

AlGa_xN 中的应变状态*

张纪才^{1,†} 王建峰^{1,2} 王玉田¹ 杨 辉¹

(1 中国科学院半导体研究所 集成光电子国家重点实验室, 北京 100083)

(2 武汉大学物理系, 武汉 430072)

摘要: 用 X 射线衍射和卢瑟福背散射方法研究了生长在 GaN 上厚度为 570nm 的 Al_xGa_{1-x}N 外延层中的应变状态. 实验结果显示 AlGa_xN 的共格因子在组分小于 0.42 时随组分的增加而近似线性减小, 并且在 0.42 时达到 30%, 此后随组分的增加变化较慢, 在 $x=1$ (AlN) 时接近 0. 在本实验条件中, 由于 GaN 层处于压应变状态, 导致与 AlGa_xN 外延层的失配变小, 使得组分约为 0.16 的 Al_xGa_{1-x}N 外延层可以共格生长在 GaN 层上.

关键词: 三轴晶 X 射线衍射; AlGa_xN; 共格因子; 应变; 卢瑟福背散射

PACC: 6110; 7280E; 0630M

中图分类号: TN304.2 文献标识码: A 文章编号: 0253-4177(2005)S0-0001-04

1 引言

AlGa_xN/GaN 异质外延量子阱结构在紫外发光器件等方面具有较大应用前景. 但实验发现直接生长在蓝宝石上的 Al_xGa_{1-x}N 的晶体质量随 Al 组分的提高而降低^[1]. 当采用 GaN 层作衬底时, Al_xGa_{1-x}N 晶体质量有了较大的提高, 但是很难获得没有裂缝的较厚的高 Al 组分外延层, 这是因为与 Al 组分和 GaN 质量有关的 AlGa_xN 的生长临界厚度很小^[2]. 此外, 准确地确定 Al 组分和应变状态对 Al_xGa_{1-x}N 的应用及其物理性质的理解至关重要. X 射线衍射 (XRD) 可以同时测量组分和应变. 一般来说, 在外延层处于完全弛豫或完全弹性状态下都可以用 Vegard 定理计算组分. 如果 AlGa_xN 外延层存在部分弛豫而又不能确定共格因子时, 由此方法计算的组分可能偏差较大. 利用卢瑟福背散射 (RBS)/沟道方法测量 Al 组分可以避免外延层中的应变影响^[3]. 本实验用 RBS 测量了 Al 组分, 并用三轴晶 X 射线衍射 (TXRD) 方法精确测量了 Al_xGa_{1-x}N 中的应变状态, 最终确定 Al_xGa_{1-x}N 在厚度为 570nm 时的共格因子和组分的关系.

2 实验

Al_xGa_{1-x}N 和 GaN 外延层是用 MOCVD 的方

法生长在蓝宝石 (0001) 面上. Trimethylgallium (TMGa), trimethylaluminum (TMAI) 和 NH₃ 分别被用作 Ga, Al 和 N 源, H₂ 作为载气. 生长时首先在 540°C 生长一层 GaN 缓冲层, 然后在 1020°C 生长一层约 600nm 的 GaN 外延层, 再将约 600nm 的 Al_xGa_{1-x}N 层生长在 GaN 上, 组分约从 0.20 变到 1. 样品 A, B 和 C 没有发现裂纹, 而样品 D 由于组分较高 (为 1), 其表面出现了裂纹. TXRD 是在 Rigaku X-ray generator (SLX-1A) 上测量的, 光源为 Cu-Kα₁ ($\lambda=0.154056\text{nm}$), $\omega/2\theta$ 联动扫描的步长为 0.001°. RBS 测量中使用的 2.6MeV He⁺ 离子束是用 5SDH-2 Pelletron 产生的.

3 结果和讨论

在本工作中, 用 TXRD 的 (0002) 和 (0004) 的 $\omega/2\theta$ 扫描来计算晶格参数 c , 而用 (10 $\bar{1}$ 2) 和 (20 $\bar{2}$ 4) 衍射计算晶格参数 a ^[4]. 图 1(a) 和 (b) 示出样品 A 的 RBS 随机/沟道谱和测量晶格参数的 TXRD $\omega/2\theta$ 扫描 (其他样品没有示出). 对随机谱的模拟得出样品 A, B 和 C 的 Al 组分分别是 0.22, 0.27 和 0.42, Al_xGa_{1-x}N 和 GaN 的厚度分别是 570 和 600nm. 由 Ga 原子的 $\langle 0001 \rangle$ 沟道谱得出的最小产额

* 国家自然科学基金 (批准号: 69825107), 国家自然科学基金及香港研究资助局联合基金 (批准号: 5001161953, N-HKU028/00) 资助项目

† 本文通信作者, Email: jczhang@red.semi.ac.cn

χ_{\min} 列在表 1 中, 结果显示样品 A 和 B 的晶体质量要比样品 C 好. 由 TXRD 测量的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 和 GaN 层的晶格参数以及 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的 (0002) 和 (10 $\bar{1}2$) 双晶 ω 扫描半高宽也列在表 1 中. 可以看出相对于体材料, 所有的 GaN 层处于压应变状态.

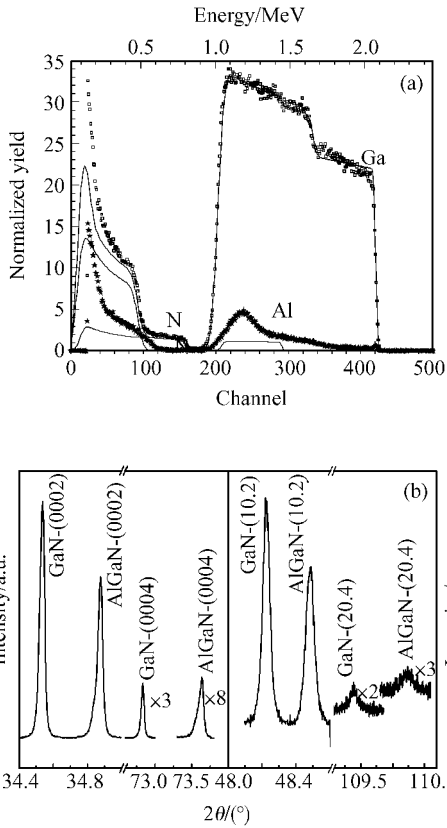


图 1 样品 A 的 RBS 随机/沟道谱 (a) 及测量晶格参数的 TXRD $\omega/2\theta$ 扫描 (b)

Fig. 1 (a) Rutherford backscattering/channeling spectra; (b) TXRD $\omega/2\theta$ scans for the measurements of lattice constants of sample A

表 1 AlGaIn 和 GaN 层的晶格参数以及 AlGaIn 层的 (0002) 和 (10 $\bar{1}2$) 双晶 ω 扫描半高宽

Table 1 Lattice constants of AlGaIn and GaN layers and the full width at half maximum of (0002) and (10 $\bar{1}2$) ω scans of AlGaIn

Sample	a_{AlGaIn} /nm	c_{AlGaIn} /nm	a_{GaN} /nm	χ_{\min} /°	FWHM of (0002) /(')	FWHM of (10 $\bar{1}2$) /(')
A	0.3179	0.5141	0.3180	1.7	5.58	10.23
B	0.3179	0.5134	0.3183	1.6	6.30	10.74
C	0.3165	0.5138	0.3182	2.7	7.50	12.48
D	0.3113	0.4983	0.3182	-	6.66	13.02

图 2 是样品 A, B 和 C 的 (0004) 三轴晶 $\omega/2\theta$ 扫描. 由于 D 表面的裂纹会影响衍射峰的形状, 因此其衍射曲线没有列在图中. 由图可以看出所有的衍射峰都是非对称的, 并且互不相同. 样品 A 和 B 的抬起的“尾 (tail)”在衍射峰的左边, 而样品 C 的在右边. 另外, 样品 A 中的“尾”要比 B 的高和长. 外延层的共格因子 f_{coh} 可由下式计算:

$$f_{\text{coh}} = \frac{a - a_0}{a_s - a_0}$$

式中 a_s 和 a_0 分别是衬底 GaN 层和完全弛豫的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 外延层的面内晶格参数; a 是 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的测量值. 图 3 示出了 f_{coh} 随 Al 组分的变化趋势. 在低于 0.42 时, f_{coh} 几乎随 Al 组分呈线性减小, 在 0.42 时达到 30%, 此后变化比较缓慢, 当组分为 1 (AlN) 时, f_{coh} 几乎为 0.

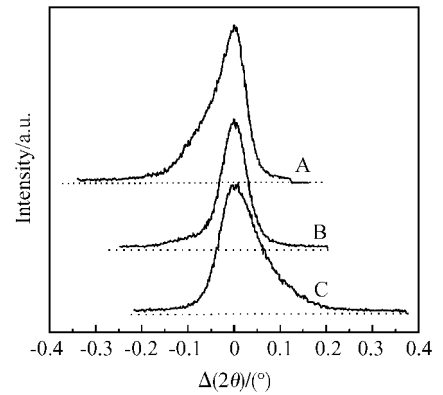


图 2 样品 A, B 和 C 的 (0004) 三轴晶 $\omega/2\theta$ 扫描

Fig. 2 (0004) triple-axis $\omega/2\theta$ scans for samples A, B, and C

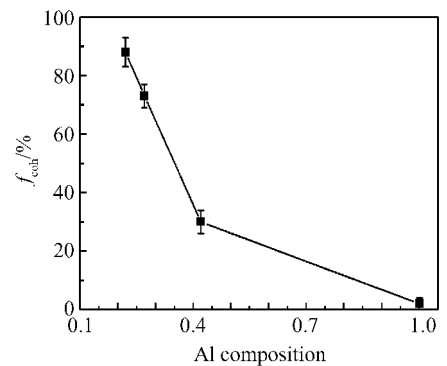


图 3 f_{coh} 随 Al 组分的变化

Fig. 3 Dependence of f_{coh} on Al composition of AlGaIn

由表 1 可见,所有的 GaN 衬底处于压应变状态,面内晶格常数变小,导致 GaN 与 AlGa_xN 的晶格失配变小,使得 AlGa_xN 的临界厚度变大.在本实验条件下,通过外推可知组分约为 0.16 的 570nm 的 Al_xGa_{1-x}N 外延层可以共格生长在 GaN 层上.

一般来说,(0002) ω 扫描半高宽主要反映了螺位错密度,而(10 $\bar{1}2$) ω 扫描半高宽可以反映刃位错和混合位错的密度.结合图 3 和表 1,可以看出随(10 $\bar{1}2$)半高宽的增加 f_{coh} 值减小,这说明刃位错和混合位错在 Al_xGa_{1-x}N 层的应变弛豫中起到重要作用.

在 Al_xGa_{1-x}N 生长过程中,很可能在 GaN 和 Al_xGa_{1-x}N 之间形成一个很薄的低组分 AlGa_xN 过渡层,这种 Al 组分分布的非均匀性可以导致 $\omega/2\theta$ 衍射峰的非对称,形成“尾”.但是在本实验中,随组分的提高,“尾”逐渐由衍射峰的左边变迁到右边,这可能存在另一种原因.由图 3 可推知,共格因子的不同可能会造成这种变化.当 Al_xGa_{1-x}N 共格生长在 GaN 上时处于张应变状态,晶格常数 c 要比完全弛豫材料的小,因此 GaN 和 Al_xGa_{1-x}N 的(0004)衍射峰的角距离要比非应变时大.随共格因子的减小,弛豫部分的 Al_xGa_{1-x}N 的晶格参数变大,导致了(0004)衍射峰形状的非对称,并且“尾”一开始在峰的左边.随共格因子的进一步减小,弛豫部分的 Al-GaN 的比例也在增加,因此导致衍射峰的“尾”由左向右的移动,如图 2 所示.样品 D 裂缝的出现是由于 GaN 和 AlN 之间比较大的晶格失配所致.

4 结论

本文研究了组分在 0.20 到 1 的 Al_xGa_{1-x}N 层中的应变状态.在小于 0.42 时,Al_xGa_{1-x}N 的共格因子随组分的增加而近线性减小,在 0.42 时达到 30%.大于 0.42 后共格因子的减小比较缓慢,在组分为 1(AlN)时几乎为 0.应变状态的变化导致了(0004) $\omega/2\theta$ 衍射峰的形状变化.在本实验条件下,570nm 的组分约为 0.16 的 Al_xGa_{1-x}N 层可以共格生长在 GaN 上.

致谢 感谢北京大学吴名枋教授在 RBS 测量上给予的帮助.

参考文献

- [1] Kamiyama S, Iwaya M, Hayashi N, et al. Low-temperature-deposited AlGa_xN interlayer for improvement of AlGa_xN/GaN heterostructure. *J Cryst Growth*, 2001, 223: 83
- [2] Einfeldt S, Kirchner V, Heinke H, et al. Strain relaxation in AlGa_xN under tensile plane stress. *J Appl Phys*, 2000, 88: 7029
- [3] Wu M F, Vantomme A, Hogg S, et al. Rutherford backscattering/channeling study of a thin AlGa_xN layer on Al₂O₃ (0001). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 2001, 174: 181
- [4] Zhang X H, Wang Y T, Feng Z H, et al. Method for measurement of lattice parameter of cubic GaN layers on GaAs(001). *J Cryst Growth*, 2003, 250: 345

Strain State of AlGa_xN*

Zhang Jicai^{1,†}, Wang Jianfeng^{1,2}, Wang Yutian¹, and Yang Hui¹

(1 *State Key Laboratory on Integrated Optoelectronics, Institute of Semiconductors,
Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China*)

(2 *Department of Physics, Wuhan University, Wuhan 430072, China*)

Abstract: The strain state of Al_xGa_{1-x}N layers grown on GaN template is studied by Rutherford backscattering (RBS)/channeling and triple-axis X-ray diffraction measurements. The results show that the coherent factor of Al_xGa_{1-x}N layers increases almost linearly when $x \leq 0.42$ and reaches to 30% when $x = 0.42$. Above 0.42, the value varies slowly and equals to 0 when $x = 1$ (AlN). In this work the underlying GaN layer is in compressive strain, which results in the reduction of lattice misfit between GaN and Al_xGa_{1-x}N, and a Al_xGa_{1-x}N layer with the composition of about 0.16 might be grown on GaN coherently.

Key words: high resolution X-ray diffraction; AlGa_xN; coherent factor; strain; Rutherford backscattering/channeling

PACC: 6110; 7280E; 0630M

Article ID: 0253-4177(2005)S0-0001-04

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China(No. 69825107); the Joint Program of National Natural Science Foundation of China and the Research Grants Council of Hong Kong(No. 5001161953, N-HKU028/00)

† Corresponding author. Email: jczhang@red.semi.ac.cn

Received 8 November 2004, revised manuscript received 29 November 2004

©2005 Chinese Institute of Electronics