

AlGaAs/GaAs 超晶格界面平整度的 X 射线双晶衍射研究

庄 岩 王玉田 李建中

(国家光电子工艺中心 中国科学院半导体研究所 北京 100083)

摘要 用 X 射线运动学的多层膜干涉理论,模拟计算了 AlGaAs/GaAs 超晶格 X 射线双晶衍射摇摆曲线.提出了一种具有整数分子层的界面过渡层理论模型,并运用此理论研究了零级卫星峰的峰峰位的漂移,过渡层对超晶格卫星峰强度的影响以及低级卫星峰的规律性消光规律.

PACC: 6110, 6855

1 引言

X 射线双晶衍射是近年来发展起来的测量半导体超晶格的一项新技术,随着仪器精度的提高,双晶衍射测到的结构信息越来越多,计算模拟工作显得更为重要.目前,国际上多运用 X 射线动力学理论进行模拟计算和分析^[1-2],得到与实验符合得很好的理论曲线.在处理超晶格界面间的组分扩散,界面平整度等过渡层结构时,运动学理论具有计算简单,物理图象清晰等特点同时也被人们所青睐. Mark A Hollanders^[3]把过渡层的影响近似为只对衍射振幅的位相有影响的光栅结构. Xian-Chang He^[4]则认为在界面处,存在着组分成梯度变化的梯度层结构. P. Aurry^[5]引进了非整数分子层数的过渡层概念.但非整数分子层在晶体生长中是不存在的,为此我们提出了一种普遍适用的界面过渡层模型.它包含了界面间的组分扩散以及晶体生长时形成的界面不平整造成的影响.我们运用这个理论模型模拟了超晶格零级卫星峰峰位的漂移,以及过渡层对高、低级卫星峰强度的影响.卫星峰有规律地消光是由于受超晶格阱、垒厚度的调制造成的.

2 理论模型

1 超晶格是一个由 A、B 两层周期性交替生长的材料.在样品生长过程中,两层间的界面不会完全平整,参照图 1,生长后的 A 层表面可能会凹凸不平,在生长 B 层后,在上下两层

庄 岩 男,1967 年生,研究实习员,从事专业:X 射线双晶衍射
王玉田 男,1940 年生,高工,从事专业:X 射线双晶衍射
1993 年 10 月 21 日收到初稿,1994 年 1 月 28 日收到修改稿

间形成了一层既不同于 A, 也不同于 B 的 C 过渡层结构. 为简单起见, 我们认为过渡层中的平均组分

$$x_C = r_A \times x_A + (1 - r_A) \times x_B \quad (1)$$

x_A, x_B 分别为 A, B 层的组分. r_A 为过渡层中 A 层结构所占的比率. 理论计算时, 超晶格的一个周期可分为 A、C、B, 三层结构.

在 A、B 交替生长过程中, 交替初期可能没有排净残余气体, 导致混元生长. 并且有可能存在 A、B 间的相互扩散, 导致界面间的组分发生变化. 这两种影响均可通过改变 r , 运用上述模型来进行描述. 定义 r 为混元组分.

2 超晶格每个周期分为 A、B 两层, 对于 M 个周期的超晶格, 其衍射强度^[6]

$$I = \frac{\sin^2[M(A_A Y_A + A_B Y_B)]}{\sin^2[A_A Y_A + A_B Y_B]} \left\{ \frac{\sin^2 A_A Y_A}{Y_A^2} + \frac{\sin^2 A_B Y_B}{Y_B^2} + 2 \cos[A_A Y_A + A_B Y_B] \frac{\sin A_A Y_A \sin A_B Y_B}{Y_A Y_B} \right\} \quad (2)$$

其中

$$A_j = \frac{r_e \lambda |F_j| d_j}{\Omega_j |\gamma_o \gamma_H|} \quad j = A, B$$

$$Y_j = -(\gamma_o / \gamma_H)^{1/2} \frac{\pi \Omega \sin(2\theta) \Delta\omega}{r_e \lambda |F_j|} \quad j = A, B$$

$$\Delta\omega = \theta - \theta_B + (\epsilon^\perp \cos 2\Psi + \epsilon^\parallel \sin 2\Psi) \tan \theta_B \pm (\epsilon^\perp - \epsilon^\parallel) \sin \Psi \cos \Psi \quad (3)$$

F_j 为第 j 层外延膜的结构因数, λ 为 X 射线波长, r_e 为电子经典半径, θ_B 为衬底的 Bragg 角, Ω_j 为第 j 层外延膜的晶胞体积. γ_o, γ_H 分别为入射束及衍射束的方向余弦, θ 为入射角. $\epsilon^\perp, \epsilon^\parallel$ 分别为生长方向和水平方向相对于衬底的失配应变, d_j 为第 j 层的厚度. Ψ 为衍射晶面与晶体表面之间的夹角.

当 $A_A Y_A + A_B Y_B = n\pi$, I 有一系列的主极大值, 分别对应于超晶格的各级卫星峰, 卫星峰衍射强度

$$I \propto (1/Y_A - 1/Y_B)^2 \sin^2 A_A Y_A \quad (4)$$

相邻两极卫星峰的角间距

$$\Delta\theta_n = \lambda |r|_n / ((d_A + d_B) \sin^2 \theta_B) \quad (5)$$

3 样品和实验条件

3.1 样品 在 GaAs 衬底上, 用 MBE 方法生长的 GaAs/AlGaAs/GaAs(001) 超晶格. 超晶格数为周期 50 个.

3.2 实验条件 实验是在日本理学 SLX-1A 型 X-射线超晶格测定装置上进行的, X 射线发生器为 RU-200BH, 12kW 转靶. 实验中, 电压为 50kV, 电流为 150mA, 取 CuK α 1 辐射, $\lambda =$

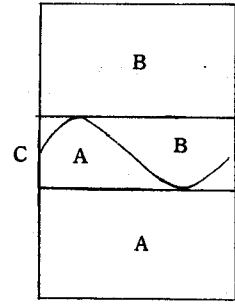


图 1 超晶格过渡层结构图
其中 C 为过渡层, 由 A、B 两层组成

1.54051 Å. 第一晶体为 Ge(004), 非对称衍射. $\beta=0.08$. 入射角为 6° 左右, $\text{FWHM} \approx 2.3''$. 测量中取 $\theta/2\theta$ 联动, 步进扫描记录, 步进角 0.001° , 取样时间 $2''$.

4 实验结果和讨论

4.1 过渡层对超晶格卫星峰强度的影响

GaAs/AlGaAs/GaAs(002) 衍射曲线如图 2a 所示. 在图上总共可以看到 ± 7 级卫星峰. 其中, $\pm 2, \pm 4, \pm 6$ 级卫星峰很弱, 基本消光. 图 2b 为用上述过渡层理论模拟计算的理论曲线, 比较可以看到理论曲线与实验曲线符合得很好. 从表 1 可以看到 GaAs 层厚度与 AlGaAs 层厚度接近相等. 由下面的讨论可知, 阱、垒厚度相等将导致 $\pm 2, \pm 4, \pm 6$ 级卫星峰消光. 改变混元组分得到的理论曲线如图 3. 随着 r 值的增加 $\pm 1, \pm 3, \pm 5, \pm 7$ 级卫星峰强度略有下降. 高级卫星峰比低级卫星峰下降得明显. 而 $\pm 2, \pm 4, \pm 6$ 级卫星峰随着 r 值的增加其强度有所增强. 模拟参数如表 1 所示.

表 1 AlGaAs/GaAs 超晶格模拟参数

	GaAs		AlGaAs		过渡层(C)		r	F_C
	$d_A(\text{Å})$	n_A	$d_B(\text{Å})$	n_B	$d_C(\text{Å})$	n_C		
1	90.5	32	93.3	33	14.2	5	0.2	7.46
2	90.5	32	93.3	33	14.2	5	0.4	6.29
3	90.5	32	93.3	33	14.2	5	0.0	8.63

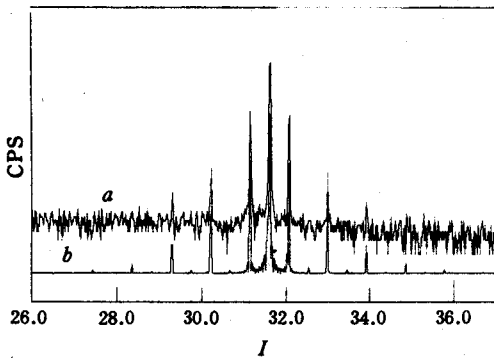


图 2 AlGaAs/GaAs 超晶格(002)衍射曲线
a 实验曲线 b 理论模拟曲线

其中, d_A, d_B, d_C , 分别为 GaAs, AlGaAs 以及过渡层的厚度. n_A, n_B, n_C , 分别为 GaAs, AlGaAs 以及过渡层的分子层数. r 为混元组分. F_C 为过渡层的结构参数. 其定义与上相同. 第 1 行为图 2b, 图 3b 的模拟参数. 第 2, 3 行分别为图 3a, 图 3b 的模拟参数.

根据(2), 考虑过渡层的影响后衍射强度

$$I = \frac{\sin^2[M(A_A Y_A + A_B Y_B + 2A_C Y_C)]}{\sin^2[A_A Y_A + A_B Y_B + 2A_C Y_C]} I_F \quad (6)$$

当 $A_A Y_A + A_B Y_B + 2A_C Y_C = n\pi$, 衍射强度有极大值. 此时卫星峰强度

$$I \propto I_F = \frac{\sin^2 A_A Y_A}{Y_A^2} + \frac{\sin^2 A_C Y_C}{Y_C^2} + \frac{\sin^2 A_B Y_B}{Y_B^2} + 2\cos[A_A Y_A + A_B Y_B + 2A_C Y_C] \frac{\sin A_A Y_A}{Y_A} \frac{\sin A_B Y_B}{Y_B} + 2\cos[A_A Y_A + A_C Y_C] \frac{\sin^2 A_A Y_A}{Y_A^2} \frac{\sin^2 A_C Y_C}{Y_C^2} + 2\cos[A_B Y_B + 2A_C Y_C] \frac{\sin^2 A_B Y_B}{Y_B^2} \frac{\sin^2 A_C Y_C}{Y_C^2} \quad (7)$$

其中 A_c, Y_c 为过渡层的结构参数. 定义与上相同. 由上式可看到衍射强度与过渡层的结构参数有关. 改变混元组分 r , 也就改变了过渡层的结构参数 Y_c 和结构因数 F_c . 从而导致衍射强度发生变化. $\pm 1, \pm 3, \pm 5, \pm 7$ 级卫星峰衍射强度随混元组分 r 的变化曲线如图 4 所示. r 值增大卫星峰强度下降. I, I_0 分别为有过渡层和无过渡层时卫星峰的衍射强度.

对于理想超晶格其界面起伏为零. r 也趋于零. r 值增大表明界面起伏增大. 由以上讨论可知, 界面的平整性同样会对衍射峰的强度产生影响. 并且对高级卫星峰的影响比低级卫星峰大.

采用上述过渡层理论模型, 发现过渡层的存在不仅对卫星峰强度有影响. 而且对卫星峰的峰位同样也产生影响. 零级卫星峰峰位随 r 值的变化曲线如图 5 所示. 随 r 值的增加零级峰与衬底峰的角间距线性增大. 最大值 $4''$ 左右.

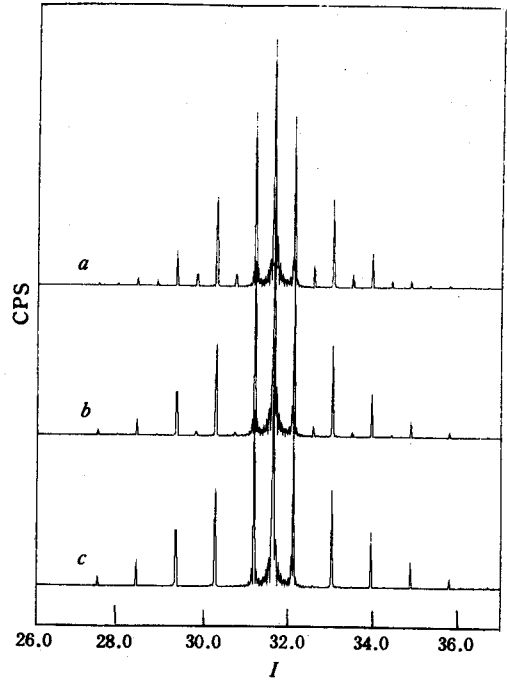


图 3 混元组分分别为 a $r=0.4$ b $r=0.2$ c $r=0.0$ 的理论计算曲线

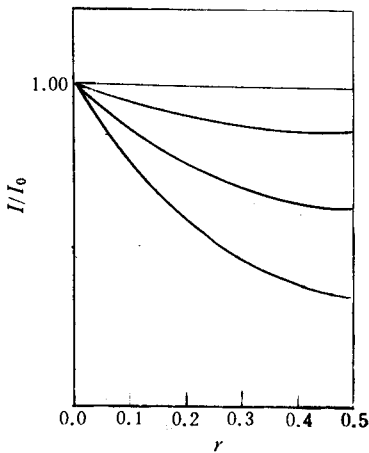


图 4 1,3,5,7 级卫星峰与 r 的关系曲线

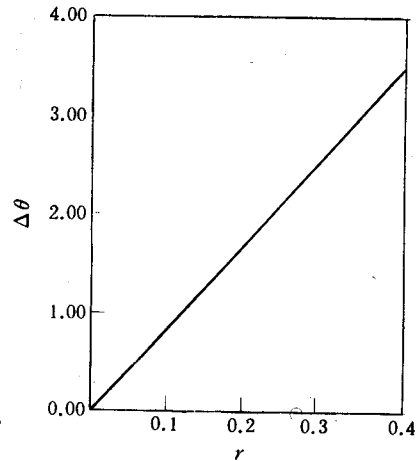


图 5 AlGaAs/GaAs 超晶格(002)衍射零级卫星峰峰位与 r 的关系曲线

由(6)式可得对于零级卫星峰忽略过渡层影响时 $A_A Y_A + A_B Y_B = 0$, 过渡层影响不可忽略时, $A_A Y_A + A_B Y_B + A_C Y_C = 0$, 改变 r , 即改变 $A_C Y_C$. 从而使零级峰位发生改变.

4.2 卫星峰周期性消光规律

图(2)中 $\pm 2, \pm 4, \pm 6$ 级卫星峰消光, 消光周期是卫星峰间距的 2 倍. 忽略过渡层影响, 由(4)式得卫星峰衍射强度

$$I \propto (1/Y_A - 1/Y_B)^2 \sin^2 A_A Y_A$$

卫星峰消光周期

$$\Delta\theta = r_H \lambda / (d_A \sin 2\theta_B) \quad (8)$$

把(5)代入(8)式,若 $d_A = d_B$

$$\Delta\theta = 2\Delta\theta_n$$

即卫星峰消光周期为卫星峰角间距的 2 倍.

卫星峰周期性的调制是超晶格阱,垒厚度的比值造成的.而两层间的界面状态对卫星峰的调制影响不大.

参 考 文 献

- [1] J. M. Vandenberg, S. N. G. Chu, R. A. Hamm, M. B. Panish, D. Ritter and A. T. Mancrander, *MRS, Mess. Steuern Regeln*, 1992, **240**:141.
- [2] C. Giannini, L. Tapfer, *Appl. Phys. Lett.*, 1993, **62**:149.
- [3] Mark A. Hollanders and Barend J. Thijsse, *J. Appl. Phys.* 1991, **70**:1270.
- [4] Xian-Chang He, He-sheng Shen, and Zi-Qin Wu, *J. Appl. Phys.*, 1989, **67**(7):3481.
- [5] P. Auvray, M. Baudet and A. Regreny, *J. Appl. Phys.*, 1987, **62**(2):456.
- [6] V. S. Speriosu and T. Vreeland. Jr, *J. Appl. Phys.*, 1984, **56**(6):1592.

Study of AlGaAs/GaAs Supperlattice Interface Rroughness by X-Ray Double-Crystal Diffraction

Zhuang Yan, Wang Yutian and Li Jianzhong

(National Research Center for Optoelectronic Technolgy, The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083)

Received 21 October 1993, revised manuscript received 28 January 1994

Abstract Kinematical X-Ray studies and a model of interface roughness have been carried out for AlGaAs/GaAs supperlattice. The shift of zero-order satellites' position and the variation satellites' intensity are discussed. The regulation of satellites extinction may be related to the ratio of the thickness of GaAs layer and AlGaAs layer.

PACC: 6110, 6855