

# In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs 应变超晶格的 X射线双晶衍射研究

陈京一 朱南昌 田亮光 李润身

(中国科学院上海冶金研究所, 上海)

1990年1月24日收到

本文阐述了一种基于X射线动力学衍射理论的计算机模拟方法, 该方法可用于分析超晶格材料的X射线双晶摆动曲线, 用模拟计算方法得到了In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs应变超晶格的各种结构参数。

**主题词** 应变超晶格、双晶衍射、动力学衍射理论、计算机模拟、摆动曲线、结构参数

## 一、引言

应变超晶格是一类全新的人造功能材料。应变超晶格的能带结构可以根据需要而采用适当的材料和几何尺寸加以设计, 这就是所谓的“能带工程”。自1982年G. C. Osborn<sup>[1]</sup>等人首次成功地生长出界面完整性良好的应变超晶格后, 应变超晶格无论是在实际应用中, 还是在理论研究方面都引起了人们极大的关注。在应变超晶格中, 由于其能带结构与晶体结构之间有着密切的联系, 因此全面了解其晶体结构, 不论对于晶体生长工艺研究还是对于其它光电性能研究都有着重要的意义。本文中, 我们采用X射线双晶衍射术并结合动力学衍射理论对In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs应变超晶格进行了研究, 以求全面了解其晶体结构特性。

## 二、原理

X射线双晶衍射术是研究近完整晶体结构及其变化的极有效的手段之一<sup>[2,3]</sup>。自超晶格材料问世以来, 双晶衍射术就一直伴随其材料研究之始终。对于超晶格材料双晶摆动曲线的理论解释工作也在逐步地深入、发展和完善。目前所用的理论模型可分为运动学理论模型和动力学理论模型<sup>[4,5]</sup>。这两者相比, 运动学理论物理意义明确, 计算较为简便, 有时甚至可以不通过模拟就得到超晶格的一些结构参数<sup>[6]</sup>, 但当超晶格的厚度增加到一定值以后, 超晶格的卫星峰的强度大于主峰强度的6%时, 运动学理论成立的前提遭到破坏, 运动学理论不再适用。动力学理论的计算量相对要大得多, 物理意义也没有前者那样明确。虽然如此, 由于动力学理论立论更为严谨, 适用范围也较前者大, 因此为许多科学家所采用。本文阐述了一种用于超晶格材料双晶摆动曲线模拟的动力学模型, 并模拟

计算了  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  应变超晶格的双晶摆动曲线, 得到了超晶格的全部晶体结构参数。

根据 X 射线动力学衍射理论, 在微小畸变晶格中波场的传递可由高木方程表述为<sup>①</sup>:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_0}{\partial s_0} &= -i\pi KC\chi_{-h}\phi_h \\ \frac{\partial \phi_h}{\partial s_h} &= -i\pi KC\chi_h\phi_0 + i2\pi K\beta_h\phi_h \end{aligned} \quad (1)$$

式中  $\phi_0, \phi_h$  为畸变晶体中 X 射线的入射波及衍射波振幅。 $\chi$  为  $4\pi$  倍的介质极化率,  $C$  为偏振因子,  $K$  为 X 射线在真空中的波矢,  $\mathbf{s}_0, \mathbf{s}_h$  分别为平行于入射波矢  $\mathbf{k}_0$  和衍射波矢  $\mathbf{k}_h$  的单位矢量,  $\beta_h = (|\mathbf{k}_h| - k)/K$ ,  $k$  为 X 射线在晶体中的波矢。

考虑  $\sigma$  偏振态时的 Bragg 非对称衍射, 并假定畸变量是垂直于表面的距离 Z 的单元函数, 即  $\phi_0, \phi_h$  只是 Z 的函数。此时:

$$\frac{\partial}{\partial s_0} = \frac{\partial}{\partial Z} \cdot \frac{1}{\sin(\theta_B + \alpha)} \quad \frac{\partial}{\partial s_h} = \frac{\partial}{\partial Z} \cdot \frac{1}{\sin(\theta_B - \alpha)} \quad (2)$$

其中  $\alpha$  为衍射晶面与晶体表面的夹角,  $\theta_B$  为 Bragg 角。由此(1)式可化为:

$$i \frac{dX}{dA} = -BX^2 - 2EX - B \quad (3)$$

式中  $B = -F_h/|F_h|$ ,  $E = \frac{\sqrt{|b|}\pi \cdot V_e}{|F_h|r_e \cdot \lambda^2} \cdot \beta_h$ ,  $X = \phi_h/(\sqrt{|b|}\phi_0)$ 。而  $b = r_0/r_h$ ,  $A = r_e|F_h|z/(V_e K \sqrt{|r_0 r_h|})$ ,  $r_0 = \sin(\theta_B + \alpha)$ ,  $r_h = -\sin(\theta_B - \alpha)$ ,  $r_e$  为经典电子半径,  $V_e$  为单位晶胞体积,  $\lambda$  为 X 射线波长,  $F_h$  为衍射晶面的结构因子,  $F_h$  与  $\chi_h$  的关系为:

$$\chi_h = -r_e \cdot \lambda^2 \cdot F_h/(\pi V_e)$$

(3)式是含复数的一阶微分方程, 由于  $B, E$  是  $A$  的函数, 因而不能直接用分离变量法求解。但如果按 Z 方向将畸变层分成若干层, 使  $B, E$  在每一层内为一常数, 这就是所谓的层状模型, 则(3)式可积分为:

$$X_i = \frac{S_i X_{i-1} + i(B_i + E_i X_{i-1}) \tan[S_i(A_i - A_{i-1})]}{S_i - i(E_i + B_i X_{i-1}) \tan[S_i(A_i - A_{i-1})]} \quad (4)$$

式中  $X_i$  表示经第  $i$  层衍射后的衍射振幅比,  $S_i = iB_i \sqrt{1 - E_i^2/B_i^2}$ 。递推公式(4)的成立条件, 即层状模型和畸变量只是垂直于表面距离 Z 的单元函数的假定, 与超晶格材料的实际情况非常符合, 因此有理由相信公式(4)可以很好地描述超晶格材料对于 X 射线的衍射过程。

根据边界条件, 在无穷厚的完整晶体中  $X_i = X_{i-1}$ , 因此, 令  $X_0$  为衬底晶体的衍射振幅比, 则有:

$$X_0 = -E_0(1 - \sqrt{1 - B_0^2/E_0^2})/B_0 \quad (5)$$

利用(4)、(5)二式进行迭代可得  $A = 0$  时样品表面出射的衍射振幅比  $X(0)$ 。上述公式也同样适用于  $\pi$  偏振的衍射光束, 只要将  $\chi_{-h}, \chi_h, F_h$  和  $F_{-h}$  乘以偏振因子  $\cos(2\theta_B)$  即可。

### 三、实验结果和讨论

样品为分子束外延(MBE)方法生长的 $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ 应变超晶格。衬底为(100)取向的GaAs晶片，在衬底上先生长一层厚约 $0.7\mu m$ 的高纯GaAs缓冲层，然后交替生长 $InGaAs$ 、GaAs薄层，最后再生长一层厚约 $500\text{ \AA}$ 的GaAs保护层。由于应变超晶格的能带结构非常灵敏地依赖于它的晶体结构，因此准确地确定其晶体结构对于其光电性能的研究大有帮助。 $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ 超晶格的晶体结构可由如下参数描述： $InGaAs$ 层的晶面间距 $d_{InGaAs}$ ，层内分子层数 $N_{InGaAs}$ ，应变量 $\varepsilon_{InGaAs}^1$ ，层厚 $t_{InGaAs}$ ，In含量 $x$ 以及GaAs层的晶面间距 $d_{GaAs}$ ，层内分子层数 $N_{GaAs}$ ，层厚 $t_{GaAs}$ 和超晶格的周期 $D$ 、周期数 $M$ 。

实验是在本所自行研制的高精度双晶衍射仪上进行的，选用 $CuK_{\alpha 1}$ 辐射， $\lambda = 1.5405\text{ \AA}$ ，管压、管流分别为35keV和20mA。

为消除波长色散的影响，第一晶体选用高完整的Ge单晶，400衍射。样品晶体在400衍射峰附近转动， $\theta-2\theta$ 联动扫描。由于采用了计算机控制的数据采集系统，使得数据的采集和处理非常容易，而且背景大大降低。

图1中点线为样品的实验曲线。可以明显看出，在应变超晶格的双晶摆动曲线中，主峰附近的卫星峰的强度不再象在匹配超晶格的双晶摆动曲线中那样呈对称分布，这就给卫星峰的级数的确定带来了极大的困难。在这种情况下，除了超晶格的周期可以通过卫星峰的峰间距求得外，其余的结构参数都无法直接求得。当衍射晶面与晶体表面平行时，超晶格的周期可表为<sup>[6]</sup>：

$$D = \lambda / 2\Delta\ell \cos\theta_0 \quad (6)$$

其中 $\lambda$ 为X射线波长、 $\theta_0$ 为衬底的Bragg角， $\Delta\ell$ 为相邻两个卫星峰的峰间距。在我们的实验中 $\lambda = 1.5405\text{ \AA}$ ， $\theta_0 = 33^\circ$ ， $\Delta\ell = 810 \pm 10''$ 。代入(6)式可得：

$$D = 233.9 \pm 3\text{ \AA}$$

为了全面了解超晶格的其它晶体结构，必须对双晶摆动曲线进行模拟。图1中的实线即为模拟曲线。比较可见，计算曲线和实验曲线在峰的个数、峰位及相对峰强几方面都符合得很好。由模拟参数可以得到 $d_{InGaAs} = 1.4405\text{ \AA}$ ， $N_{InGaAs} = 28$ ， $d_{GaAs} = 1.4132\text{ \AA}$ ， $N_{GaAs} = 55$ ， $M = 14$ 。在此基础上可以很方便地求出其它晶体结构参数，在〈100〉方向上，一个GaAs或一个 $InGaAs$ 分子层的厚度为 $2d_{400}$ ，因此， $t_{InGaAs} = 2d_{InGaAs}N_{InGaAs} = 80.668\text{ \AA}$ ， $t_{GaAs} = 2d_{GaAs}N_{GaAs} = 155.452\text{ \AA}$ ， $D = t_{InGaAs} + t_{GaAs} = 236.12\text{ \AA}$ 。应变 $\varepsilon_{InGaAs}^1 = (d_{InGaAs} - d_{GaAs})/d_{GaAs} = 0.0193$ 。在模拟时， $d_{GaAs}$ 是按照完整的GaAs的晶胞参数计算的，模拟过程中我们发现，当 $\varepsilon_{InGaAs}^1$ 在0.0193附近波动达到1%时，模拟曲线虽然在峰位和峰的个数方面没有变化，但相对峰强已有了较明显的变化。因此我

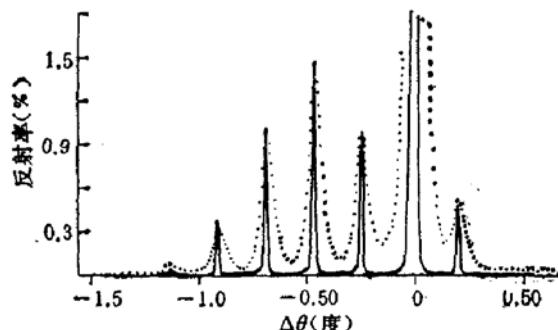


图1  $In_xGa_{1-x}As/GaAs$  应变超晶格的X射线双晶摆动曲线。 $CuK_{\alpha 1}$  辐射，400衍射。  
……实验曲线；——模拟计算曲线

们的模拟计算的精度是相当高的。弛豫状态的晶格常数可由弹性理论得到<sup>[8]</sup>:

$$a_{\text{InGaAs}}^{\text{relaxed}} = a_{\text{GaAs}} \cdot [1 + \varepsilon_{\text{InGaAs}}^{\frac{1}{2}} \cdot c_{11} / (c_{11} + 2c_{12})] = 5.7101 \text{ \AA}$$

其中的  $c_{11}$  和  $c_{12}$  为弹性张量的分量。再由 Vegard 定律可以进一步求得 In 含量  $x=0.14$ 。至此, 我们得到了  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  应变超晶格的全部结构参数。

### 参 考 文 献

- [1] G. C. Osbourn *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **53**, 1586 (1982).
- [2] 许顺生、冯端主编“X射线衍射貌相学”, P. 158, 科学出版社(1987).
- [3] 陈京一等, 半导体学报, **8**, 480(1987).
- [4] V. S. Speriosu *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **56**, 1591 (1984).
- [5] C. R. Wie *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **59**, 3743 (1986).
- [6] 姜力等, 半导体学报, **10**, 86(1989).
- [7] S. Takagi, *Acta Cryst.*, **15**, 1311(1952).
- [8] J. Hornstra and W. J. Bartels, *J. Cryst. Growth*, **44**, 513(1978).

## X-Ray Double-Crystal Diffraction Study of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ Strained-Layer Superlattice

Chen Jingyi, Zhu Nanchang, Tian Liangguang and Li Runshen

(Shanghai Institute of Metallurgy, Academia Sinica Shanghai, 200050, China)

### Abstract

A computer simulation method based on X-ray dynamical diffraction theory is presented. The method is used for the analysis of X-ray double-crystal rocking curves of superlattices. The structure parameters of the  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  strained-layer superlattice is obtained from the simulation of the rocking-curve.

**Key words** Strained-layer superlattice, Double-crystal diffraction, Dynamical diffraction theory, Computer simulation, Rocking curve, Structure parameters