

X 射线双晶衍射在分布布喇格反射镜研制中的应用 *

林世鸣 高洪海 张春辉 吴荣汉

(中国科学院半导体研究所 集成光电子国家重点实验室 100083)

庄 岩 王玉田

(中国科学院半导体研究所 国家光电子工艺中心 100083)

摘要 本文利用 X 光双晶衍射的动力学理论对垂直腔面发射激光器(VCSEL)的分布布喇格反射境(DBR)的特性曲线进行了模拟研究. 从中得到 DBR AlAs/Al_xGa_{1-x}As 的厚度及组分 x 值, 应用所得到的这些数值进行光学薄膜反射谱的模拟计算, 并与实验所测得的 DBR 反射谱进行比较, 得到了证实. 我们应用这套方法指导 VCSEL 外延片的生长, 获得了良好的结果.

PACC: 4255P, 6110, 6855B

1 引言

垂直腔面发射激光器结构是日本东京工业大学 Iga 教授在1977年提出的^[1], 由于 VCSEL 的面发光, 单纵模, 易于集成和与光纤耦合效率高, 引起科学工作者的广泛关注, 使该器件成为光电子器件领域的最热点之一, 并取得了惊人的进展^[2,3]. VCSEL 研制难度较大, 这主要是因为 VCSEL 的增益区短, 要求它的 DBR 反射镜反射率达到99%以上, 而且这两个 DBR 反射镜的高反带必须与 FP 腔的谐振频率以及量子阱材料的激射波长相匹配. 这就要求用 MBE 设备生长外延片时, 必须精确地控制外延片各层的生长速率. MBE 生长的 VCSEL 材料质量的优劣, 最直接的判别办法是进行光反射谱曲线的测量, 并结合光学薄膜理论进行模拟分析, 这种方法的优点是直接, 简便, 但它是组分与层厚的综合结果, 不易分别给出各自的数值^[4]. 并且测量精度不高. 应用 X 光双晶衍射技术分析外延生长晶体的信息, 在近些年有较大的发展, 通过 X 光双晶衍射曲线的理论模拟可以得出超晶格和量子阱的组分和厚度^[5]. 由于 VCSEL 的结构非常复杂, 而且层厚与 X 射线波长相差甚大, 因此本文仅选 VCSEL 中的 DBR 这一非常重要又具有一定规律性的 $\lambda/4$ 堆栈结构, 把实验测得的外延片的光反射谱和 X 射线双晶衍射曲线同光学薄膜理论模拟和 X 光双晶衍射曲线模拟结合起来进行分析研究.

* 国家自然科学基金资助项目

林世鸣 男, 1945年生, 研究员, 现从事半导体光电器件及其集成的研究
1994年12月21日收到初稿, 1995年4月5日收到修改稿

2 实验理论

垂直腔面发射激光器的 DBR 反射镜是一种 AlAs/AlGaAs 多周期的堆栈膜结构, 这种结构由于其水平方向的几何长度比垂直方向的几何长度大得多, 在水平面内作无穷大处理。这样 X 射线双晶衍射动力学的 Taupin 方程化为一维方程^[6,7]:

$$\begin{cases} \frac{i\lambda}{\pi}\gamma_o \frac{dD_o}{dz} = x_o D_o + cx_h - D_h \\ -\frac{i\lambda}{\pi}|\gamma_h| \frac{dD_h}{dz} = cx_h D_o + (x_o - \alpha_h) D_h \end{cases} \quad (1)$$

式中 γ_o, γ_h 分别为反射光和入射光的方向余弦, λ 为 X 射线波长, c 为偏振因子, x_h 为双光束近似的倒格矢系数 ($h=h, 0, \bar{h}$), 在数值上有 $x_h = -(e^2/\pi m f^2 \Omega) F_h$, 其中 F_h 为结构因子, Ω 为晶体原胞体积, e, m 为电子的电荷和质量, f 为 X 射线频率; $\alpha_h = -2\Delta\theta \sin 2\theta_b$, θ_b 为布喇格角, $\Delta\theta$ 为入射光对布喇格角的偏离, D_o, D_h 为入射光和反射光的电位移矢量。

定义反射振幅如下:

$$Q = \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_o}} \frac{D_h}{D_o} \quad (2)$$

则

$$\frac{dQ}{dz} = \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_o}} \left\{ \frac{1}{D_o} \frac{dD_h}{dz} - \frac{D_h}{D_o^2} \frac{dD_o}{dz} \right\} \quad (3)$$

(1), (2) 代入(3)式, 得:

$$\frac{dQ}{dz} = iD(AQ^2 + 2BQ + E) \quad (4)$$

其中 $A = cx_h/|\gamma_h|$, $B = \frac{1}{2}(\frac{x_o}{\gamma_o} + \frac{x_o}{|\gamma_h|} - \frac{\alpha_h}{|\gamma_h|}) \sqrt{\frac{\gamma_o}{|\gamma_h|}}$
 $D = \frac{\pi}{\lambda} \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_o}}$, $E = c x_h / |\gamma_h|$

A, B, D, E 是由实验的几何条件以及材料类型决定的特性参数, 考虑在每一外延薄层内, 成分单一, 在该层内上述特性参数均为常数, 在第 k 层内方程(4)的解可通过积分求得:

$$\int_{q_k}^{q_{k+1}} \frac{dQ}{(AQ^2 + 2BQ + E)} = \int_{z_k}^{z_{k+1}} iD dz$$

由上式, 我们得到第 k 个外延层的两个界面处的反射率迭代关系为:

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

式中 $S = \sqrt{B^2 - EA}$, $t_k = Z_k - Z_{k+1}$ 为第 k 个外延层的厚度。由于电位移矢量是连续的, (5)式所给出的迭代关系代表了相邻两个外延层反射振幅的迭代关系。因此, 从衬底界面出发, 利用(5)式逐层向上迭代, 就可以得到样品表面的反射率振幅, 取反射率振幅的模平方即得到样品表面处的反射率。

3 实验结果与讨论

本实验中所采用的样品是在 n 型 GaAs(001)衬底上用分子束外延方法生长的 25 个周

期 $\lambda/4$ 堆栈反射镜, 每个周期的结构参数设计为 AlAs(720 Å)/Al_{0.1}Ga_{0.9}As(600 Å). 为便于比较各衍射峰值的位置, 我们把实验曲线和模拟曲线放在同一张图中, 图1(a)给出的是 AlAs/As_xGa_{1-x}As $\lambda/4$ 堆栈反射镜的(002)衍射的实验摇摆曲线, 它是在国家光电子工艺中心的 X 射线双晶衍射仪上测得的, 此衍射仪波长为 1.546 Å, Cu 靶, $K\alpha_1$ 辐射, Ge 单色器, 角度测量精度为 0.001 度. 通过相邻的卫星峰的角距离我们可以精确地测出堆栈反射镜的周期值为 1288 Å, 设 $d_{\text{AlGaAs}}/1288 = y$, 在 x 和 y 的一定取值范围内, 利用前面的动力学理论对 X 射线双晶曲线进行模拟计算, 根据模拟曲线与实验曲线的拟合程度调整 x, y 值, 从而使两条曲线的吻合达到最佳. 图1(b)是我们模拟出的 X 射线摇摆曲线, 与实验曲线拟合得很好, 据此求得 $d_{\text{AlAs}} = 708.4 \text{ \AA}$, $d_{\text{AlGaAs}} = 579.6 \text{ \AA}$, Al_xGa_{1-x}As 的 x 值为 0.1, 与我们的设计值相比, Al_xGa_{1-x}As 中的 Al 组分值生长得相当精确, AlAs, Al_xGa_{1-x}As 的厚度与设计值比有 1%~3% 的不大的偏离.

DBR 是具有一定带宽的反射镜, 其高反带的位置由其内部结构值决定. 在实验中, 我们用比较 DBR 反射谱的模拟曲线和实验曲线的方法来判别 X 光双晶衍射曲线模拟给出的结构值是否可信. 为了便于比较实验曲线和模拟曲线的 DBR 高反射带的位置, 和图1一样, 在图2中, 我们把二曲线拟合到同一图中. 图2(a) 是我们应用光学薄膜理论对 $d_{\text{AlAs}} = 708.4 \text{ \AA}$,

$d_{\text{AlGaAs}} = 579.6 \text{ \AA}$ 进行反射率的模拟计算曲线, 图2(b)是实际测出的 DBR 的反射率曲线, 此曲线在高反带区域有一些倾斜是由于我们测量过程中使用的光电倍增管的响应曲线造成的. 由实验曲线可以看出, 实际生长的外延片的反射谱的高反带位置与我们利用模拟 X 射线曲线得到的结构值计算的反射谱曲线的高反带位置相符, 即在 8000 Å 附近高反带开始出现, 在 9000 Å 附近高反带下降, 这说明由 X 射线衍射曲线模拟给出的结构参数值是可靠的. 我们以前的工作曾经指出, 在用 MBE 法生长不同厚度的量子阱和 DBR 结构时, 其生长速率有所区别^[8], 因此用 X 射线衍射曲线模拟结果可以指导我们更精确地调整 MBE 生长 DBR 时的生长速率, 有助于实现 DBR 反射镜的高反带与

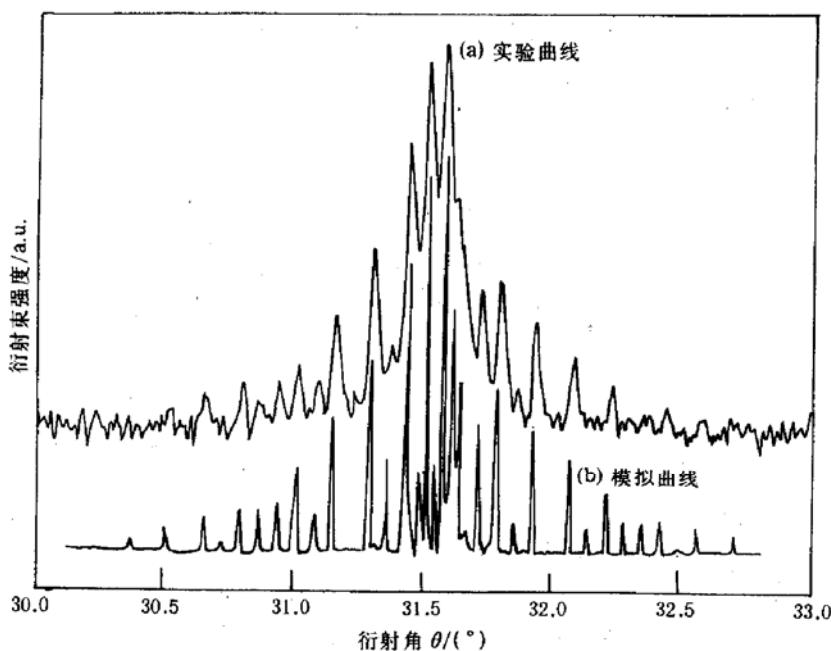


图 1 DBR 的 X 射线双晶衍射(a)实验曲线(b)模拟曲线(002)

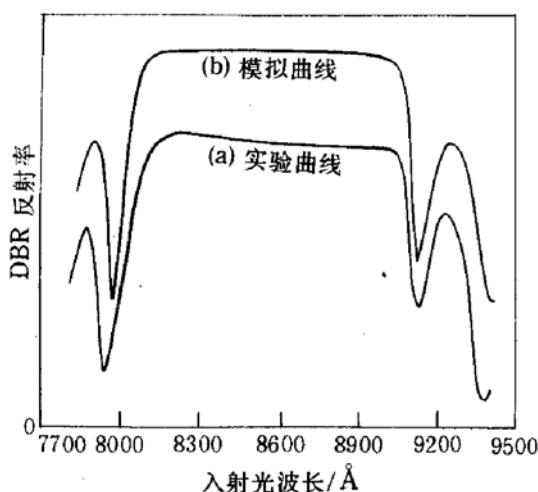


图 2 (a) DBR 反射谱的实验曲线
(b) DBR 反射谱模拟曲线

FP 腔的谐振频率以及量子阱材料的激射波长三者的匹配,从而降低 VCSEL 的激射阈值.

4 结论

X 射线双晶衍射法是检测分布布喇格反射镜结构中有关组分,层厚及均匀性等参数的一种十分有效的方法,与光学反射谱的方法相比,它较为复杂,但具有更好的精度和给出更多的参数值,我们把这两种方法结合起来检测 MBE 外延片,取得了较好的结果,并在此基础上制作出了垂直腔面发射激光器^[9].

参 考 文 献

- [1] K. Iga, F. Koyama and S. Kinoshita, IEEE J. Quantum Electron., 1988, **24**:1845~1855.
- [2] J. L. Jewell, J. P. Horbison, A. Scherer *et al.*, IEEE J. Quantum Electron., 1991, **27**:1332~1346.
- [3] R. S. Geels, S. W. Corzine and L. A. Coldren, IEEE J. Quantum Electron., 1991, **27**:1359~1367.
- [4] 林世鸣,半导体学报,1989, **11**(4):288~293.
- [5] V. S. Speriosu and T. Vreeland, Jr., J. Appl. Phys., 1984, **56**:1591~1600.
- [6] 贺楚光,中国科学院物理研究所硕士论文,1989.
- [7] D. Taupin *et al.*, Acta Cryst. Sect., 1968, **A24**:99~102.
- [8] 林世鸣,半导体学报,1995, **16**(5):339~343.
- [9] 林世鸣,高洪海,王立轩,等,光子学报,1994, **23**(Z2):176.

Application of X-Ray Diffraction Method in Distributed Bragg Reflectors Research

Lin Shiming, Gao Honghai, Zhang Chunhui and Wu Ronghan

(Institute of Semiconductors, The Chinese Academy of Sciences,
National Integrated Optoelectronics Laboratory, Beijing 100083)

Zhuang Yan and Wang Yutian

(National Research Center for Optoelectronics Technology, Beijing 100083)

Received 21 December 1994, revised manuscript received 5 April 1995

Abstract We simulated the characteristic curve of Distributed Bragg Reflectors (DBR) of Vertical Cavity Surface Emitting Lasers (VCSEL) using the double-crystal X-ray diffraction dynamics theory. Based on the simulation, the epitaxy layer thickness and Al composition of DBR were obtained. And then, we simulated the reflectivity spectrum, it coincided well with the experiment curve. We used this method in the VCSEL research and obtained good results.

PACC: 4255P, 6110, 6855B