

Hg_{1-x}Cd_xTe 分子束外延薄膜晶格参数 与组分关系的研究*

王庆学[†] 杨建荣 孙 涛 魏彦锋 方维政 何 力

(中国科学院上海技术物理研究所, 上海 200083)

(2004 年 10 月 13 日收到 2005 年 3 月 10 日收到修改稿)

高分辨率 x 射线衍射技术被应用于 Hg_{1-x}Cd_xTe 分子束外延薄膜晶格参数的测量及其晶格应变状态的研究, 研究发现 Hg_{1-x}Cd_xTe 分子束外延薄膜内既存在正应变也存在剪切应变. 通过应用晶体弹性理论, 对 Hg_{1-x}Cd_xTe 分子束外延薄膜的应变状态进行了定量的分析与计算, 获得了 Hg_{1-x}Cd_xTe 分子束外延薄膜在完全弛豫状态下的晶格参数, 从而得到了 Hg_{1-x}Cd_xTe 分子束外延薄膜晶格参数与组分的关系, 该关系符合 Vegard's 定律, 而不是早期研究所给出的 Higgins 公式. 研究还发现, 根据对称衍射测量所得到的(224)晶面间距, 可直接计算出 Hg_{1-x}Cd_xTe 分子束外延薄膜晶格参数, 并用 Vegard's 定律确定组分的方法, 可作为估算 Hg_{1-x}Cd_xTe 分子束外延材料组分的常规技术, 其组分的测量误差在 0.01 左右.

关键词: Hg_{1-x}Cd_xTe 薄膜, 晶格参数, 组分, 应变

PACC: 6110, 0340D, 0785

1. 引 言

Hg_{1-x}Cd_xTe 外延材料是制备高性能红外焦平面器件的最佳材料^[1,2]. 随着红外焦平面器件制备技术的发展和应用需求的日益提高, 器件对 Hg_{1-x}Cd_xTe 外延材料组分及其分布的精确控制提出了越来越高的要求. 适量的组分梯度有助于少子向结区扩散, 从而提高器件的电流响应率, 同时, 通过组分的精确控制也可以减小和避免界面晶格失配, 以减少和消除外延材料中的失配位错、应变和应力, 从而提高外延薄膜的晶体质量^[3]. 运用 x 射线衍射技术测定材料晶格参数来确定材料组分, 是一种经典的、直接的测试材料组分的技术. 尽管 Hg_{1-x}Cd_xTe 的晶格参数随组分的变化非常小, 但随着高分辨 x 射线三轴衍射技术的发展和测量精度的提高, 利用晶格参数与组分的关系来精确测量 Hg_{1-x}Cd_xTe 材料组分在技术上已能够实现. 同时, 高分辨 x 射线衍射技术也是研究晶格失配、位错、应变和评价外延材料晶体质量的重要手段^[4], 但这些

均需要确切地知道 Hg_{1-x}Cd_xTe 半导体材料的晶格参数与组分之间的关系. 目前, Hg_{1-x}Cd_xTe 半导体的晶格参数与组分的关系均来自于体材料的测试数据, 而由于生长工艺和测试条件的差异, 各个研究者所得到的晶格参数与组分的关系有些差别, 以 Higgins 公式应用最为广泛^[5]. 然而, 在 Hg_{1-x}Cd_xTe 外延薄膜 x 射线衍射的研究中发现, Hg_{1-x}Cd_xTe 外延材料的组分与晶格参数的关系目前并不清楚, 采用 Higgins 公式得到的碲镉汞外延材料的组分与红外光谱技术的测量值相比, 其差异很大. 因此, 为生长高质量的 Hg_{1-x}Cd_xTe 外延薄膜材料, 重新测定外延薄膜的晶格参数与组分的关系是非常必要的.

本文采用双层薄膜(Hg_{1-x}Cd_xTe/CdTe)模型以及非线性最小二乘法, 对 Hg_{1-x}Cd_xTe 分子束外延材料的红外透射光谱进行了高精度拟合^[6], 由此获得 Hg_{1-x}Cd_xTe 外延材料的表面组分. Hg_{1-x}Cd_xTe 外延材料表面的晶格参数采用高分辨多晶 x 射线衍射仪及 Fewster 法测定. 同时, 运用对称衍射和非对称衍射的倒易空间图以及晶体弹性理论, 对 Hg_{1-x}Cd_xTe

* 国家自然科学基金(批准号 60221502)资助的课题.

[†]E-mail: qxwangemail@163.com

外延材料的应变状态给予了详细的分析,求得了完全弛豫状态下的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 外延材料的晶格参数,进而获得了 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 分子束外延材料的晶格参数与组分的关系.结果发现这一关系符合 Vegard's 定律(即晶格常数与组分满足线性关系),而不是 Higgins 公式.

2. 实 验

2.1. $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 外延薄膜的制备

$\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 分子束外延材料是采用 RIBER32P 分子束外延系统在半绝缘的 GaAs [112] 衬底上生长的.生长的原材料为高纯 CdTe, Te 和 Hg, 组分 x 是通过控制 CdTe 和 Hg 的束流比来控制的,生长过程中采用高能电子衍射束和红外测温仪对外延层的晶体质量和组分进行实时监控.由于 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 外延层与 GaAs 衬底的晶格失配较大,为减少晶格失配所引入位错等缺陷以及控制衬底中 Ga 元素向外延层的扩散,在生长 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 外延层前,先生长 CdTe 缓冲层,其厚度约为 $3\ \mu\text{m}$ 左右,然后在缓冲层上生长 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 薄膜,生长温度约为 $190\ ^\circ\text{C}$, $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 外延薄膜的厚度约为 $10\ \mu\text{m}$.为控制 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 外延材料中 Hg 空位的浓度以及电学特性,对生长后的原生片采用特定工艺进行热处理,热处理后 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 外延薄膜的 Hg 空位浓度低于 $5 \times 10^{15}\ \text{cm}^{-3}$,使材料呈 p 型导电特性.

2.2. 组分与厚度的测定

$\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 外延材料的组分和厚度是采用红外透射光谱测定的.本实验的红外透射光谱用 Nuxus 670 型傅里叶红外光谱仪测量,测量范围为 $400\text{--}6000\ \text{cm}^{-1}$,分辨率为 $4\ \text{cm}^{-1}$,入射几何为正入射.由于分子束外延和热处理均在较低温下进行,组分互扩散效应可以忽略不计,同时,分子束外延也不存在原材料成分变化的问题,外延层的纵向组分梯度也可忽略不计.红外透射光谱的理论拟合采用双层薄膜 ($\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{CdTe}$) 模型,并运用非线性最小二乘法使理论计算结果和实验结果相匹配,这样就可以获得碲镉汞外延材料的组分及 CdTe 缓冲层

和 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 外延层的厚度^[6].表 1 列出了运用红外光谱技术对本实验所用材料的测量结果.

表 1 分子束外延 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 样品的测试数据

样品编号	方位角/rad	晶格参数/nm	厚度/ μm	组分 x
g1	0	0.646635	13.1	0.2342
	$\pi/2$	0.646631		
g2	0	0.646671	10.6	0.2539
	$\pi/2$	0.646684		
g3	0	0.646780	11.1	0.3030
	$\pi/2$	0.646785		
g4	0	0.646792	10.7	0.3074
	$\pi/2$	0.646797		
g5	0	0.646788	15.2	0.3154
	$\pi/2$	0.646783		
g6	0	0.646826	11.1	0.3272
	$\pi/2$	0.646822		
g7	0	0.646933	11.6	0.3830
	$\pi/2$	0.646930		
g8	0	0.646966	12.1	0.4059
	$\pi/2$	0.646961		
g9	0	0.647126	13.2	0.4840
	$\pi/2$	0.647129		
g10	0	0.647259	13.6	0.5562
	$\pi/2$	0.647254		

2.3. 晶格参数的测定

晶格参数的精确测量是评价外延材料应变状态的重要指标.对于同一个衍射面,由于 Bond 法采用两个相反的方向入射 x 射线,从而消除了零点误差,因此,一直以来 Bond 法是单晶材料晶格参数测量的常用方法.然而,Bond 法测量单晶材料晶格参数的前提是必须保证样品是绝对平整和晶格完整性的一致性,但是对于一般的半导体外延材料很难确保这两个前提条件,因此 Bond 法测定晶格参数往往会引入误差^[7].近年来,Fewster 和 Andrew^[8]提出了采用高分辨多晶 x 射线衍射仪测定单晶材料的晶格参数,该方法不仅能够准确测定单晶的晶格参数,而且还克服了 Bond 法的缺点.高分辨多晶 x 射线衍射仪的基本原理见图 1. x 射线经过四晶单色器衍射后,获得准直单色 x 射线,然后被待测样品衍射,最后经分析晶体衍射后被探测器接收.单色器和分析

晶体均为完整的 Si 或 Ge 单晶,分析晶体限制了探测器仅能够接收在分析晶体本征半峰宽范围内的 x 射线,这样大大提高了仪器的分辨率.同时,分析晶体也能够准确确定仪器的零点,因此,待测衍射面的衍射角可以直接获得.另外,运用高分辨多晶 x 射线衍射仪,还能够测定样品各个衍射面的倒易空间图,这样可通过倒易空间图来测定样品的晶格参数和应变状态.

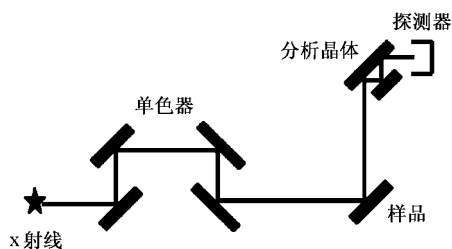


图 1 高分辨 x 射线衍射原理示意图

本实验的高分辨 x 射线衍射测试是在 Philips 公司生产的 X'pert-MRD 型高分辨 x 射线衍射仪上进行的,其衍射光路见图 1.该衍射仪的光源为 Cu 靶,经 $G\alpha(220)$ 四晶单色器,单色化获得 $CuK\alpha_1$ 辐射,且 $\Delta\lambda/\lambda$ 为 5×10^{-5} ,对于三轴衍射,探测器前端的分析晶体为 $G\alpha(220)$ 双晶 3 个反射面,其本征半峰宽为 $12''$,并且三轴衍射几何为 $(+n, -n, -n, +n, +m, -n, +n, -n)$.该衍射仪的载物台可以作三维旋转, ω 为入射 x 射线与样品表面之间的夹角, χ 为衍射面的法线偏离衍射仪平面的角度, φ 为围绕样品表面法线的旋转角度, 2θ 为样品某个衍射面的衍射角.在测定样品晶格参数时,通过调整 ω , χ 和 φ 使衍射面垂直于衍射仪平面,以减小衍射面倾斜 (χ) 对衍射角的影响. x 射线衍射仪的精度用 Si 标准晶体测定,在室温 ($23 \pm 2^\circ\text{C}$),两次时间相隔为 10 h 所测定 Si 标样的晶格参数分别为 0.543085 和 0.543083 nm, Si 标准晶体的晶格参数为 0.543089 nm.所以,两次测定的晶格参数与标准晶格参数相比,其偏差分别为 7×10^{-6} 和 11×10^{-6} ,两次测定 Si 标样晶格参数的重复性优于 2×10^{-6} .

$Hg_{1-x}Cd_xTe$ 分子束外延薄膜材料的晶格参数是通过测定 (224) 对称衍射面的晶面间距并经过折射率的修正而获得的.对于 (224) 衍射面而言,折射率导致 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 晶格参数的偏离约为 $53 \times 10^{-6}[9]$. $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 分子束外延薄膜样品晶格参数的测试数据也列于表 1 之中,表 1 中同时给出了两

个互相垂直的方位角方向上的晶格参数,可见两个方位角的晶格参数很接近,这表明外延薄膜晶格完整的一致性较高.由于 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 分子束外延薄膜的生长面不具有对称轴,因此,外延层中可能存在剪切应变,在此测定 (224) 对称衍射面、(333) 和 (115) 非对称衍射面的倒易空间图来研究 $[\bar{1}\bar{1}1]$ 晶向的剪切形变,而通过测定 (224) 对称衍射面、(404) 和 (044) 非对称衍射面的倒易空间图来研究 $[\bar{1}10]$ 晶向的剪切形变.测量条件:电压和电流分别为 40 kV 和 30 mA,实验中 x 射线的光斑为 $2 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$.

3. 结果及讨论

图 2 为 $Hg_{1-x}Cd_xTe(g1)$ 分子束外延薄膜的 (224) 对称衍射面、(333) 和 (115) 非对称衍射面的倒易空间图,且 $[\bar{1}\bar{1}1]$ 晶向在衍射仪器平面内,图中纵横坐标均为倒易晶格单位 (reciprocal lattice unit, rlu).由图 2 可见,对称衍射面倒易空间图的横坐标不为零,这是由于薄膜倾斜所致.由这一组倒易空间图,再经过倾斜的修正,可以得到 (224) 对称衍射面和 (333) 非对称衍射面之间的夹角为 19.4674° ,而 (224) 对称衍射面和 (115) 非对称衍射面之间的夹角为 19.4727° .对于具有闪锌矿结构 (Hg, Cd)Te 薄膜, (224) 对称衍射面与 (115) 和 (333) 非对称衍射面之间的理论夹角均为 19.4712° ,实验所测定角度与理论角度的不同则说明外延层内存在应变.同时,这两个测定角度的不同也证实 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 分子束外延薄膜材料在 $[\bar{1}\bar{1}1]$ 方向存在剪切应变,剪切应变的大小与测定角度与理论夹角之差有关.同样,图 3 给出了与图 2 的方位角度相互垂直的 (224) 对称衍射面、(044) 和 (404) 非对称衍射面的倒易空间图,即 $[\bar{1}10]$ 晶向在衍射仪器平面内. (224) 对称衍射面和 (044) 非对称衍射面间的夹角为 29.9927° ,而 (224) 对称衍射面和 (404) 非对称衍射面间的夹角为 29.9936° .然而 (224) 对称衍射面与 (044) 和 (404) 非对称衍射面间的理论角度却均为 30.0000° ,两个非对称衍射面与 (224) 对称衍射面间的夹角相差很小,这说明 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 分子束外延薄膜在 $[\bar{1}10]$ 晶向方向上的剪切应变很小,实验测定的两个角度与理论角度的不同则说明 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 薄膜内存在正应变.

图 4 为 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 外延薄膜内同时存在剪切应变和正应变的示意图. OB 为生长面, OC 为表面

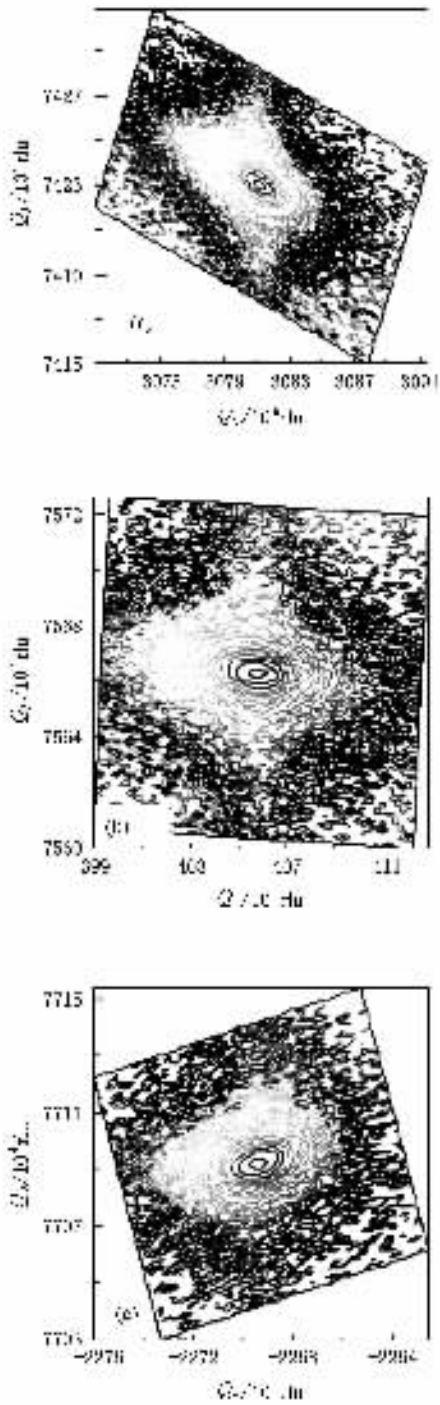


图2 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}(\text{gI})$ 薄膜的倒易空间图 (a)(333)非对称衍射面的倒易空间图, 纵横坐标的范围分别为 $7.4150\text{--}7.4309$ 和 $3.0709\text{--}3.0915\text{ nm}^{-1}$; (b)(224)对称衍射面的倒易空间图, 纵横坐标的范围分别为 $7.5598\text{--}7.5727$ 和 $0.3990\text{--}0.4128\text{ nm}^{-1}$; (c)(115)非对称衍射面的倒易空间图, 纵横坐标的范围分别为 $7.7030\text{--}7.7154$ 和 $-2.2760\text{--}-2.2622\text{ nm}^{-1}$

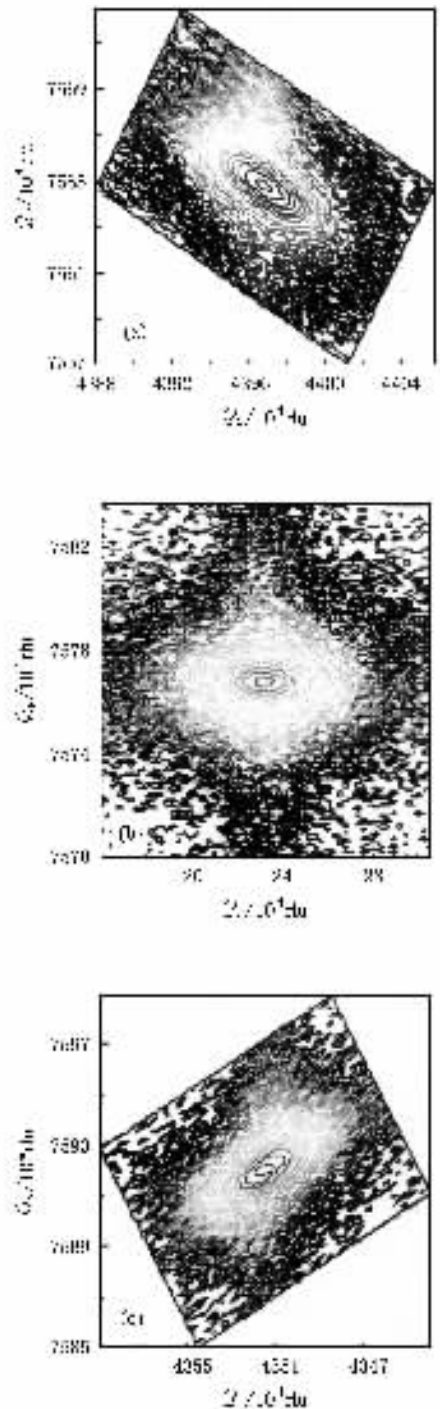


图3 与图2方位角垂直的衍射面的倒易空间图 (a)(044)非对称衍射面的倒易空间图, 纵横坐标的范围分别为 $7.5570\text{--}7.5729$ 和 $4.3880\text{--}4.4058\text{ nm}^{-1}$; (b)(224)对称衍射面的倒易空间图, 纵横坐标的范围分别为 $7.5700\text{--}7.5838$ 和 $0.0160\text{--}0.0306\text{ nm}^{-1}$; (c)(404)非对称衍射面的倒易空间图, 纵横坐标的范围分别为 $7.5850\text{--}7.5989$ 和 $-4.3589\text{--}-4.3441\text{ nm}^{-1}$

法线 BC 和 DC 均为与表面具有相同理论夹角的非对称衍射面. 线段 OC 为对称衍射晶面间距的一半,

$O'P$ 和 $O'Q$ 分别为这两个非对称衍射面的法线, 即为该衍射面的倒易晶格矢量方向. 当薄膜内仅存在

的应力变换关系 T_σ 以及应变变换关系 T_ϵ 变换后, 所得到的在 $x'y'z'$ 坐标系下应力和应变之间的关系为

$$(\sigma'_i, \tau'_{ij}) = C'(\epsilon'_i, \gamma'_{ij}), \quad (18)$$

式中, $C' = T_\sigma C T_\epsilon^{-1}$, σ'_i ($i = x, y, z$) 和 τ'_{ij} ($i, j = y, z, x$) 分别为正应力和剪切应力, ϵ'_j ($i = x, y, z$) 和 γ'_{ij} ($i, j = y, z, x$) 分别为正应变和剪切应变, c'_{ij} ($i, j = 1, 2, 3, 4, 5, 6$) 为弹性系数. 另外, 由于 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$

CdTe/GaAs 分子束外延薄膜的生长方向为 $[112]$ 晶向, 该晶向没有对称轴, 同时, $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 薄膜表面为自由表面, 即生长方向上的正应力为零, 因此其边界条件为 $\sigma'_z = 0, \gamma'_{x'y'} = 0$. 所以, 可以得到

$$\epsilon'_z = -\frac{c'_{31}\epsilon'_x + c'_{32}\epsilon'_y + c'_{34}\gamma'_{y'z'} + c'_{35}\gamma'_{z'x'}}{c'_{33}}. \quad (19)$$

在完全弛豫状态情况时, $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 分子束外延薄膜的晶格参数为

$$a_r = \frac{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} d_z (c'_{31} \cot \alpha'_{x'm} / \cot \alpha'_{x'l} + c'_{32} \cot \alpha'_{y'm} / \cot \alpha'_{y'l} + c'_{33})}{c'_{31} + c'_{32} + c'_{33} - c'_{34} \gamma'_{y'z'} - c'_{35} \gamma'_{z'x'}}, \quad (20)$$

式中, $\alpha'_{x'm} = \alpha'_{x'l} + \theta_s$, $\alpha'_{y'm}$ 也具有与 $\alpha'_{x'm}$ 类似的表达式.

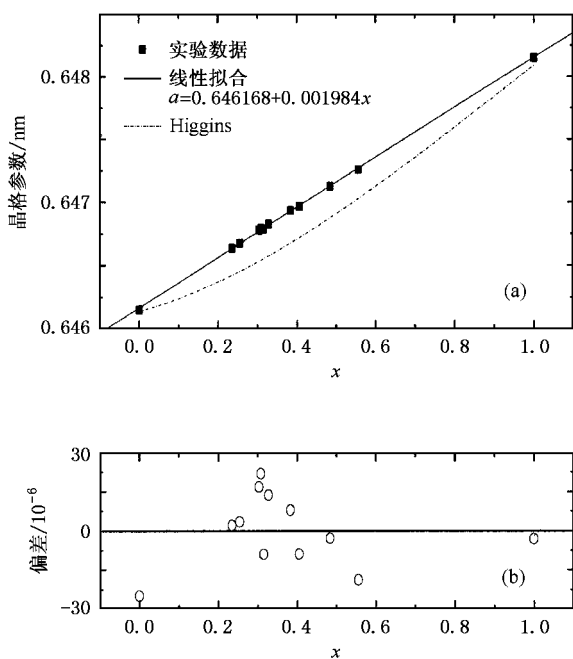


图5 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 薄膜的晶格参数与组分的关系 (a) 晶格参数与组分的关系, (b) 测试数据与拟合曲线偏差

根据图2和图3, 运用上述的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 分子束外延薄膜的应变分析结果以及文献[13]给出的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 材料的弹性参数, 可以获得 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 分子束外延薄膜 (g_1) 的应变状态及其在完全弛豫状态下的晶格参数. 将这一测试方法应用于表1中不同组分的碲镉汞分子束外延材料, 即可获得 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 外延材料晶格参数与组分的关系, 见图5(a). 图5(a)的结果显示 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 分子束外延材

料的晶格参数与组分关系呈很好的线性, 即符合 Vegard's 定律. 图5(b)为测试数据与拟合曲线的偏差, 测试数据点与拟合曲线的偏差均在 $\pm 25 \times 10^{-6}$ 以内, 说明拟合结果的误差范围为 $\pm 25 \times 10^{-6}$, 这表明运用晶格参数确定 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 分子束外延薄膜的组分具有足够的准确性和精度. 同时, 图5也给出了 Higgins 从 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 体材料所得到的晶格参数与组分的关系, 可见这一关系与 Vegard's 定律具有很大的差异. 在 $x = 0$ 和 $x = 1$ 时, 两个关系式相接近, 而对于其他组分, Higgins 公式则远偏离线性关系. 文献[14]指出, 金属有机物化学气相沉积 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 外延薄膜的晶格参数与组分的关系偏离 Higgins 公式, 是由于该薄膜材料内存在 Te 沉淀物等缺陷所致. 对于分子束外延材料而言, 尽管 Te 沉淀物等缺陷会导致晶格的膨胀, 但是这些因素所导致晶格参数的变化仅在 10^{-6} 数量级, 而由图5可见, 对于组分为 0.2 左右时, 两种关系所得出的晶格参数差异近 0.00027 nm. 所以, Vegard's 定律更能准确反映 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 分子束外延薄膜材料的晶格参数与组分的关系. 同样, 对于用红外光谱技术测定的组分为 0.22 的长波碲镉汞外延材料, 如果采用 Higgins 公式, 则该材料组分将变成 0.35. 组分为 0.35 的碲镉汞材料已为中波红外材料, 而器件应用的结果早已证明红外光谱技术测定的碲镉汞材料组分是正确的, 并已在现行材料制备技术中广泛应用. 因此, 用 Higgins 公式来描述碲镉汞分子束外延材料的晶格参数与组分之间的关系是不正确的.

另外, 在研究中也发现对于厚度为 $10 \mu\text{m}$ 左右的 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 分子束外延薄膜, 根据 (224) 晶面间

距直接得到的晶格参数,与运用晶体弹性理论所得到的在完全弛豫状态下的晶格参数相比,其差别很小,这说明尽管材料内存在着较大的剪切应变,但其垂直应变却很小.以样品 g1 为例,由(224)晶面间距的测量结果换算出的晶格参数和完全弛豫状态下的晶格参数的相对变化量仅为 2.52×10^{-5} .按图 5 拟合曲线的公式计算,该相对变化量导致组分的偏差仅为 0.01,此偏差对碲镉汞材料不算太大,一般情况下尚可接受.因此,采用对称衍射面的晶面间距计算晶格参数,并用 Vegard's 定律确定组分的方法,可作为测定 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 分子束外延薄膜组分的常规测量技术,而要精确测定材料组分必需测量其应变状态以及完全弛豫状态下的晶格参数.

4. 结 论

采用高分辨多晶 x 射线衍射仪,对 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$

分子束外延薄膜的对称衍射和非对称衍射的倒易空间图以及晶面间距进行了测量,结果发现由于 CdTe 缓冲层与碲镉汞外延材料之间的晶格失配,导致在碲镉汞分子束外延材料内存在形变.通过应用晶体弹性理论对 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 外延材料的形变状态进行定量分析计算,求得了在完全弛豫状态下的晶格参数.同时,将材料晶格参数和用红外透射光谱技术测量得到的材料表面组分对应后发现, $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 分子束外延材料的晶格参数与组分的关系符合 Vegard's 定律,与早期碲镉汞材料研究中提出的 Higgins 公式有很大的差异.对应变状态的研究还显示,通过测量 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 外延材料(224)的晶面间距直接计算出外延材料晶格参数的方法,可作为估算碲镉汞分子束外延材料组分的常规技术,其误差在 0.01 左右,但对外延材料组分的精确测量仍需测量材料在完全弛豫状态下的晶格参数.

-
- [1] Chen G B, Lu W, Cai W Y *et al* 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 911 (in Chinese) [陈贵宾、陆 卫、蔡炜颖等 2004 物理学报 **53** 911]
- [2] Chen G B, Li Z F, Cai W Y *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1496 (in Chinese) [陈贵宾、李志锋、蔡炜颖等 2003 物理学报 **52** 1496]
- [3] Skauli T, Colin T, Sjolie R *et al* 2000 *J. Electron. Mater.* **29** 687
- [4] Li C R, Wu L J, Chen W C 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2185 (in Chinese) [李超荣、吴立军、陈万春 2001 物理学报 **50** 2185]
- [5] Capper P 1994 *Properties of Narrow Gap Cadmium-based Compounds* (London : Chapman & Hall Press) p41
- [6] Yang J R, Wang S L, Guo S P *et al* 1996 *J. Infrared Millim. Waves* **15** 327 [杨建荣、王善力、郭世平等 1996 红外与毫米波学报 **15** 327]
- [7] Fewster P F, Andrew N L 1998 *Thin Solid Films* **319** 1
- [8] Fewster P F, Andrew N L 1995 *J. Appl. Cryst.* **28** 451
- [9] Barterls W J, Homstra J, Lobeek K J 1986 *Acta Cryst. A* **42** 539
- [10] Chen G, Liao L J 1992 *Principle of Crystals Physics* (Beijing : Science Press) p208 (in Chinese) [陈 纲、廖理几 1992 晶体物理学基础 (北京 科学出版社) 第 208 页]
- [11] Nye J F 1985 *Physical Properties of Crystals* (Oxford : Clarendon Press) p153
- [12] Wooster W A 1973 *Tensors and Group Theory for the Physical Properties of Crystals* (Oxford : Clarendon Press) p84
- [13] Berding M A, Nix W D, Rhiger D R *et al* 2000 *J. Electron. Mater.* **29** 676
- [14] Mainzer N, Zologoyabko E, Berner A *et al* 1999 *J. Cryst. Growth* **197** 542

Relationship between lattice parameters and compositions of molecular beam epitaxial $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ films^{*}

Wang Qing-Xue[†] Yang Jian-Rong Sun Tao Wei Yan-Feng Fang Wei-Zheng He Li

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

(Received 13 October 2004 ; revised manuscript received 10 March 2005)

Abstract

High-resolution x-ray diffraction technology is applied to the measurement of lattice parameters and the study of strain for $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ films grown by molecular beam epitaxy. The results show that there exist both perpendicular strain and shear strain in $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ films. Based on crystal elastic theory, strain states in $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ films are analyzed and calculated, and the lattice parameters of $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ films at the relaxation state are obtained. It is found that the relationship between lattice parameters and compositions of $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ films agrees with Vegard's law, rather than Higgins formula proposed in earlier research. It is also found that the lattice parameters can be derived from the measured data of (224) plane spacing, and that the compositions of $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ films can also be evaluated by using Vegard's law with an error about 0.01.

Keywords : $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ films, lattice parameter, composition, strain

PACC : 6110, 0340D, 0785

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60221502).

[†]E-mail : qxwangemail@163.com