

# 超晶格 (CdTe-ZnTe)/ZnTe/GaAs(001) 红外材料的 X 射线测定\*

钟福民 陈京一 朱南昌

(中国科学院上海冶金研究所, 上海, 200050)

李杰 袁诗鑫

(中国科学院上海技术物理研究所, 上海, 200083)

**摘要** 用 X 射线衍射并结合 X 射线动力学衍射理论模型的计算机模拟方法, 对简单和复杂两种结构的 (CdTe-ZnTe)/ZnTe/GaAs(001) 应变超晶格材料的结构和完整性进行了研究, 得到了它的结构参数.

**关键词** X 射线衍射, 应变超晶格, 计算机模拟, 结构参数.

## 引言

X 射线衍射和 X 射线双晶衍射技术是研究超晶格及多量子阱材料结构的有效手段之一<sup>[1~4]</sup>. 由于普通 X 射线衍射仪的功率较高, 可以测量外延层较薄的样品, 衍射曲线仅包含晶面间距的信息, 缺点是需要寻找最佳入射方向, 并且很难作不对称衍射, 容易产生误差和不易确定界面的失配状态. 另外, 由于衍射仪入射束发散度大以及非单色性, 使得衍射仪得到的衍射曲线在峰宽上不能作定量分析, 但这些不影响衍射峰的相对强度分布<sup>[5]</sup>. 一般的双晶衍射仪光束经过准直后强度低, 不利于分析厚度很薄的样品. 由于本文所用样品的外延层厚度较薄, 因此采用普通 X 射线衍射仪测量样品的 (004) 衍射曲线, 并用 X 射线动力学衍射理论计算和分析了这两组样品的衍射曲线, 得到其结构参数.

## 1 实验

样品为原子层外延 ALE (Atomic Layer Epitaxy) 生长的 ZnTe/CdTe 超晶格, 其设计结构如下: 先于 GaAs (001) 衬底上生长一层厚度为 0.25~3 μm 的 ZnTe 层, 然后

\* 中国科学院上海冶金研究所青年基金资助课题

本文 1992 年 8 月 24 日收到, 修改稿 1993 年 6 月 2 日收到

在上面交替生长 ZnTe 和 CdTe 薄层组成的超晶格, 然后加盖 ZnTe 层. 超晶格结构分简单和复杂两种: 一种是 a(ZnTe) 层和 b(CdTe) 层相互交替生长的简单超晶格; 另一种是 a(ZnTe) 层和 b(CdTe) 层交替生长形成  $M$  个内周期后, 该  $M$  个内周期又与 c(ZnTe) 层交替生长形成另一周期 (外周期) 的复杂超晶格材料, 如图 1 所示. 复杂超晶格结构由内外两周期组成, 其周期数分别为  $M$  和  $N$ . 其设计生长参数如表 1, 其中  $t_a$ 、 $t_b$  和  $t_c$  分别为 a、b 和 c 层的厚度.

表 1 ZnTe/CdTe 简单和复杂超晶格结构样品的设计生长参数  
Table 1 Designed growth parameters for ZnTe/CdTe superlattices with simple and complex structures

No	$t_a(\text{\AA})$	$t_b(\text{\AA})$	$t_c(\text{\AA})$	$M$	$N$	buffer ( $\mu\text{m}$ )
#19	80	15		40		3.0
#20	110	16		60		0.25
#23	210	60		10		0.8
#24	3.05	6.48	183	9	10	0.8
#27	12.2	6.48	214	7	6	0.8

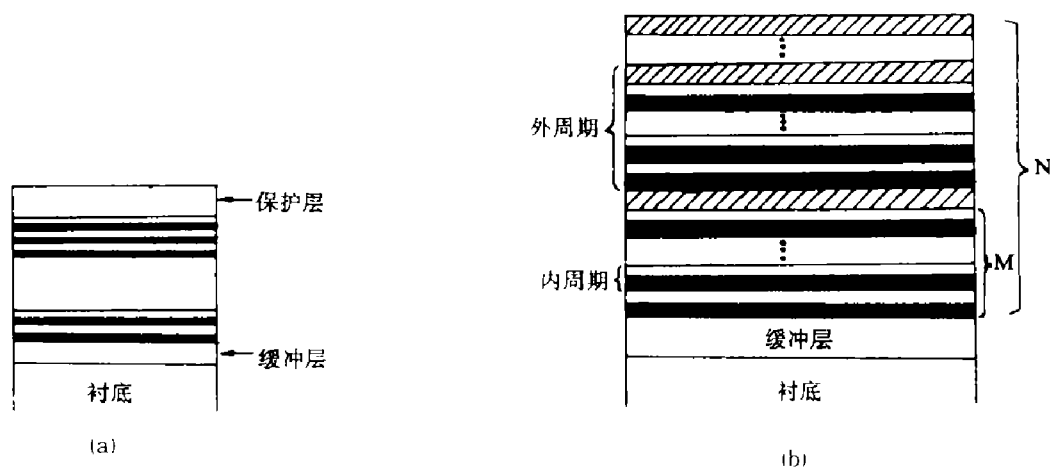


图 1 复杂超晶格的结构示意图, 黑色区为 a 层, 白色区为 b 层, 阴影区为 c 层  
Fig. 1 Schematic representation of the complex structure superlattice with a (black) b (white) and c (dashed) layers

样品晶体 (004) 附近衍射曲线的测定在理学 D/max-rA 衍射仪上进行,  $\text{CuK}\alpha$  辐射, 电压和电流分别为 30 kV 和 30 mA, 使用石墨单色器. 步进阶梯扫描,  $\theta-2\theta$  联动,  $2\theta$  每步  $0.025^\circ$ , 停留 5 s. 为了能较好较快地调整样品以记录其衍射曲线, 在实验前先根据设计的结构参数计算其 (004) 衍射曲线 (假定缓冲层完全弛豫和超晶格层共格生长), 计算得到的超晶格卫星峰的衍射强度为缓冲层强度的 300~1000 分之一,  $2\theta$  分布范围在  $52 \sim 62^\circ$  之间, 得到的实验曲线示于图 2 和图 3.

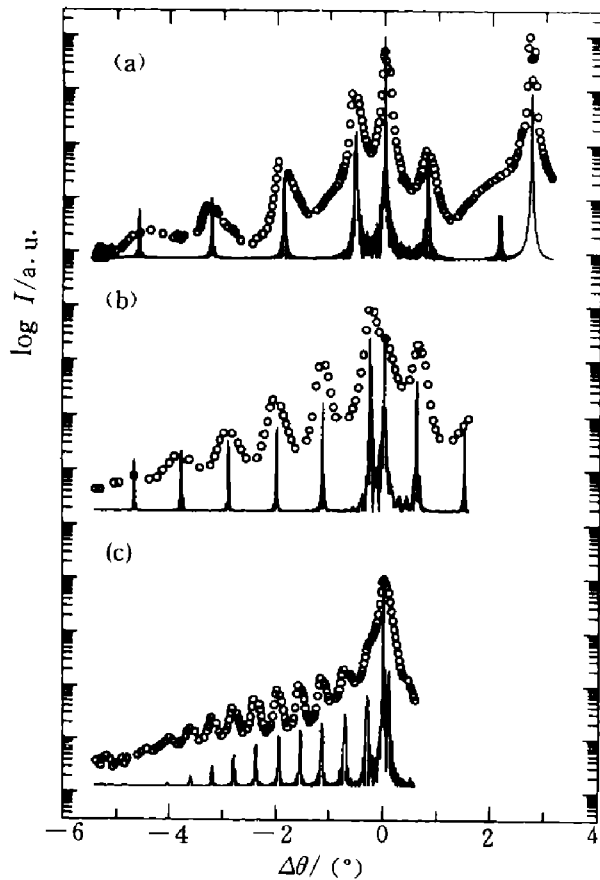


图 2 简单超晶格结构样品的 (004) 附近的实验 (圈点) 和理论计算 (实线) 衍射曲线  
Fig. 2 Experimental (circle) and calculated (solie line) diffraction profile around (004) diffraction of simple structure superlattices

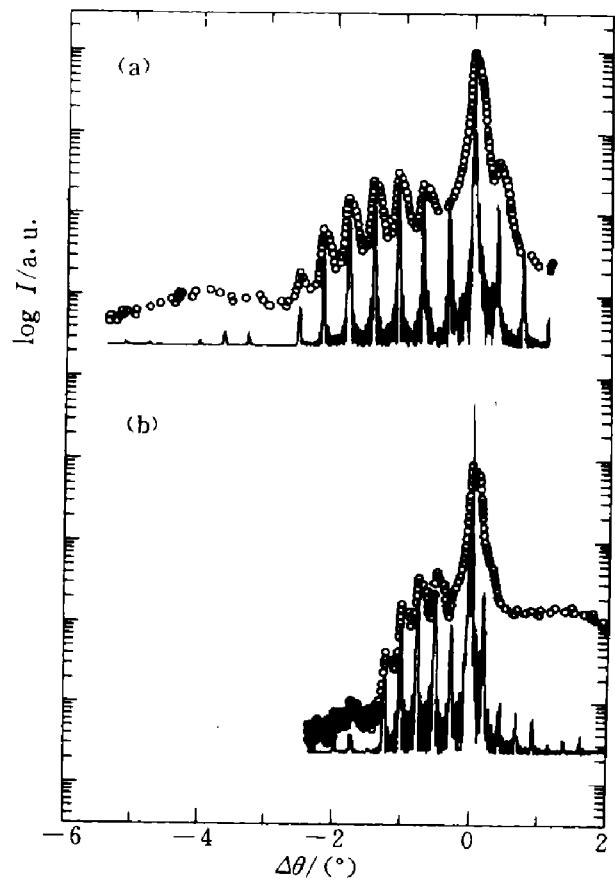


图 3 复杂超晶格结构样品的 (004) 附近实验 (圈点) 和理论计算 (实线) 衍射曲线  
Fig. 3 Experimental (circle) and calculated (solie line) diffraction profile around (004) diffraction of complex structure superlattices

## 2 结果分析

从图 2 和 3 可知, 5 个样品都显示出较多的卫星衍射峰, 说明样品中超晶格的周期结构比较完整, 同时也说明衍射仪的衍射曲线能基本显示出超晶格材料的结构, 但由于其光源的发散度较大及非单色性会引起峰形变宽, 背景增强并淹没一些精细结构. 从图 2(a) 中可以看出 ZnTe 缓冲层的 (004) 衍射峰与衬底 GaAs (004) 衍射峰的角距离为  $2.7^\circ$ , 与体单晶材料的角度差基本相同, 这是由于缓冲层的厚度已大大超过了共格生长的临界厚度, ZnTe 缓冲层处于弛豫状态, 即  $0^\circ$  度位置, 基本上没有受到 GaAs 的约束, 因此在其它衍射曲线上均省略了 GaAs 衬底衍射峰. 另外, 缓冲层峰的半峰宽为  $0.3^\circ$ , 超晶格卫星峰在 ZnTe 峰附近被淹没, 说明缓冲层的完整性较差.

按 X 射线平面波运动学理论, 如果衍射晶面与晶体表面平行, 则对简单超晶格结构, 这些卫星峰的位置由相邻两卫星峰间距  $\Delta\theta_p$  和零级卫星峰与衬底峰之间的角距离  $\Delta\theta_0^M$  确

定<sup>[5]</sup>, 即

$$\Delta\theta_p = \frac{\lambda}{2D \cos \theta_0}, \quad (1)$$

$$\Delta\theta_0^M = \frac{t_b}{t_a + t_b} (\Delta\theta_B^b + \Delta\theta_\epsilon^b). \quad (2)$$

这里  $D = t_a + t_b$  为超晶格样品的生长周期厚度,  $\lambda$  为入射 X 射线波长,  $\theta_0$  为超晶格 0 级卫星峰的峰位,  $\Delta\theta_B^b$  和  $\Delta\theta_\epsilon^b$  分别为 b(CdTe) 层由于点阵常数差异和应变差异引起的与衬底峰的角距离, 这里假定 a(ZnTe) 层无形变. 对于复杂超晶格结构, 其卫星峰的角距离  $\Delta\theta_p^N$  和 0 级卫星峰与衬底的角距离  $\Delta\theta_0^N$  可表示为<sup>[6]</sup>

$$\Delta\theta_p^N = \frac{\lambda}{2D_N \cos \theta_0}, \quad (3)$$

$$\Delta\theta_0^N = \frac{Mt_b}{D_N} (\Delta\theta_B^b + \Delta\theta_\epsilon^b), \quad (4)$$

其中  $D_N = M \times D + t_c$  为复杂超晶格的外周期厚度.

比较图 2 和 3 的衍射曲线可以发现, 简单超晶格结构的衍射曲线与复杂超晶格结构的衍射曲线有明显的差别, 简单超晶格结构曲线上的衍射峰强度由高到低逐渐降低, 后面没有起伏, 而复杂超晶格结构衍射曲线的卫星峰强度分布呈一鼓包状, 并且在强度降低到一定程度经过一拐点后又有所上升, 形成一隆起. 该拐点与衬底峰的角间距为<sup>[6]</sup>

$$\Delta\theta_t = \frac{\Delta\theta_p}{M} + \Delta\theta_0^M. \quad (5)$$

通过式 (1)~(5) 及 X 射线动力学衍射理论的理论计算模拟, 我们得到了它们的结构参数, 如表 2. 理论计算曲线在图 2 和 3 中用实线表示, 其峰的位置和强度分布都符合较好. 必须指出的是, 由于复杂超晶格结构的复杂性, 仅用较小衍射角度范围的衍射曲线来确定其结构是很难的, 特别是要确定超晶格界面共格状态. 表 2 中对复杂超晶格结构的计算仅给出了共格界面时的结构参数, 要确切地知道界面的共格情况和结构参数必须进行不对称衍射实验, 并增加记录衍射曲线的角度范围 (如 (002) 衍射). 表 2 中超晶格的周期厚度精度可达 1 Å 左右, 它取决于衍射仪的精度和卫星峰的半峰宽, 而周期中 a 层与

表 2 计算模拟得到的 ZnTe/CdTe 简单和复杂超晶格样品的结构参数

Table 2 Simulated results for ZnTe/CdTe superlattices with simple and complex structures

No	$t_a$ (Å)	$t_b$ (Å)	$t_c$ (Å)	$M$	$N$	buffer ( $\mu\text{m}$ )
#19	33.2	4.7		40		1.5
#20	54.7	3.4		60		0.25
#23	104.0	19.5		10		0.6
#24	2.63	1.36	103.8	9	10	0.6
#27	8.65	1.99	138.55	7	6	0.6

b、c 层厚度的分配与界面的共格状态有关。由于没有测量非对称衍射, 因此无法准确地给出界面共格状态的参数, 这将使 #19、#20 和 #23 样品的  $t_b$  有一个原子层的误差, 而 #24 和 #27 样品的  $t_b$  有可能增加一个原子层, 其余各层也有相应的误差。尽管如此, X 射线衍射仍然可以给出多量子阱材料必要的结构参数, 因而是研究超晶格及多量子阱材料的有效方法。

### 3 结论

通过对以上 ZnTe/CdTe 超晶格样品的实验曲线和计算模拟曲线的比较和分析, 我们可以得到以下结论:

(1) 简单超晶格结构与复杂超晶格结构的衍射曲线在卫星峰的分布上有较大区别。

(2) 由于衍射仪入射束的发散和非单色化, 衍射曲线的卫星峰半峰宽只能粗略地代表多量子阱的结构完整性。

(3) 设计生长参数与实际的生长参数有较大的差距, 因此生长工艺特别是厚度控制有待于进一步的改进, 以生长出所需结构的超晶格材料。

(4) 用衍射仪测量的衍射曲线与计算机计算模拟的理论曲线进行比较来确定和研究复杂超晶格结构是可行的, 但要准确地确定界面的共格状态, 必须测量非对称衍射, 同时需要大角度范围的衍射曲线来确定其结构。

### 参考文献

- 1 Speriosu V S *et al.* *Appl. Phys.*, 1984,56:1591
- 2 Wie C R *et al.* *J. Appl. Phys.*, 1986,59:3743
- 3 陈京一, 等. *半导体学报*, 1990,11:855
- 4 姜力, 王玉田, 等. *半导体学报*, 1989,10:86
- 5 钟福民, 等. *应用科学学报*, 1991,9:185
- 6 朱南昌. *中国科学院上海冶金研究所博士论文*, 1991

# STRUCTURE DETERMINATION OF INFRARED MATERIAL OF (CdTe-ZnTe)/ZnTe/GaAs (001) SUPERLATTICE BY X-RAY DIFFRACTION\*

Zhong Fuming Chen Jinyi Zhu Nanchang

*(Shanghai Institute of Metallurgy, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200050, China)*

Li Jie Yuan Shixin

*(Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China)*

**Abstract** The structure perfection of infrared materials of (CdTe-ZnTe)/ZnTe superlattices grown on GaAs (001) by atomic layer epitaxy was investigated by X-ray diffraction (XRD), combined with the analysis of kinematical X-ray diffraction theory and computer simulation of dynamical X-ray diffraction theory. The structure parameters were obtained for the simple and the complex structures of superlattices.

**Key words** X-ray diffraction, strained-layer superlattice, computer simulation, structure parameter.

---

\*The project supported by the Youth Foundation of the Shanghai Institute of Metallurgy, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200050, China