

$Cd_{1-x}Zn_xTe$ 和 $Cd_{1-y}Hg_yTe$ 系的 晶格常数的测定

于福聚 徐三保 张恕明

(中国科学院上海技术物理研究所)

1986 年 7 月 12 日收到

本文给出含 Zn 量 $0.00 \leq x \leq 0.10$ 的 $Cd_{1-x}Zn_xTe$ 晶体晶格常数对组分 x 的变化曲线, 并与三元系 $Cd_{1-y}Hg_yTe$ 晶体晶格常数进行比较. 分别计算了 $Cd_{0.001}Zn_{0.001}Te-Cd_{0.1}Hg_{0.1}Te$ 和 $CdTe-Cd_{0.1}Hg_{0.1}Te$ 双晶系的晶格失配度, 讨论了其晶格匹配.

一、引 言

由于 ZnTe 晶体比 CdTe 的键长较短, 单位键长的位错能较大, 所以即使含 Zn 量很少的 $Cd_{1-x}Zn_xTe$ 晶体, 位错密度也会比 CdTe 晶体大大减少(如对 x 为 0.03—0.04, 位错密度比 CdTe 低约一个数量级^[1]); 而且 $Cd_{1-x}Zn_xTe$ 缺陷密度较低, 机械强度较高; 再有 CdTe-ZnTe 系相图为扁凸透镜形状, 液-固相线距离较窄, 由液相变固相组分凝聚较少; 尤其是通过调节 Zn 的含量, 可使 $Cd_{1-x}Zn_xTe$ 的晶格常数与各种组分的 $Cd_{1-y}Hg_yTe$ 的晶格常数相匹配. 因此, 普遍认为 $Cd_{1-x}Zn_xTe$ 是代替 CdTe 作为液相外延 $Cd_{1-y}Hg_yTe$ 晶体衬底的一种较有希望的材料.

二、实验结果分析

为了弄清 HgTe-CdTe 和 ZnTe-CdTe 系晶格常数之间的匹配关系, 我们用 X 射线衍射仪测定了不同组分 x 值下 $Cd_{1-x}Zn_xTe$ 的晶格常数, 测定时用 CdTe 作为标样进行校准, 为了准确测量 d (晶面间距) 值, 取高衍射角分离 $CuK_{\alpha 1}$ X 射线衍射峰后, 取其对称线作为标定 d 值的峰位. 测得 d 值后再算得晶格常数, 结果由表 1 给出.

表 1 $Cd_{1-x}Zn_xTe$ 系不同组分 x 时的晶格常数 a

| 组分 x (原子比) | 0.00 | 0.02 | 0.04 | 0.06 | 0.10 |
|--------------|-------|-------|--------------------|--------------------|-------|
| 晶格常数 a (Å) | 6.483 | 6.474 | 6.460 ₁ | 6.458 ₁ | 6.438 |

为了寻求含 Zn 量不同的 $Cd_{1-x}Zn_xTe$ 和含 Hg 量不同的 $Cd_{1-y}Hg_yTe$ 系的晶格匹配关系, 我们又绘制了晶格常数随组分 x 和 y 的变化图, 图 1. 绘制图 1 时参照 Vegard 定

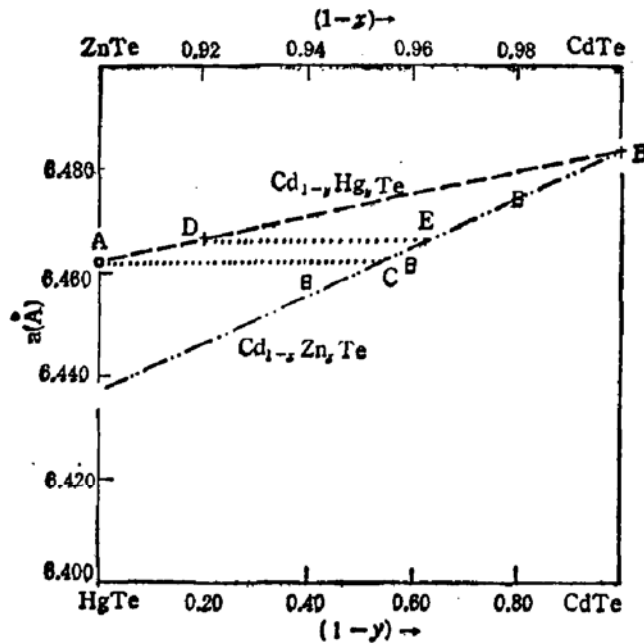


图1 $\text{Cd}_{1-y}\text{Hg}_y\text{Te}$ 和 $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ 系晶格常数 a 随组分 y 和 x 的变化
+取自[2], ○取自[3].

律。从图1可以看出各种组分的 $\text{Cd}_{1-y}\text{Hg}_y\text{Te}$ 的晶格常数, 都可以做到和其相应组分的 $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ 的晶格常数相匹配(含 Zn 量 0.045 以下的 $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ 晶体便可满足该要求。), 图中所给出的 ABC 三角形正是寻求该两种三元固溶体材料晶格匹配的参考。例如, 与 $\text{Cd}_{0.20}\text{Hg}_{0.80}\text{Te}$ 晶格恰相匹配的是 $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$, 图1中 DE 线段表示出了这种关系。精确的成分配比可使两种材料的晶格失配度达到极小值(即使 $\text{Cd}_{0.20}\text{Hg}_{0.80}\text{Te}$ 的组分偏差 1% 所引起的绝对误差也小于 0.01%)。而 $\text{Cd}_{0.20}\text{Hg}_{0.80}\text{Te}$ 与 CdTe 的晶格失配度约为 2.7×10^{-3} (根据公式 $f = \left| \frac{2(a_0 - a)}{a_0 + a} \right|$, 其中 a_0 为 CdTe 的晶格常数, a 为 $\text{Cd}_{0.20}\text{Hg}_{0.80}\text{Te}$ 的晶格常数^[4])。这就是说, $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ 取代 CdTe 作为液相外延 $\text{Cd}_{1-y}\text{Hg}_y\text{Te}$ 的衬底, 可把晶格失配度减少几个数量级, 在特定化学计量比之下, 晶格失配度可趋近于零。

本工作采用的 $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ 晶体, 系用三种元素一次合成, 直接长晶法制得的^[5]。晶体组分无明显分凝, 外观质量较好。

三、讨 论

CdZnTe 作为液相外延 CdHgTe 的衬底, 含 Zn 量在 0.045 以下可满足各种含 Hg 量的 CdHgTe 晶格匹配要求, 晶格失配度可达到极小。因此可获得质量较高的外延层(微观缺陷较少, 表面平整度好, 对衬底对向要求较低), 为高性能 CdHgTe 红外探测器列阵提供优质材料。

本文所提供的数据虽在一定误差限度内(尚未给出缺陷浓度对精度的影响), 但可作为研究两种材料晶格失配的参考。

参 考 文 献

- [1] S. L. Bell, *J. Vac. Sci. Technol.*, **A3**, 112 (1985).
 [2] 于福聚, 《红外物理与技术》, **5**, 45(1976).
 [3] J. Blair, *Metallurgy of Elemental and Compound Semiconductors*, Interscience, New York, **12**, 1961, 393.
 [4] J. H. Basson, *Phys. Stat. Sol.*, (**A**), **80**, 663 (1983).
 [5] 张素英, 林杏潮, 《三元系 CdZnTe 晶体生长》, 待发表.

Measurements of Lattice Parameter in Systems $Cd_{1-x}Zn_xTe$ and $Cd_{1-y}Hg_yTe$

Yu Fujun, Xu Sanbao and Zhang Shuming
 (Shanghai Institute of Technical Physics, Academia Sinica)

Abstract

The dependence of lattice parameters upon the compositions x ($0.00 \leq x \leq 0.10$) in $Cd_{1-x}Zn_xTe$ crystals are given, and the lattice parameters are compared with those of ternary $Cd_{1-y}Hg_yTe$ crystals. The misfit in bicrystal systems of $Cd_{0.094}Zn_{0.036}Te-Cd_{0.2}Hg_{0.8}Te$ and $CdTe-Cd_{0.1}Hg_{0.9}Te$ is calculated, and the lattice mismatch is discussed.