivities is studied. The results show that X-ray reflectivity rocking curves of HgCdTe materials are affected by transverse composition ununiformity. As composition ununiformity increases, peak value and full width at half maximum (FWHM) of X-ray reflectivity decrease and increase respectively in the exponential function of mean square deviation of composition ununiformity, but a integral reflectivities keep constant. The X-ray reflectivities of HgCdTe materials with a longitudinal linear composition gradient are calculated by using multilayer model. It is found that reflectivity peak values decrease and FWHM of the reflectivities increases as the increase of composition gradients. Besides of these, longitudinal composition gradients will induce some interference peaks at single side of the reflectivity curves. The interference wavelengths increase with the increase of composition gradient. And variation of interference wavelengths with interference period number also increases.

Key words: optical materials; HgCdTe; X-ray reflectivity; composition ununiformity; X-ray dynamical scattering theory

1 引 言

高分辨 X 射线衍射是一种非接触、无破坏的晶体质量检测技术, 对晶格完整性具有很高的灵敏度和分辨率, 是分析和评价晶体材料质量的有效手段^[1~4]。根据 X 射线衍射的摇摆曲线的峰形和半峰全宽, 可以定性和定量地获得半导体材料晶体质量的信息。然而摇摆曲线的峰形和半峰全宽是材料本

征半峰全宽、缺陷和仪器展宽的综合效应。从摇摆曲线中分离出各种影响因素是相当困难的。摇摆曲线的计算机模拟是获得材料晶体质量参量的有效方法。它运用 X 射线的动力学或运动学理论, 结合缺陷模型计算出理论的摇摆曲线, 再与实验结果进行比较, 从而获得材料的结构完整性等信息。其中材料本征摇摆曲线的计算是计算机模拟的基础^[5]。目

* 国家自然科学基金委创新研究群体科学基金(60221502)资助课题。

作者简介: 王庆学(1977~), 男, 博士研究生, 主要从事 HgCdTe 半导体材料的高分辨 X 射线衍射研究。

E-mail: qxwangemail@163.com

收稿日期: 2004-10-13; 收到修改稿日期: 2004-12-10

前,对组分均匀的半导体材料的本征反射率和半峰全宽研究较多,已能获得较为满意的结果。然而,对于存在纵向或横向组分不均匀的化合物半导体材料,本征反射率的研究却很少,而这一点对实际材料 X 射线摇摆曲线的理论模拟非常重要。反射率的理论计算将有助于研究组分不均匀对摇摆曲线的峰形和半峰全宽的影响,从而达到利用 X 射线摇摆曲线正确评价材料晶体质量的目的。

$\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 窄禁带半导体是用于红外探测的一种非常重要的材料^[6,7]。其大面积外延材料则更是发展高性能红外焦平面探测技术所使用的敏感元材料。 HgCdTe 外延材料在制备和热处理过程中往往引入纵向组分梯度,导致材料存在内建电场,影响材料和器件的光电特性^[8]。横向的组分不均匀影响光敏元性能的一致性。Moller 等^[9]用动力学理论分析了一定组分 $\text{HgCdTe}/\text{CdZnTe}$ 的本征摇摆曲线和半峰全宽,但是,未考虑 HgCdTe 的组分不均匀的影响。本文运用 X 射线动力学理论计算了横向组分波动符合正态分布的 HgCdTe 的反射率曲线,研究了摇摆曲线的峰形、反射率和半峰全宽与组分均方差之间的关系;采用多层模型计算了具有线性组分梯度的碲镉汞半导体材料的反射率,研究了反射率曲线的峰形、半峰全宽和干涉峰与组分梯度之间的关系。

2 理论模型

X 射线理论主要有动力学和运动学两大理论。运动学理论忽略了衍射波的能量损失,在散射非常微弱的情况下能够获得准确的结果。因此,主要适用于薄膜材料,并且其反射率小于 10%。大部分的半导体材料都具有很好的结构完整性,其反射率很大,已经超出了运动学理论的应用范围。本文采用动力学理论研究具有组分梯度的 HgCdTe 外延材料的反射率。Bartels^[8~10]给出了具有一致组分的任意厚度晶体材料的理论反射率^[10~12]:

$$P_H = |F_H/F_{\bar{H}}| |X_t|^2, \quad (1)$$

其中,
$$X_t = \eta + (\eta^2 - 1)^{1/2} \frac{S_1 + S_2}{S_1 - S_2}, \quad (2)$$

$$S_1 = [X_0 - \eta + (\eta^2 - 1)^{1/2}] \times \exp[-iT(\eta^2 - 1)^{1/2}], \quad (3)$$

$$S_2 = [X_0 - \eta + (\eta^2 - 1)^{1/2}] \times \exp[iT(\eta^2 - 1)^{1/2}], \quad (4)$$

X_t 和 X_0 分别为样品上表面和下表面的振幅比; η 和

T 分别为偏离参量和厚度参量,表达式为:

$$X = \left(\frac{F_{\bar{H}}}{F_H}\right)^{1/2} \left|\frac{\gamma_H}{\gamma_0}\right|^{1/2} \frac{D_H}{D_0}, \quad (5)$$

$$\eta = \frac{-b(\theta - \theta_B) \sin 2\theta_B - 0.5TF_0(1-b)}{|b|^{1/2}CF(F_H F_{\bar{H}})^{1/2}}, \quad (6)$$

$$T = \pi CF(F_H F_{\bar{H}})^{1/2} t / (\lambda |\gamma_0 \gamma_H|^{1/2}), \quad (7)$$

$$\Gamma = r_e \lambda^2 / (\pi V), \quad (8)$$

$$b = \gamma_0 / \gamma_H, \quad (9)$$

F_H 、 $F_{\bar{H}}$ 和 F_0 分别为衍射指数为 (hkl) 、 $(-h-k-l)$ 和 0 的衍射面的结构因子; γ_0 和 γ_H 分别为入射 X 射线和衍射线与表面法线夹角的余弦; D_0 和 D_H 分别为入射和衍射 X 射线的振幅; θ_B 为衍射面的布拉格角; θ 为 X 射线的入射角; C 为激化参量,对于 σ 激化,取值为 1,对于 π 激化取值为 $|\cos 2\theta_B|$; λ 为 X 射线的波长, r_e 为经典原子半径,一般取值为 2.818×10^{-6} nm, V 为晶体学胞的体积; t 为样品的厚度。

由于上述动力学模型不能直接应用于组分不均匀的材料。因此,对具有横向组分波动材料的反射率,提出了总反射率概念。假定组分波动符合一定的频率分布 $f(x)$,则总反射率为:

$$\langle P_H \rangle = \int_{x_1}^{x_2} P_H f(x) dx, \quad (10)$$

x_1 和 x_2 为积分边界。对于存在纵向组分的材料,采用多层模型,即把材料纵向分成多层,假定每层具有均匀的组分,如图 1。其中 $x_1 \sim x_n$ 为每层的组分, $X_0 \sim X_{n+1}$ 分别为 $n+1$ 个界面的衍射振幅和入射振幅比。X 射线衍射的边界条件取最下层薄膜下表面的振幅比为 0,即 $X_0 = 0$,通过运用一致组分的动力学理论可以得到最下层薄膜上表面的振幅比,然后把此振幅比作为倒数第二层下表面振幅比的边界条件,再依次迭代,最终可以获得样品表面的振幅比,从而得到样品的反射率。

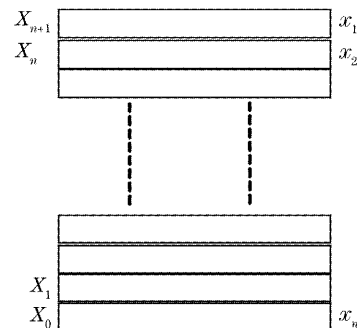


图 1 具有组分梯度的多层结构模型示意图
Fig. 1 Multi-layer model for the material with composition gradient

3 结果与讨论

3.1 横向组分波动

刘坤等^[13]证实 HgCdTe 体材料和外延材料的横向组分波动均符合正态分布:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right], \quad (11)$$

其中 μ 为组分平均值, σ 为反映组分离散性的均方差。图 2 给出了几种组分平均值为 0.22, 不同均方差的组分概率分布(其中概率分布曲线均被归一化)。在反射率的计算过程中, 假定结构因子、晶格参量与组分呈线性关系。由于高分辨 X 射线衍射中 σ 激化占主要组分, 因此, 在反射率和半峰全宽计算时, 仅考虑了 σ 激化。X 射线光源为 $\text{Cu}_{K\alpha 1}$, 波长为 1540.56 nm。计算考虑了原子的异常散射, 所用的参量取自文献^[14]。在用上面所提计算模型研究横向组分均匀性对反射率的影响时, 假定 HgCdTe 的纵向组分是均匀的, 仅考虑横向组分波动。

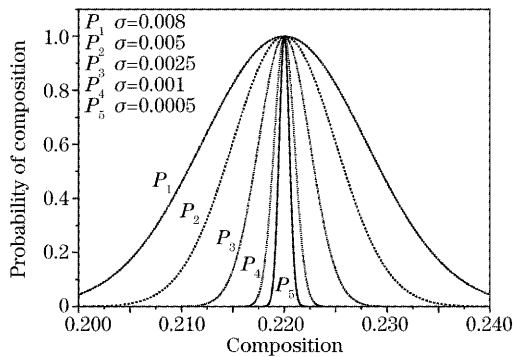


图 2 几种 HgCdTe 的横向组分分布示意图

Fig. 2 Schematic diagram of composition transverse distribution of HgCdTe materials

图 3 为平均组分 0.22 但均方差不同的 HgCdTe 材料的总反射率曲线, 横向组分不均匀分布与图 2 相

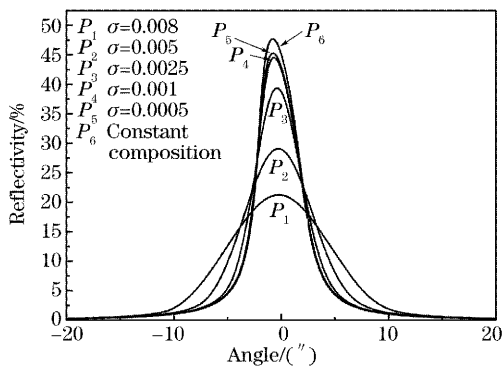


图 3 具有不同组分偏差的 HgCdTe 反射率曲线

Fig. 3 Reflectivity rocking curves of HgCdTe materials with different spatial composition distribution

对应。计算的边界条件为样品下表面振幅比为 0, 衍射几何为(333)对称衍射。均匀组分 HgCdTe 材料反射率曲线如 P_6 所示, 并不是完全中心对称。这是由原子的异常散射引起的。组分均方差影响反射率的峰形、峰值和半峰全宽, 组分偏差越大, 其反射率曲线的峰值反射率越小, 半峰全宽展宽越大。

图 4 分别给出了反射率和半峰全宽与组分均方差之间的关系。图 4(a)中 P_{Bragg} 为反射率曲线峰值的反射率, 另一曲线为积分反射率与方差之间的关系。由图可以看出, 随组分偏离增大, 其摇摆曲线的峰值反射率下降且其半峰全宽展宽。在组分偏差小于 0.001 时, 峰值反射率随组分偏差的增加变化不大, 而当超过此值时, 其峰值反射率急剧下降。通过最小二乘法拟合数据, 峰值反射率基本上是组分均方差的指数函数; 积分反射率不受组分偏差的影响, 其值为 2.57(s%)左右。组分偏差较大时, 积分误差引起积分反射率稍微下降。严格的积分反射率是角度从负的无穷大到正的无穷大上反射率曲线的积分。在保证一定准确率的情况下, 为了简化计算, 在进行积分反射率计算时, 仅考虑偏离中心一定角度的反射率。由于组分偏差的增加导致反射率曲线的尾部延伸的增加, 引起计算的积分反射率随组分偏差的增加而偏小。但是由于角度范围选择很大, 其由角度范围所引起的积分反射率误差很小, 可以忽略不计。图 4(b)中给出的半峰全宽和组分偏差之间的关系与峰值反射率和组分偏差之间的关系相反。在组分偏差小于 0.001 时, 其半峰全宽随组分偏差变化不大。并且随组分偏差的减小其半峰全宽接近于平均组分的本征半峰全宽。然而, 当组分偏差大于 0.001 时, 半峰全宽随组分偏差的增加而急剧增大。同样, 用最小二乘法数据拟合, 半峰全宽也近似是组分均方差的指数函数。峰形、反射率和半峰全宽与组分偏差的关系可以采用总反射率模型予以解释。由于 X 射线在样品上为一定大小的光斑, 在光斑范围内所衍射的 X 射线均被探测器接收, 总反射率可以认为是平均组分和偏离平均组分样品的反射率叠加。由于随组分偏离的增加, 具有平均组分样品的衍射体积减小。因此, 总反射率的最大值下降; 然而, 组分波动的增加并没有减小样品总的衍射体积, 所以, 积分反射率保持恒定值。具有单一组分材料的布拉格角为一个定值, 而组分波动相当于把布拉格角展宽为一个谱带, 组分偏离越大, 其谱带越宽, 因此, 半峰全宽将随组分偏离的增加而增大。

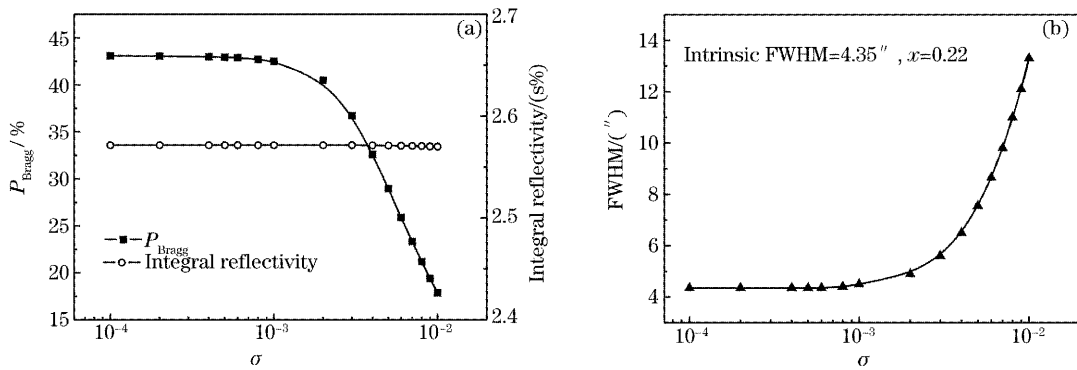


图 4 (a) HgCdTe 的峰值反射率和积分反射率, (b)半峰全宽与组分均方差的关系

Fig. 4 (a) Relationships of reflectivity peak values and integral reflectivities, (b) FWHM with composition standard deviation of HgCdTe materials

3.2 纵向组分梯度

图 5 为具有不同斜率的 HgCdTe 外延材料组分梯度示意图,表面组分均为 0.22。碲镉汞外延材料的厚度一般在 $10\ \mu\text{m}$ 左右。由于 X 射线在 HgCdTe 的穿透深度仅为几个微米,计算时取 $30\ \mu\text{m}$ 深度处的边界条件为 0。图 5 中给出的几种组分梯度与 HgCdTe 外延材料组分梯度的实际情况相近。运用前面建立的多层模型,给出了具有线性组分梯度的 HgCdTe 的反射率的计算结果,如图 6 所示。其组分梯度分别与图 5 相对应。在理论计算过程中,多层模型的层数是通过逐步增加层数,直至所计算的反射率曲线不随层数增加而变化来确定。一般控制每层的厚度小于 $0.1\ \mu\text{m}$ 即可以得到满意的计算结果。另外,计算所使用的参量也同样采用文献[14]所提供的数据。同样,在研究 HgCdTe 纵向组分梯度对反射率的影响时,假定横向组分是均匀一致的。

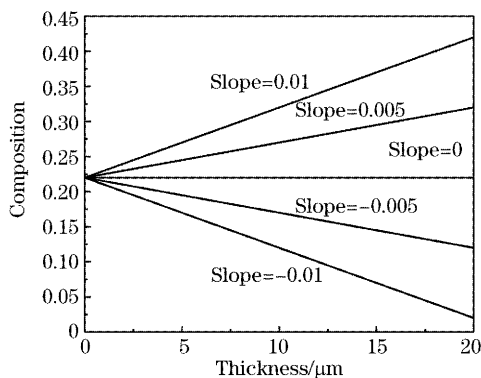


图 5 几种 HgCdTe 外延材料的组分梯度示意图
Fig. 5 Schematic diagram of longitudinal composition gradients in HgCdTe materials

其衍射几何为(333)对称衍射。图 6 中的曲线 C 为具有均匀组分($x=0.22$,即为表面组分)的反射率曲线。以曲线 C 为中心,具有组分梯度的反射率曲线

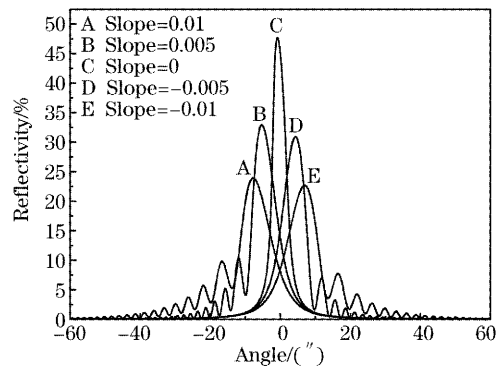


图 6 具有不同组分梯度的 HgCdTe 的反射率曲线
Fig. 6 Reflectivity rocking curve of HgCdTe materials with different composition gradients

中心均偏离零点。正的组分梯度,即曲线 A 和 B,反射率曲线向小角度偏离,并且随梯度的增加,其角度偏离增大;而负的组分梯度,其反射率曲线 D 和 E 则向大角度偏离。反射率的最大值也随组分梯度的增加而减小,反射率的半峰全宽也展宽。产生这些现象的原因可以用多层模型来解释,纵向组分梯度导致了纵向布拉格角梯度化,相当于具有不同组分的多层薄膜叠加,反射率曲线就是这些具有不同布拉格角的多层薄膜反射曲线的叠加。由于各层角度不同,所以反射率曲线出现展宽,由于每层的厚度很小,而 X 射线衍射强度与衍射体积呈现正比关系,因此组分梯度也导致了反射率的最大值下降。另外,组分梯度也导致了反射率曲线尾部出现二次衍射峰(即干涉峰)。干涉峰在高角度边或低角度边与组分梯度的正负有直接关系。对于正的组分梯度,其干涉峰出现在低角度边,布拉格角对应的晶格常数较大,即对应于底部的高组分材料。底部材料的强散射可能与宽阔的上部梯度区材料的散射发生较强的二次衍射相干。而表层材料散射光与上部薄层组分干涉作用要弱得多。

同理,负组分梯度的干涉峰则出现在高角度边。除干涉效应的位置外,不同组分梯度 HgCdTe 反射率干涉峰的间距也是不同的,同一组分梯度相邻干涉峰的间距也不相等。图 7 为不同组分梯度 HgCdTe 的干涉峰间距与干涉周期之间的关系,其中数据依次取自靠近主衍射峰的振荡峰。相同周期的干涉峰间距随组分梯度的增加而增加。间距和周期之间的关系可用二次多项式($Y=A+B_1X+B_2X^2$)来描述,拟合参量见表 1; B_1 为曲线的斜率, B_2 为偏离线性度的参量。 B_1 随组分梯度的增加而增大,表明大的组分梯度干涉峰的间距的变化也大。 B_2 也随组分梯度的增加而增大,表示干涉峰间距和干涉峰周期之间的关系偏离线性的程度增加。可见可以通过干涉峰间距的大小及干涉峰与周期之间关系的偏离线性程度来定性推断材料中组分梯度的大小。

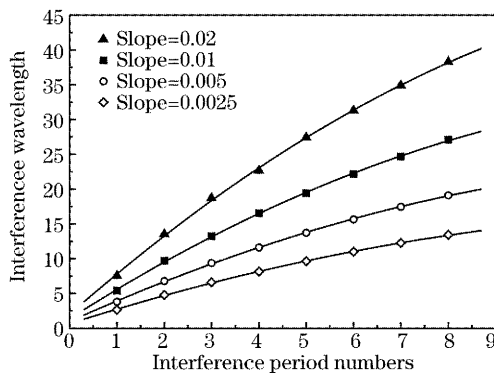


图 7 不同组分梯度的 HgCdTe 干涉峰间距与周期的关系

Fig. 7 Relationships of interference wavelength of reflectivity rocking curves of HgCdTe with composition gradients and interference period numbers

表 1 图 7 中曲线的拟合参量

Table 1 Fitting parameters of the cruves in Fig. 7

Composition gradients / μm	Fitting parameters		
	A	B_1	B_2
0.02	1.9852	6.0140	-0.1863
0.01	1.3693	4.3631	-0.1457
0.005	0.9695	3.0698	-0.1014
0.0025	0.6646	2.1669	-0.0724

HgCdTe 材料的组分不均匀(不管是横向的还是纵向的)会导致 X 射线反射率的下降和半峰全宽的展宽。纵向不均匀和横向不均匀对 X 射线衍射的差异在于:纵向组分不均匀会导致反射率曲线出现单边干涉效应。尽管材料的反射率摇摆曲线要和仪器函数卷积才能得到 X 射线衍射强度的摇摆曲线,但在高分辨 X 射线衍射的测试系统中,反射率曲线的强度和对称性等特性都会保留在 X 射线衍射摇摆曲线中。在

实际测量中,单边衍射导致的衍射强度摇摆曲线的非对称现象经常能被观察到。

4 结 论

运用 X 射线动力学理论建立了组分不均匀的 HgCdTe 材料 X 射线反射率的理论计算方法,完成了不同组分均匀性材料反射率摇摆曲线的计算,研究了不均匀性对摇摆曲线的峰形、峰值反射率和半峰全宽的影响。结果显示,横向组分的不均匀将导致反射率摇摆曲线的峰值下降和半峰全宽的展宽,峰值反射率随组分不均匀性的均方差的变化成指数函数,而积分反射率则保持不变。纵向不均匀性同样会导致材料反射率摇摆曲线的峰值下降和半峰全宽的展宽。所不同的是,纵向不均匀性将导致反射率摇摆曲线出现单边干涉效应,且出现在内部材料组分相对应的布拉格衍射角的方向,干涉峰间距随组分梯度的增加而增大。干涉峰间距与干涉周期之间的关系,随组分梯度的增加偏离线性的程度也增大。X 射线反射率摇摆曲线的峰值强度和峰形对称性等特性将保留在 X 射线衍射的摇摆曲线中。因此,HgCdTe 材料的组分不均匀性同样将在衍射摇摆曲线的峰值强度、半峰全宽和对称性中反映出来。本文的计算和分析结果将有助于分析和理解 HgCdTe 材料的 X 射线衍射摇摆曲线。

参 考 文 献

- 1 D. Keith Bowen, Brian K. Tanner. *High Resolution X-Ray Diffractometry and Topography* [M]. London: Taylor & Francis Ltd., 2001. 1~13
- 2 Paul F. Fewster, Norman L. Andrew. Strain analysis of X-ray diffraction[J]. *Thin Solid Films*, 1998, **319**: 1~8
- 3 Feng Shimeng, Zhao Qiang, Tang Zaosheng *et al.*. Study of small angle X-ray-diffraction theory of multilayer for water window reign X-ray[J]. *Chin. J. Lasers*, 2000, **27**(10): 927~930 (in Chinese)
冯仕猛,赵强,汤兆胜等.小周期多层膜的小角 X 射线衍射强度研究[J]. *中国激光*, 2000, **27**(10): 927~930
- 4 Chen Bo, Wang Wei, Wang Xiaojie *et al.*. Low threshold 1.3 μm InGaAsP/InP strained compensated multi-quantum well lasers grown by LP-MOCVD[J]. *Chin. J. Lasers*, 1998, **A25**(9): 785~788 (in Chinese)
陈博,王圩,汪孝杰等.1.3 μm 低阈值 InGaAsP/InP 应变补偿 MQW 激光器的 LP-MOCVD 生长[J]. *中国激光*, 1998, **A25**(9): 785~788
- 5 M. A. G. Halliwell, M. H. Lyons, M. G. Hiu. The interpretation of X-ray rocking curves from semiconductors device structures[J]. *J. Crystal Growth*, 1984, **68**: 523~531
- 6 Li Xiuqian, Cheng Xiangai, Wang Rui *et al.*. Investigation of thermal effect of HgCdTe detector with irradiation by off-band CW CO₂ laser [J]. *Chin. J. Lasers*, 2003, **30**(12): 1070~1074 (in Chinese)
李修乾,程湘爱,王睿等.波段外 CW CO₂ 激光辐照 HgCdTe 探测器热效应研究[J]. *中国激光*, 2003, **30**(12): 1070~1074

- 7 Ma Liqin, Lu Qisheng, Du Shaojun *et al.*. Imitation of the instantaneous change behaviors of photoconductive detectors [J]. *Chin. J. Lasers*, 2004, **31**(3): 342~346 (in Chinese)
马丽芹, 陆启生, 杜少军 等. 光导型光电探测器瞬变行为的仿真 [J]. *中国激光*, 2004, **31**(3): 342~346
- 8 D. Rosenfeld, V. Garber, V. Ariel *et al.*. Compositionally graded HgCdTe photodiodes: prediction of spectral response from transmission spectrum and the impact of grading [J]. *J. Electron. Mater.*, 1995, **24**(9): 1321~1328
- 9 M. O. Möller, R. N. Bicknell-Tassius, G. Landwehr. Theoretical X-ray Bragg reflection widths and reflectivities of II-VI semiconductors [J]. *J. Appl. Phys.*, 1992, **72**(11): 5106~5116
- 10 W. J. Barterls, J. Hornstra, D. J. W. Lobeek. X-ray diffraction of multilayers and superlattices [J]. *Acta. Cryst.*, 1986, **A42**: 539~545
- 11 Holy V, Pietsch U, Baumbach T. *High Resolution X-Ray Scattering from Thin Films and Multilayers* [M]. Berlin: Springer Verlag, 1999. 81~111
- 12 Wang Qingxue, Yang Jianrong, Wei Yanfeng *et al.*. Theoretical X-ray reflectivities and FWHM of $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ and $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ materials [J]. *Acta Optica Sinica*, 2005, **25**(5): 712~716 (in Chinese)
王庆学, 杨建荣, 魏彦锋 等. $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ 的 X 射线反射率及半峰宽的动力学研究 [J]. *光学学报*, 2005, **25**(5): 712~716 (in Chinese)
- 13 Kun Liu, J. H. Chu, Biao Li *et al.*. Measurement of composition in $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ epilayers [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1994, **64**(21): 104~106
- 14 J. A. Ibers, W. C. Hamilton. *International Tables for X-Ray Crystallography* [M]. Birmingham: Kynoch Press, 1974. 79~150