

CdZnTe 晶体 (111) 面摇摆曲线不唯一现象研究*

曾冬梅[†] 王 涛 李 强 查钢强 介万奇

(西北工业大学材料学院, 西安 710072)

摘要: CdZnTe 晶体通常利用其(333)晶面的 X 射线衍射摇摆曲线来检测(111)晶面的结晶质量. 本文根据 CdZnTe 晶体(333)面摇摆曲线实验结果, 首次提出了 CdZnTe 晶体摇摆曲线的不唯一现象. 摇摆曲线的这种不唯一现象是样品绕(111)面法线方向旋转 360°过程中, 晶体的(333)面和 $(\bar{3}\bar{3}\bar{3})$ 面在同一衍射几何中都发生了布拉格衍射, 优化扫描后得出两个摇摆曲线. 分析了 CdZnTe 晶体(333)面和 $(\bar{3}\bar{3}\bar{3})$ 面对 X 射线散射能力, 得出 CdZnTe 晶体(333)面的衍射强度小于 $(\bar{3}\bar{3}\bar{3})$ 面的衍射强度, 所以在同等实验条件下, 对同一 CdZnTe 晶片(333)面的摇摆曲线的强度比 $(\bar{3}\bar{3}\bar{3})$ 面摇摆曲线的强度低.

关键词: CdZnTe; 不唯一现象; 摇摆曲线; 结构因子

PACC: 6110D; 7280E; 8170J

中图分类号: TN304. 2⁺ 6

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2007)S0-0080-04

1 前言

CdZnTe 晶片晶体结构的完整性通常是用 X 射线衍射(X-ray diffraction, XRD)法来检查的^[1]. 高分辨 X 射线摇摆曲线可获取衍射峰的准确峰位、峰宽和精细结构, 为晶片质量检测提供了重要信息^[2]. CdZnTe 晶体 X 射线衍射摇摆曲线包括晶体结构的完整性、表面损伤程度、晶片的切偏角、晶片残余应力等方面的信息. 对于 CdZnTe 晶体而言, 一般利用其(333)晶面的 X 射线衍射摇摆曲线来检测(111)晶面的结晶质量^[1].

X 射线衍射摇摆曲线是将探测器固定在被测晶面衍射角 $2\theta_0$ 处, 转动样品改变入射角 θ_0 , 使之在半衍射角 θ_0 附近摆动, 获取衍射峰^[3]. 为了全面了解晶体结构信息, 在对 CdZnTe 晶体(333)面进行摇摆曲线实验时, 样品绕(111)面法线方向旋转 360°过程中, X 射线探测器在 360°范围内接收到了两条衍射峰, 分别对出现的两条衍射峰进行摇摆曲线的优化扫描, 可以得出两个摇摆曲线, 这两条摇摆曲线的衍射峰位、半峰宽及衍射峰强度都不一样. 为了弄清楚这是否是普遍现象, 我们对大量 CdZnTe 晶片都作了同样的 X 射线衍射实验, 结果发现所有试样在法线方向旋转 360°都可得出两条不同的摇摆曲线, 我们称这种现象为摇摆曲线的不唯一现象. 这个现象到目前为止尚未引起人们的重视, X 射线衍射仪的操作人员通常是任意的任选一条衍射峰进

行优化, 得出其摇摆曲线来评定晶体的结晶质量, 显然这种评定晶体质量的方法并不合理. 本文以 CdZnTe 晶体(111)面的摇摆曲线为例, 研究了 CdZnTe 样品绕(111)面法线方向旋转 360°时, 出现的两个摇摆曲线, 分析了(111)面摇摆曲线的这种不唯一现象的成因, 并通过对 CdZnTe 晶体不同晶面结构因子的分析来区分两条摇摆曲线.

2 实验与结果

实验所用的 X 射线衍射仪是 PANalytical 高分辨衍射仪, 所用试样是垂直布里奇曼法制备的 CdZnTe 晶体. 晶片沿(111)面定向切割后, 并用氧化镁进行机械抛光. 在室温下, 用 2% 的溴甲醇溶液对晶片进行 4min 的化学抛光. X 射线摇摆曲线的测量条件为: Cu 靶($\lambda = 0.15406\text{nm}$), 靶压和管电流分别为 40kV 和 25mA.

将 CdZnTe 晶片固定在旋转试样台上, 旋转试样台的旋转轴和 X 射线源、探测器的关系如图 1 所示. ϕ 轴、 Ψ 轴和 ω 轴分别是旋转试样台在三维空间中的三个旋转轴, 而衍射晶面的法线方向是 \hat{n} 轴. 采用 $\omega/2\theta$ 手动扫描模式, 具体步骤如下.

首先将探测器固定在被测晶片(333)面的理论衍射角 $2\theta_0$ ($2\theta_0 = 76.4^\circ$) 处, 在 ω 扫描方向转动试样 (ω 摆动范围一般为 5°), 然后对试样进行 ϕ 扫描, 为了全面的了解晶体结构信息, 采用的扫描范围是 360° 的连续扫描, 结果在 360° 范围内出现了两条衍

* 国家自然科学基金资助项目(批准号: 50336040)

[†] 通信作者. Email: zengdongmei1010@tom.com

2006-12-15 收到

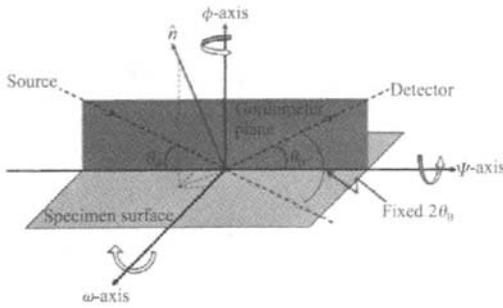


图1 旋转试样台的各旋转轴与 X 射线源、探测器的位置关系
Fig.1 Relationship among the specimen rotation axes, the source and detector positions

射峰,扫描结果如图 2 所示. 可以看到,在 $\phi = 0.48^\circ$ 和 $\phi = 162.86^\circ$ 位置处,出现了衍射峰,说明在这两个方位上的晶面都满足布拉格衍射方程,发生了衍射. 接着我们对这两条衍射峰分别再在 Ψ 方向上进行优化,得出这两个衍射峰的摇摆曲线,结果如图 3 所示. 其中曲线 *a* 是 $\phi = 162.86^\circ$ 时得到的摇摆曲线,曲线 *b* 是 $\phi = 0.48^\circ$ 时的摇摆曲线,可以看到这两个摇摆曲线的精确衍射峰位(ω 值)并不重合,且摇摆

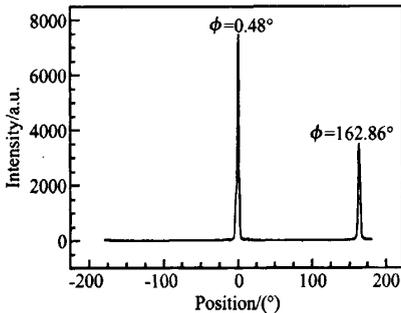


图2 CZT 晶片(333)面 360° 的 ϕ 扫描
Fig.2 ϕ scan for diffraction plane (333) of CZT

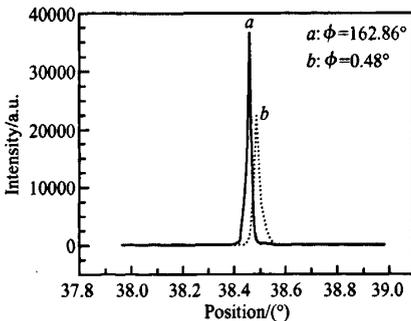


图3 CdZnTe 晶片不同 ϕ 位置的摇摆曲线
Fig.3 Rocking curve of the different ϕ positions of CdZnTe wafer

曲线 *a* 的衍射强度远大于摇摆曲线 *b* 的衍射强度.

表 1 列出了 CdZnTe 晶片绕(111)面法线方向旋转 360° 出现的两个摇摆曲线的结果. 从表 1 可看出,摇摆曲线 *a*,即在位置 $\phi = 162.86^\circ$ 处的衍射晶面与试样表面的偏角($\Psi = -1.01^\circ$)大于摇摆曲线 *b* 在 $\phi = 0.48^\circ$ 位置处偏角($\Psi = 0.11^\circ$). 然而,这两个位置处摇摆曲线的 FWHM 值差异却不大,曲线 *a* 的 FWHM = $90''$,曲线 *b* 的 FWHM = $92.52''$.

表 1 CdZnTe 晶片绕(111)面法线方向旋转 360° 出现的两个摇摆曲线的结果

Table 1 Data for X-ray rocking curves of planes (111) in CdZnTe wafer

	ϕ /($^\circ$)	Ψ /($^\circ$)	ω /($^\circ$)	FWHM /($''$)	Intensity /a. u.
Rocking curve <i>a</i>	162.86	-1.01	38.4596	90	36998.23
Rocking curve <i>b</i>	0.48	0.11	38.4778	92.52	27873.36

3 结果分析与讨论

CdZnTe 晶体试样表面的晶面指数是(111)面,通常是用(333)面摇摆曲线的半峰宽的值来评定晶体结晶质量的. 根据晶面夹角公式^[5]:

$$\cos\alpha = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}} \quad (1)$$

可知,(111)面与(333)面的夹角是 0° , (111)面与($\bar{3}\bar{3}\bar{3}$)面的夹角是 180° ,即(333)面和($\bar{3}\bar{3}\bar{3}$)面是与(111)面平行的两个晶面,(111)面位于(333)面和($\bar{3}\bar{3}\bar{3}$)面之间. 因此我们对 CdZnTe 样品做 X 射线摇摆曲线实验时,进行 0° 到 360° 的 ϕ 扫描,(333)面和($\bar{3}\bar{3}\bar{3}$)面都可以满足布拉格衍射. 从图 2 可以看到,出现两条衍射峰,这两条衍射峰与(333)面和($\bar{3}\bar{3}\bar{3}$)面是一一对应的. 理想晶体的(333)面与($\bar{3}\bar{3}\bar{3}$)面是成原点对称的两个晶面,理论上两个晶面法线方向夹角应是 180° ,即 CdZnTe 晶体经过 0° 到 360° 的扫描后出现的两条衍射峰的间距应是 180° ,然而实际晶体并不是理想晶体,由于存在晶体取向、晶体形状、晶体结构、倒易空间衍射几何和测试设备等诸多因素的影响,使得 CdZnTe 晶体经过 0° 到 360° 的 ϕ 扫描后出现的两条衍射峰的间距不是 180° .

由于 $Cd_{1-x}Zn_xTe$ 晶体的(111)面是极性面,规定 Zn,Cd 原子层为(111)面,Te 原子层为($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)面^[6]. CdZnTe 晶体的(111)面和($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)面的物理化学性质有所不同. 对于 $x = 0.04$ 的 $Cd_{1-x}Zn_xTe$ 而言,由于 Zn 含量很少,所以它的很多物理化学性质可以参考 CdTe 来确定. 下面具体分析 CdTe 晶体

(333)面和 $(\bar{3}\bar{3}\bar{3})$ 面对 X 射线散射能力。

CdTe 晶体(333)面是一层 Cd 原子, N 个相干散射的 Cd 原子排成一列, 当一束入射 X 射线照射到此原子层中的各个 Cd 原子上时, 每个 Cd 原子都将散射 X 射线, 将此原子层中所有原子求和, 可得到 Cd 原子层的散射线公式:

$$E_{Cd} = \sum_m E_{Bm} = E_c \exp \left[2\pi i \left(\frac{R_0}{\lambda} - \frac{t}{T} \right) \right] \times f_{Cd} \sum_m \exp \left[-2\pi i \times \frac{r_m \cdot (\sigma - \sigma_0)}{\lambda} \right] \quad (2)$$

式中 f_{Cd} 为 Cd 原子散射因数; σ_0 和 σ 是 X 射线的人射电子波矢和散射电子波矢; R_0 是原点到探测器的距离; λ 为波长^[6]. 经过分析计算可得出 Cd 原子层散射线强度与 Cd 原子散射因数存在如下关系:

$$I_{Cd} \propto |E_{Cd}|^2 \propto f_{Cd}^2 \quad (3)$$

CdTe 晶体 $(\bar{3}\bar{3}\bar{3})$ 面是一层 Te 原子, N 个相干散射的 Te 原子排成一列, 当一束入射 X 射线照射到此原子层中的各个 Te 原子上时, 每个 Te 原子都将散射 X 射线, 同理可得到 Te 原子层散射线强度与 Te 原子散射因数存在如下关系:

$$I_{Te} \propto |E_{Te}|^2 \propto f_{Te}^2 \quad (4)$$

比较(3)和(4)式可得, Cd 原子层对 X 射线的散射能力完全不同于 Te 原子层对 X 射线的散射能力, 也就是说 CdTe 晶体(333)面对 X 射线的衍射强度不同于 CdTe 晶体 $(\bar{3}\bar{3}\bar{3})$ 面对 X 射线的衍射强度. 从原子的散射因数数据表中查得: (333)面 Cd 原子散射因数 $f_{Cd} = 27.5$, Te 原子散射因数 $f_{Te} = 30.3$ ^[7], 得出 CdTe 晶体(333)面的衍射强度小于 $(\bar{3}\bar{3}\bar{3})$ 面的衍射强度.

考虑到 CdZnTe 晶体的结构性质可参考 CdTe 晶体的结构性质, 即 CdZnTe 晶体(333)面的衍射强度小于 $(\bar{3}\bar{3}\bar{3})$ 面的衍射强度, 从而判定图 3 中曲线 a (即 $\phi = 162.86^\circ$ 位置处的衍射峰) 为 $(\bar{3}\bar{3}\bar{3})$ 面的摇摆曲线, 而曲线 b (即 $\phi = 0.48^\circ$ 位置处衍射峰) 是(333)面的摇摆曲线. 然而, 从图 2 可看到, $\phi = 162.86^\circ$ 处的衍射峰强度明显小于 $\phi = 0.48^\circ$ 处的衍射峰强度. 分别优化这两处的衍射峰, 得出表 1 的方位角结果, 可知 $\phi = 162.86^\circ$ 处的衍射晶面由于和晶片表面的偏角很大, 致使在相同平面内参与衍射的

晶胞数较少, 使得此位置处的衍射峰强度小于 $\phi = 0.48^\circ$ 处的衍射峰强度, 这并不与(333)面摇摆曲线强度小于 $(\bar{3}\bar{3}\bar{3})$ 面摇摆曲线强度这个结论相违背.

4 结 论

首次发现 CdZnTe 样品绕(111)面法线方向旋转 360° 过程中, 出现了两个摇摆曲线. 分析认为, 出现摇摆曲线不唯一现象是由于晶体的(333)面和 $(\bar{3}\bar{3}\bar{3})$ 面在同一衍射几何中都发生了布拉格衍射, 经过优化扫描后都可得到摇摆曲线. 通过分析 CdZnTe 晶体 Cd 原子层和 Te 原子层对 X 射线散射能力, 得出 CdZnTe 晶体(333)面的衍射强度小于 $(\bar{3}\bar{3}\bar{3})$ 面的衍射强度, 所以在同等实验条件下, 对同一 CdZnTe 晶片(333)面的摇摆曲线的强度比 $(\bar{3}\bar{3}\bar{3})$ 面摇摆曲线的强度低.

参 考 文 献

- [1] Chu R W. High resolution X-ray diffraction characterization of semiconductor structures. Mater Sci Eng, 1994, R13(1): 16
- [2] Ning Yonggong, Ji Hong, Wang Zhihong, et al. Application of XRD rocking curve to evaluate the quality on single crystal substrates of film growing. Modern Instrument, 1999, (4): 34 (in Chinese) [宁永功, 姬洪, 王志红, 等. XRD 摇摆曲线在单晶基片质量检测中的应用. 现代仪器, 1999, (4): 34]
- [3] Fewster P F. X-ray diffraction from low-dimensional structures. Semicond Sci Technol, 1993, 8: 1915
- [4] Ma Shiliang. Metal of X-ray diffractometry. Xi'an: Publishing House of Northwest Polytechnic University, 1997: 13 (in Chinese) [马世良. 金属 X 射线衍射学. 西安: 西北工业大学出版, 1997: 13]
- [5] Liu Enke, Zhu Bingsheng, Luo Jinsheng, et al. Physics of semiconductor. Beijing: Publishing House of Defence Industry, 1994: 7 (in Chinese) [刘恩科, 朱秉升, 罗晋生, 等. 半导体物理学. 北京: 国防工业出版社, 1994: 7]
- [6] Fan Xiong. X-ray of metal science. Tianjin: Publishing House of Tianjin University, 1980: 66 (in Chinese) [范雄. X 射线金属学. 天津: 天津大学出版社, 1980: 66]
- [7] Ma Shiliang. Metal of X-ray diffractometry. Xi'an: Publishing House of Northwest Polytechnic University, 1997: 153 (in Chinese) [马世良. 金属 X 射线衍射学. 西安: 西北工业大学出版, 1997: 153]

Nounique Phenomenon of Rocking Curve on (111) Surfaces of CdZnTe Wafers*

Zeng Dongmei[†], Wang Tao, Li Qiang, Zha Gangqiang, and Jie Wanqi

(School of Materials Science and Engineering, Northwest Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

Abstract: The nounique phenomenon of rocking curve on the (111) surfaces of CdZnTe wafers was first discovered in X-ray diffraction measurement. The reason of the nounique phenomenon of rocking curve came into being was that both (333) plane and $(\bar{3}\bar{3}\bar{3})$ plane meet the Bragg diffraction. Two diffraction peaks were recorded in X-ray diffraction measurement in the course of 360° of rotation about phi axis. By optimizing each diffraction peak, we obtained two rocking curves. One rocking curve is from the (333) plane, and the other is from the $(\bar{3}\bar{3}\bar{3})$ plane. After analyzing the scattered capacity of (333) plane and $(\bar{3}\bar{3}\bar{3})$ planes to X-ray, we concluded that the diffraction intensity of the (333) plane is smaller than that of the $(\bar{3}\bar{3}\bar{3})$ plane, and the intensity of the rocking curve on (333) plane is also smaller than that of the $(\bar{3}\bar{3}\bar{3})$ plane.

Key words: CdZnTe; nounique phenomenon; rocking curve; structure factor

PACC: 6110D; 7280E; 8170J

Article ID: 0253-4177(2007)S0-0080-04

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (No.50336040)

[†] Corresponding author. Email: zengdongmeilolo@tom.com

Received 15 December 2006