

# 晶体表面偏角对摇摆曲线 及其半峰宽的影响\*

李超荣 麦振洪 崔树范

中国科学院物理研究所, 北京, 100080

1991 年 4 月 11 日收到

本文应用 X 射线衍射动力学理论, 计算了晶体表面偏角对 X 射线双晶衍射摇摆曲线及其半峰宽的影响, 得出当晶体表面向某一方向存在一定的偏角时, X 射线的人射方向不同, 将造成摇摆曲线位置的变化和半峰宽的变化, 且其变化趋势随着入射角的变小而增大. 随着入射角的减小, 反射峰的半峰宽增大, 并向高角方向漂移. 采用掠入射的不对称衍射方式时, 偏角的影响更为明显.

PACC: 6110D; 6155

## 一、引 言

X 射线双晶衍射技术作为研究晶体完美性及多层膜结构的一个有效手段而得到广泛的应用. 对实际样品测定的 X 射线双晶摇摆曲线进行模拟计算, 可以确定实际样品的结构参数, 如表面膜的厚度、成份以及完美性等<sup>[1-4]</sup>. 在进行衍射动力学理论计算中, 常出现理论计算的半峰宽与实验测定的摇摆曲线的半峰宽之间存在较大的差异. 产生差异的原因, 以前只认为是由于入射 X 射线本身的非单色平面波或晶体结构不完美所引起<sup>[5]</sup>, 而忽视了晶体本身几何结构及入射 X 射线方向等因素. 实际上, 外延生长中所采用的基片由于在切磨抛的加工过程中出现偏差, 难以得到所需的严格晶体表面, 往往存在一个偏角; 有时为达到某些目的, 如在 Si 衬底上外延 GaAs 中, 为消除外延膜的反相畴及促进形核<sup>[6,7]</sup>, 而有意使晶体表面(001)向[110]方向偏离一定的角度. 因此, 如忽视偏角对摇摆曲线的影响, 在进行实验结果分析时, 将造成一定的偏差.

本文根据 X 射线衍射动力学理论, 计算当晶体表面并非严格的所给定的晶体指数面时, 对摇摆曲线和半峰宽的影响.

## 二、动力学衍射理论与反射率

根据畸变晶体的 X 射线衍射动力学理论的高木方程组<sup>[8,9]</sup>:

\* 国家自然科学基金资助的课题.

$$\begin{aligned} \frac{i\lambda}{\pi} \gamma_0 \frac{dD_0}{dz} &= x_0 D_0 + C X_h D_h, \\ \frac{i\lambda}{\pi} |\gamma_h| \frac{dD_h}{dZ} &= C X_h D_0 + (x_0 - \alpha_h) D_h. \end{aligned} \quad (1)$$

令  $Q = \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} \frac{D_h}{D_0}$  为反射振幅比, 有

$$\frac{dQ}{dZ} = iD(AQ^2 + BQ + E), \quad (2)$$

其中  $D = \frac{\pi}{\lambda} \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}}$ ,  $A = C \frac{\chi_h}{|\gamma_h|}$ ,  $E = C \frac{\chi_h}{|\gamma_h|}$ ,

$$B = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} \left( \frac{\chi_0}{\gamma_0} + \frac{x_0}{|\gamma_h|} - \frac{\alpha_h}{|\gamma_h|} \right),$$

$\lambda$  为入射 X 射线波长,  $\gamma_0, \gamma_h$  分别为入射束和衍射束的方向余弦,  $C$  为偏振因子,  $\chi_0, \chi_h, \chi_i$  为极化率

$$\chi_i = -\frac{\lambda^2}{\pi V} r_e F_i; \quad i = 0, h, \bar{h}, \quad (3)$$

$V$  为单胞体积,  $r_e$  为电子的经典半径,  $F_i$  为结构因子.

$$\alpha_h = 2\Delta\theta \sin 2\theta, \quad (4)$$

$\Delta\theta$  为与严格 Bragg 角的偏离.

由(2)式积分得反射率振幅比的迭代关系为

$$Q_{k+1} = \frac{Q_k S + i(E + BQ_k) \tan(DS t_k)}{S - i(B + AQ_k) \tan(DS t_k)}, \quad (5)$$

其中  $S = \sqrt{B^2 - AE}$ ,  $t_k$  为第  $k$  层厚度. 对半无限厚晶体, 有

$$Q_\infty = -\frac{B + S \times \text{sign}(\text{Im}S)}{A} \quad (6)$$

其中  $\text{sign}(\text{Im}S)$  为  $S$  虚部的符号.

样品的反射率  $R = |Q|^2$ , 与第一晶体的反射曲线卷积, 就得到双晶衍射摇摆曲线为

$$R(\beta) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} R_A(\alpha) R_B(\alpha + \beta) d\alpha}{\int_{-\infty}^{\infty} R_A(\alpha) d\alpha}. \quad (7)$$

### 三、晶体偏角与衍射条件

如图 1, 假定晶体表面向  $[110]$  方向偏离  $(001)$  方向  $4^\circ$ , 则入射角

$$\phi = \phi' - \delta, \quad (8)$$

$\phi'$  为无偏离时的入射角,  $\delta$  为由于  $4^\circ$  偏角引起的入射角的改变.

$$\phi' = \theta_B - \phi, \quad (9)$$

$\theta_B$  为 Bragg 角,  $\phi$  为衍射面与  $(001)$  面的夹角. 由图 1 可得

$$\delta = \arcsin\left(\frac{l \sin 4^\circ}{l / \cos \phi'}\right) = \arcsin(\sin 4^\circ \cos \phi'), \quad (10)$$

$\phi'$ 为[110]方向与入射面的夹角。对 $\{113\}$ , $\{115\}$ , $\{224\}$ 衍射, $\phi' = 0^\circ, 90^\circ$ 或 $180^\circ$ ;  $\delta = 4^\circ, 0^\circ$ 或 $-4^\circ$ ,而对于 $\{404\}$ 衍射, $\phi' = 90^\circ, 45^\circ$ 或 $135^\circ$ ,  $\delta = 0^\circ, 2.83^\circ$ 或 $-2.83^\circ$ 。

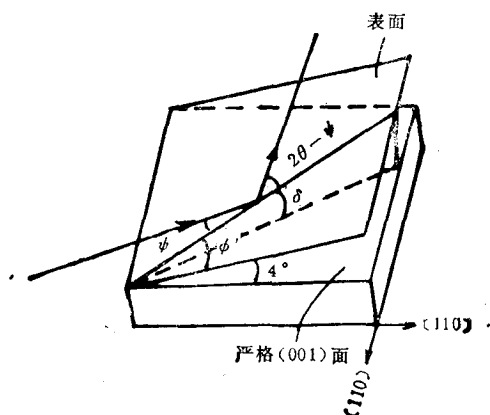


图1 入射角 $\phi$ 与偏角 $\delta$ 的关系

#### 四、计算结果与讨论

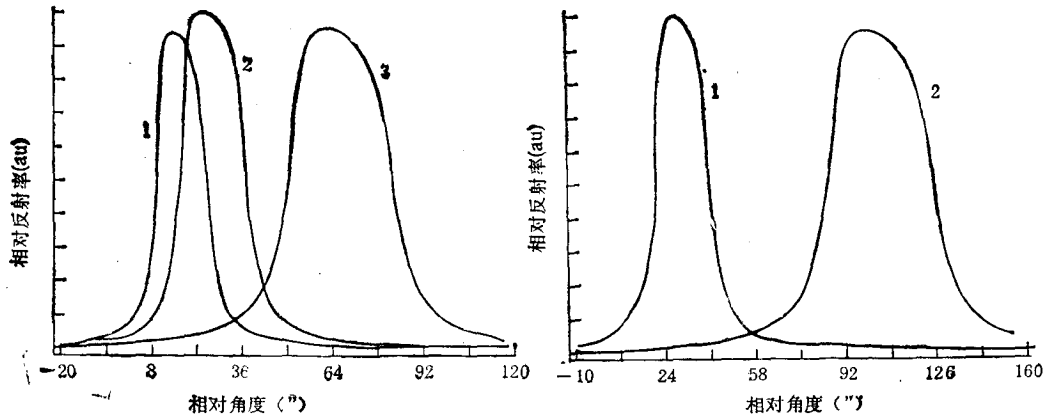
图2为理论计算的GaAs不同衍射面的摇摆曲线,计算时采用 $\text{CuK}\alpha_1$ 辐射,第一晶体为 $\text{Si}(224)$ 对称衍射,样品表面存在 $4^\circ$ 偏角。其半峰宽列于表1。从表1可知,对于相同的衍射面簇,由于入射方向的不同,使得入射角 $\phi$ 发生变化,从而引起半峰宽值的变化,并且 $\phi$ 角越小,其变化越显著。这可由Darwin理论解释。

表1 GaAs晶体不同衍射面和不同入射角的理论半峰宽

衍射面 $hkl$	Bragg角 ( $^\circ$ )	入射角 $\phi$ ( $^\circ$ )	$\frac{\sqrt{ r_h }}{r_0} / \sin 2\theta$	衍射动力学 理论半峰宽 ( $''$ )	Darwin 理论 半峰宽 ( $''$ )
$\bar{2}24$	41.879	2.62	4.686	33.26	30.73
224	41.879	6.62	2.928	21.02	19.73
224	41.879	10.62	2.294	16.55	15.04
113	26.867	1.63	6.541	41.29	37.96
$\bar{1}\bar{1}3$	26.867	5.63	3.418	21.82	19.84
404	50.429	2.60	4.763	30.11	27.81
044	50.429	5.43	3.305	21.03	19.30
404	50.429	8.26	2.686	17.19	15.69
004 <sup>1</sup>	33.027	29.03	1.219	10.59	9.12
004 <sup>2</sup>	33.027	33.04	1.094	9.38	8.19
004 <sup>3</sup>	33.027	37.03	0.982	8.43	7.35

注: 004<sup>1</sup>, 004<sup>2</sup>, 004<sup>3</sup>对应于图2中 $\phi'$ 为 $0^\circ, 90^\circ$ 和 $180^\circ$ 的情形。

根据Darwin理论<sup>[5]</sup>,完美晶体对X射线全反射的范围,即单晶理论反射曲线的半峰

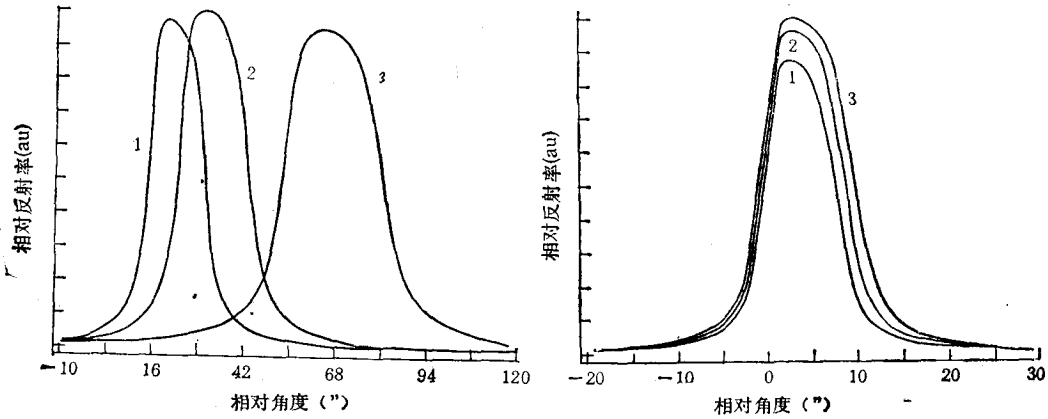


(a) {224}衍射

曲线 1 为  $\psi = 10.62^\circ$ ; 曲线 2 为  $\psi = 6.62^\circ$ ;  
曲线 3 为  $\psi = 2.62^\circ$

(b) {113}衍射

曲线 1 为  $\psi = 5.63^\circ$ ; 曲线 2 为  $\psi = 1.63^\circ$



(c) {404}衍射

曲线 1 为  $\psi = 8.26^\circ$ ; 曲线 2 为  $\psi = 5.43^\circ$ ;  
曲线 3 为  $\psi = 2.60^\circ$

(d) {004}衍射

曲线 1 为  $\psi = 37.03^\circ$ ; 曲线 2 为  $\psi = 33.03^\circ$ ;  
曲线 3 为  $\psi = 29.03^\circ$

图 2 不同衍射面、不同入射角时, GaAs 晶体的双晶衍射理论摇摆曲线  
第一晶体为 Si(224) 对称衍射;  $\text{CuK}\alpha_1$  辐射

宽为

$$\Delta\theta_{1/2} = 2C |\chi_h| \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} / \sin 2\theta_B, \quad (11)$$

其中

$$\begin{aligned} \gamma_0 &= \cos(90 - \psi) = \sin(\theta - \phi - \delta), \\ \gamma_h &= \cos(90 + 2\theta - \psi) = -\sin(\theta + \phi + \delta). \end{aligned} \quad (12)$$

由(11)式可知, 半峰宽除与极化率  $|\chi_h|$ , 偏振态  $C$  有关外, 还与衍射面及方向余弦有关。表

1 还列出了按 Darwin 理论计算, 单晶反射曲线的半峰宽和  $\sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} / \sin 2\theta_B$  的值。可以看到, 当衍射面簇相同时, 单晶和双晶摇摆曲线的半峰宽值都随入射角  $\psi$  的增大而减小。对于相同的衍射条件, 双晶衍射的理论半峰宽比单晶的大, 这是因为双晶衍射摇摆曲线是第一晶体和样品反射曲线的卷积, 受到第一晶体发散度的影响。

从图 2 可看到,对于同一衍射面簇,当入射角  $\phi$  减小时,曲线向高角度方向移动。根据 X 射线衍射动力学理论<sup>[10,11]</sup>,整个晶体的反射角范围可分为三个区域,即全反射区域和它的相邻区域,如图 3,全反射区域对应于  $-1 < y < +1$ 。

$$y = \frac{\beta}{2C \sqrt{\chi_h \chi_0 \frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}}}, \quad (13)$$

其中 
$$\beta = -\alpha_h - \chi_0 \left(1 - \frac{\gamma_h}{\gamma_0}\right). \quad (14)$$

区域 I 对应于  $y < -1$ , 区域 II 对应于全反射区,区域 III 对应于  $y > 1$ 。反射曲线的中心位置为  $y = 0$ , 即  $\beta = 0$ 。图 3 为无吸收晶体的反射曲线。而图 2 中的摇摆曲线是考虑吸收后的双晶反射曲线,因此,曲线不对称,即对应于  $\beta = 0$  的位置不在摇摆曲线的极大值,而应在其半高线的中点。由  $\beta = 0$  得到,动力学衍射峰的半高线中点与严格 Bragg 位置峰位的漂移为

$$\alpha_h = 2(\theta - \theta_B) \sin 2\theta_B = -\chi_0 \left(1 - \frac{\gamma_h}{\gamma_0}\right), \quad (15)$$

$$\Delta\theta = -\chi_0 \left(1 - \frac{\gamma_h}{\gamma_0}\right) / 2 \sin 2\theta_B. \quad (16)$$

由于极化率  $\chi_0 < 0$ ,对于 Bragg 衍射条件  $\gamma_h < 0$ ,因此  $\Delta\theta > 0$ ,曲线总是向高角度方向漂移,移动量与  $\left(1 - \frac{\gamma_h}{\gamma_0}\right)$  成正比,随  $\phi$  的减小, $\gamma_0$  减小, $|\gamma_h|$  增大,因此漂移量增大。计算出的与图 2 曲线相同衍射条件的漂移值列于表 2,比较表 2 与图 3 中摇摆曲线的位置,可看出两者符合很好。

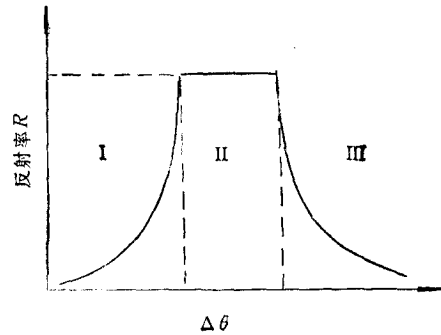


图 3 理想的无吸收晶体的反射曲线

表 2 图 2 摇摆曲线半高线中点位置的计算值(单位: °)

曲 线	1	2	3
(a)	18.7	28.5	68.2
(b)	29.6	104.5	
(c)	21.2	32.1	66.6
(d)	5.9	6.6	7.4

## 五、结 论

当晶体表面存在偏角时,对于同一衍射面簇, X 射线的不同入射方向,其双晶衍射摇摆曲线及其半峰宽将发生变化,随着入射角的减小,半峰宽加宽,摇摆曲线向高角度方向漂移。因此,在实验中要准确确定样品的结构参数及完美性,必须首先确定样品表面的偏

角和偏离方向,并注意 X 射线的人射方向,然后与理论计算模拟结果进行比较修正,才能得到较合理的结果。

- [1] W. J. Bartels and W. Nijman, *J. Cryst. Growth*, **44**(1978), 518.
- [2] Z. H. Mai, S. F. Cui and C. G. He, *Phys. Rev.*, **B41**(1990), 9930.
- [3] V. S. Speriosu and T. Vreeland, *J. Appl. Phys.*, **56**(1984), 1591.
- [4] L. Tapfer and K. Ploog, *Phys. Rev.*, **B33**(1986), 5565.
- [5] 许顺生、冯端主编, X射线衍射衬貌相学, 科学出版社, (1987).
- [6] T. Soga, S. Hattori and M. Umeno, *J. Cryst. Growth*, **77**(1986), 498.
- [7] B. Y. Tsaur and G. M. Metzger, *Appl. Phys. Lett.*, **45**(1984), 535.
- [8] S. Takagi, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **26**(1969), 1239.
- [9] O. Taupin, *Bull. Soc. Franc. Miner. Cryst.*, **87**(1964), 469.
- [10] Z. G. Pinsker, *Dynamical Scattering of X-Rays in Crystal*, Spinger-Verlag Berlin Heidelberg, New York, (1978).
- [11] 麦振洪、贺楚光、崔树范, 物理学报, **39**(1990), 782.

## THE INFLUENCE OF THE DEVIATION ANGLE ON THE ROCKING CURVE AND ITS WIDTH

LI CHAO-RONG    MAI ZHEN-HONG    CUI SHU-FAN

*Institute of Physics, Academia Sinica, Beijing, 100080*

(Received 11 April 1991)

### ABSTRACT

The influence of the deviation angle of the sample surface from the exact crystalline surface on the X-ray double crystal rocking curves and its full width at half maximum (FWHM) were investigated based on the X-ray dynamical diffraction theory. The results show that when the sample surface has a deviation from the exact crystalline surface, the profile of rocking curves and their FWHMs are dependent on the incident angle and the direction of X-ray beam. Moreover, with the decreasing of the incident angle, the FWHM of rocking curve increases, and the reflection peaks shift to the high angle region. This influence becomes more significant when the asymmetrical diffraction is used.

**PACC:** 6110D; 6155