

MBE $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}(001)$ 系统 晶格失配的研究

王玉田 李成基 任庆余

(中国科学院半导体研究所, 北京)

1988年5月13日收到

本文利用X射线双晶衍射和电子探针显微分析方法,研究了MBE $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}(001)$ 系统的晶格失配与In含量 x 值的关系。在外延层厚度 $t_e \sim 2\mu\text{m}$ 的情况下,获得范性应变临界组份 $x_c = 0.114$ 。当 $x < x_c$ 时,外延层生长方向应变 ϵ_1 与 x 成线性关系;当 $x > x_c$ 时,外延层出现范性形变。

主题词: 晶格失配, 双晶衍射, 弹性形变, 范性形变

一、引言

近年来许多科学工作者对应变层异质外延产生了浓厚的兴趣,因为在晶格失配情况下,不仅可以生长出良好的异质外延层,而且还可以用来生长应变层超晶格,以便制作多种光学器件^[1-4]。应变异质外延系统 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}(001)$ 与 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}(001)$ 系统不同^[5,6],由于失配度太大,在 $0 < x < 1$ 范围内,不可能都处于弹性范围以内,而是存在一个范性应变临界组份 x_c ^[7]。当 $x < x_c$ 时,可以生长出无位错外延层;而当 $x > x_c$ 时,若外延层厚度大于临界厚度,在外延层中会产生失配位错,很难长出无位错外延层。准确测量范性应变临界组份 x_c ,对于异质外延生长工艺和物理研究都具有重要意义。

最近 K. Kamigaki 等人^[7]在外延层厚度 $t_e = 2000\text{ \AA}$ 的情况下测量了MBE $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}(001)$ 系统的 x_c ,获得 $x_c = 0.10$ 。但是其实验点太少。我们对于更厚外延层($t_e \sim 2\mu\text{m}$)的情况也很感兴趣。我们利用X射线双晶衍射和电子探针显微分析方法,对MBE $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}(001)$ 系统的应变与 x 的关系做了系统的研究,准确地测量了临界组份 x_c ,并做了必要的讨论。

二、实验原理

在应变异质外延情况下,由于外延层与衬底的晶格常数不同,会出现晶格失配。外延层使衬底产生弯曲,而衬底又使外延层产生四方畸变^[8]。如果晶格失配不大,而衬底又很厚, $t_s \gg t_e$,那么衬底的形变可以忽略不计,即在水平方向上的晶格常数 $a_s'' \approx a_s$,而只

是在生长方向上存在着垂直应变 $\epsilon_{\perp} = \Delta a_{\perp}/a_s$, 如图 1 所示。在 MBE In_xGa_{1-x}As/GaAs(001) 系统中, 晶格失配较大, 衬底的形变一般不能忽略。由于是正失配, 衬底产生凸向弯曲, 在外延层出现垂直晶格应变的同时, 也出现水平方向的晶格应变。

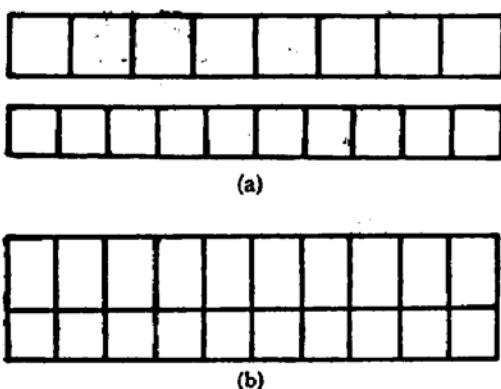


图 1 MBE In_xGa_{1-x}As/GaAs(001) 系统的晶格失配 (a) 自由状态下 GaAs 和 In_xGa_{1-x}As 的晶格 (b) 忽略水平应变的四方畸变晶格

在 X 射线双晶衍射中, 由于外延层和衬底晶格常数的不同, 而使同一衍射指数的 X 射线衍射峰分裂成两个衍射峰。根据这两个峰的角距离 $\Delta\theta$, 可以计算出晶格应变 ϵ ,

$$\epsilon = \Delta d/d = -\operatorname{ctg}\theta \cdot \Delta\theta \quad (1)$$

在四方晶胞中, 面间距 d_{hkl} 为

$$d_{hkl} = \left[\frac{h^2 + k^2}{a_h^2} + \frac{l^2}{a_{\perp}^2} \right]^{-1/2} \quad (2)$$

其中, a_h 和 a_{\perp} 分别为四方晶胞的水平方向和垂直方向的晶格常数。对 (2) 式进行微分, 并取 $a_h \sim a_{\perp} \sim a_s$, 可以获得应变 ϵ_{hkl} ,

$$\begin{aligned} \epsilon_{hkl} &= \Delta d_{hkl}/d_{hkl} \\ &= \frac{1}{h^2 + k^2 + l^2} \left[(h^2 + k^2) \frac{\Delta a_{\parallel}}{a_s} + l^2 \frac{\Delta a_{\perp}}{a_s} \right] \end{aligned} \quad (3)$$

其中, Δa_{\parallel} 和 Δa_{\perp} 分别为水平方向和垂直方向晶格常数的改变量。 $a_s = 5.6534 \text{ \AA}$ 是衬底 GaAs 的晶格常数。当 $h = k = 0$ 时, $\epsilon_{hkl} = \epsilon_{00l} = \Delta a_{\perp}/a_s$, 即在 (00l) 衍射中可以获得垂直方向的失配应变。如果我们已经测得 ϵ_{hkl} 和 ϵ_{00l} , 代入 (3) 式, 就可以获得水平应变 $\epsilon_{\parallel} = \Delta a_{\parallel}/a_s$ 。

在实验中, 我们利用高纯 Si(422) 做第一晶体, 取 Cu K_{α1} 辐射, $\lambda = 1.5405 \text{ \AA}$ 。利用 X 射线双晶衍射回摆曲线法, 测量了 MBE In_xGa_{1-x}As/GaAs(001) ($t_e \sim 2 \mu\text{m}$) 不同 x 值样品的 (004), (224) 和 (224) 的回摆曲线, 按 (1), (3) 式获得应变数据。利用电子探针显微分析方法, 测量每个样品的 x 值。

三、实验结果和讨论

根据我们的测量结果, $t_e \sim 2 \mu\text{m}$ 的 MBE In_xGa_{1-x}As/GaAs(001) 系统的晶格常数与 x 值的实验关系曲线如图 2 所示。当 $x < 0.113$ 时, ϵ_{\perp} 与 x 成线性关系, 即外延层处于弹性应变状态。当 $x = 0.125$ 时, 外延层的垂直应变 ϵ_{\perp} 已经下降, 证明此时产生了大量的失配位错, 出现范性形变。当 $x > 0.125$ 时, 应变 ϵ_{\perp} 又随 x 值的增加而增加, 但不是线性关系。对于应变 ϵ_{\parallel} , ϵ_{\parallel} 与 x 值呈非线性关系, 实验现象与 ϵ_{\perp} 相似。

在图 2 中, 我们标出了 K. Kamigaki 等人的实验结果, 以空圈表示。发现在 $x < 0.113$ 范围内, 与我们的实验结果完全一致。这就表明, 在弹性范围以内, 外延层的垂直应

变 ϵ_{\perp} 基本上只依赖于 x 值, 而与外延层的厚度无关。

我们认为, K. Kamigaki 等人的结果 $x_c = 0.10$, 误差较大, 因为在 $0.082 < x < 0.116$ 间无实验点. 而我们发现, $x=0.113$ 时, 仍然没有产生失配位错. K. Kamigaki 等人在 $x=0.116$ 处见到失配位错产生. 因此根据我们的实验结果, 结合 K. Kamigaki 等人的结果, 我们认为, MBE $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}(001)$ 系统的弹性应变临界浓度 $x_c = 0.114$.

在实验中还看到水平应变和其他数据与 K. Kamigaki 等人的结果不太一样, 这是由于外延层厚度不同而产生的.

根据以上讨论, 当 $x < 0.114$ 时, MBE $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}(001)$ 外延层中的垂直应变 ϵ_{\perp} 与 x 值的关系可以表示为

$$\epsilon_{\perp} = 0.126x \quad (4)$$

四、结 论

根据我们的实验, 可以得出以下结论:

- (1) MBE $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}(001)$ 系统的弹性应变临界组份 $x_c = 0.114$.
- (2) 当 $x < x_c$ 时, MBE $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}(001)$ 系统中, 外延层的垂直应变基本上与厚度无关.

在实验中曾得到陈宗圭先生和徐仲英先生的帮助, 在此表示感谢.

参 考 文 献

- [1] W. D. Laidig, C. K. Peng and Y. F. Lin, *J. Vac. Sci. Technol., B2*, 181(1984).
- [2] A. T. Fiery, J. C. Bean, L. C. Feldman and K. Robinson, *J. Appl. Phys.*, **56**, 1227(1984).
- [3] M. Nakayama, K. Kubota, H. Kato, S. Chika and N. Sano, *Appl. Phys. Lett.*, **48**, 281(1986).
- [4] M. Quillec, L. Goldstein, G. LeRoux, J. Burgeat and J. Primot, *J. Appl. Phys.*, **55**, 2904(1984).
- [5] 王玉田, 陈宗圭, 半导体学报, 7, 516, (1986).
- [6] 姜力, 吴苍生, 王玉田, 高维宾, 半导体学报, 86(1989).
- [7] K. Kamigaki, H. Sakashita, H. Kato, M. Nakayama, N. Sano and H. Terauchi, *Appl. Phys. Lett.*, **49**, 1071 (1986).

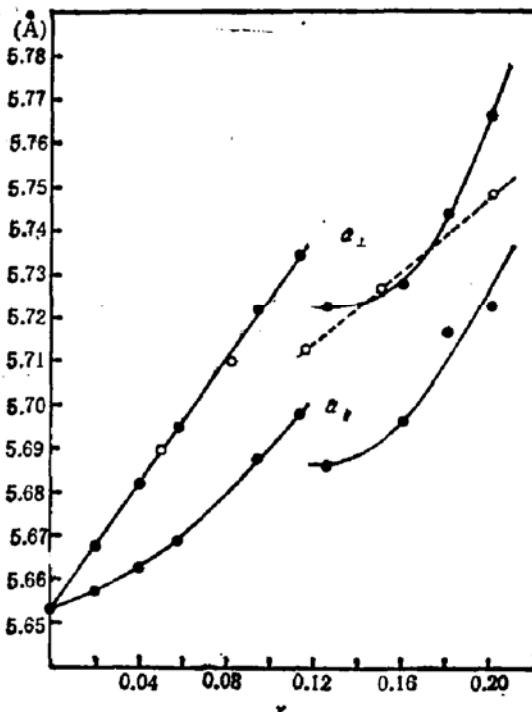


图 2 MBE $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}(001)$ 系统晶格常数与 x 值的实验关系曲线, $t_e \sim 2 \mu\text{m}$ (图中实圆点为本实验点, 空圆点为 K. Kamigaki 等人的实验点.)

Investigation on Lattice Mismatch of MBE $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}(001)$ System

Wang Yutian, Li Chengji and Ren Qingyu

(Institute of semiconductors, Academia Sinica, Beijing)

Abstract

The lattice mismatch of MBE $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}(001)$ system has been investigated by X-ray double-crystal diffraction and electronprobe microanalysis methods. The plastic strain critical concentration $x=0.114$ is obtained at epitaxy layer thickness $t_e \sim 2 \mu\text{m}$. When $x < 0.114$, there is a linear relation between the perpendicular strain s_{\perp} and x . When $x > 0.114$, the plastic deformation appears in the epitaxy layer.

KEY WORDS: Lattice mismatch, Double-crystal diffraction, Elastic strain, Plastic strain.