

# 用椭偏光学方法研究 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ 超晶格结构

秦林洪 郑有料 张 荣

南京大学物理系, 南京 210008

(1992年2月25日收到; 1992年5月29日收到修改稿)

本文讨论分析了半导体超晶格的椭偏光学性质, 首次采用多入射角椭圆偏振光学方法研究了半导体超晶格结构, 实验测量给出了  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$  超晶格各子层的厚度、复折射率和组份等基本结构参量. 本方法测量简便, 重复性好, 对样品无破坏作用, 可作为半导体超晶格结构的一种有效的表征手段.

PACC: 7865, 0760F

## 一、引 言

$\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$  超晶格是近年来发展起来的一种新型半导体超晶格材料, 由于其许多特殊有用的电、光性质以及与硅微电子技术的相容性, 而具有极其重要的技术应用前景, 在国际上受到了高度重视. 近年来, 从  $\text{GeSi}$  能带工程出发, 已相继研制出了各种高性能器件, 如75GHz的  $\text{GeSi}$  基区异质结双极型晶体管( $\text{GeSi-HBT}$ )<sup>[1]</sup>, 8—14 $\mu\text{m}$  远红外  $\text{GeSi}/\text{Si}$  探测器<sup>[2,3]</sup>和1.3—1.55 $\mu\text{m}$   $\text{GeSi}/\text{Si}$  近红外探测器<sup>[4]</sup>等等. 因此, 发展一种快速、精确的结构评估测试技术, 已成为  $\text{GeSi}/\text{Si}$  异质结构与超晶格材料生长、物理研究和器件应用所必须解决的问题. 然而现有的一些超晶格表征方法却分别存在着各种限制. 如常用的 X 射线衍射谱(XRD)、Raman 散射谱等, 虽然能给出一些与结构有关的信息, 但要进一步确定其子层厚度及组份时, 却存在着困难. 应用 X 射线荧光光谱(XFS), 扫描电子显微镜(SEM)来确定组份时, 又因其纵向空间分辨率的限制, 而难以区分出超晶格各子层的贡献. 即便使用精度较高的俄歇电子能谱(AES)进行剖面分析, 也会因其剥蚀速率的不确定性, 而难以确定超薄子层的准确厚度. 此外, 这些传统的表征手段大都对样品有不同程度的破坏作用, 这对超晶格材料的器件开发无疑是不利的.

椭圆偏振测量术是一种起源于三十年代, 用来研究媒质界面或薄膜特性的光学方法. 其原理是利用偏振光束在界面或薄膜上的反射或透射时出现的偏振态的改变, 来计算所测系统的基本光学参数. 传统的椭偏术由于受计算技术的限制, 主要用于硅衬底上单层透明膜的测量<sup>[5]</sup>. 近年来, 由于计算机的广泛应用以及计算技术的不断提高, 椭偏术已经成功地应用于两层乃至多层膜的测量, 有效地给出了各层的结构参数<sup>[5,6]</sup>, 并已开始应用于半导体超晶格的研究, Rzhanov 等<sup>[7]</sup>在长波长、样品强吸收条件下, 从理论上把超晶格结

构简化成了一层各向异性的均匀介质膜. Humlicek 等<sup>[8]</sup>则考虑了一个两层各向同性均匀膜模型来代替超晶格模型,并测量了 GaAs/AlAs 超晶格的总体厚度和等效折射率. 第二种方法,由于模型过于简化,已很难表征超晶格的细致结构,诸如子层厚度、组份等. 第一种方法则由于采用的近似条件的限制,导致了方法的实用困难.

本文从超晶格的基本模型出发,利用多入射角法,首次同时得到了超晶格各子层的结构参数,如厚度、复折射率、组分等,对 Ge<sub>x</sub>Si<sub>1-x</sub>/Si 超晶格的测量表明,该方法结果可靠,与样品生长条件及其他表征手段符合得很好,且测量精度高,对样品无破坏作用.

## 二、半导体超晶格椭圆偏光学性质

椭圆偏振测量术的基本思想是,利用偏振态的  $p$  光和  $s$  光在界面或薄膜上的反射或透射时出现的偏振光振幅和位相的改变,来计算所测系统的基本光学参数.

考虑衬底上交替生长两种不同材料的超晶格系统. 如图1所示,假设超晶格在生长平面各向同性,所生长的超晶格具有突变的清晰界面. 约定超晶格第  $j$  子层的复析射率为  $N_j$ , 且  $N_j = n_j - ik_j$ , 厚度为  $d_j$ , 折射角为  $\varphi_j$ , 则根据光学原理,第  $j$  子层的光学特征矩阵为<sup>[9]</sup>:

$$M_j = \begin{bmatrix} \cos\delta_j & \frac{i}{\eta_j} \sin\delta_j \\ i\eta_j \sin\delta_j & \cos\delta_j \end{bmatrix} \quad (j = 1, 2), \quad (1)$$

其中  $\delta_j$  为第  $j$  子层的光学位相厚度,对于波长为  $\lambda$  的入射光有:

$$\delta_j = \frac{2\pi}{\lambda} N_j d_j \cos\varphi_j. \quad (2)$$

$\eta_j$  为第  $j$  子层的光学导纳,定义为  $\eta = \frac{|H|}{|\mathbf{k} \times \mathbf{E}|}$  对于  $p$  偏振波,电场  $\mathbf{E}$  在入射面内,这时有  $\eta_{jp} = N_j / \cos\varphi_j$ , 对于电场  $\mathbf{E}$  垂直于入射面的  $s$  偏振波,则有  $\eta_{js} = N_j \cos\varphi_j$ .

如果超晶格包含了  $m$  个周期,则经过连续的线性变换可得超晶格的特征矩阵为:

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \left( \prod_{j=1}^m M_j \right)^m \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_{\text{sub}} \end{bmatrix}. \quad (3)$$

引进第二类切比雪夫(Chebyshev)多项式:

$$u_m(x) = \frac{\sin[(m+1)\arccos x]}{\sqrt{1-x^2}}, \quad (4)$$

则对于任一规范化后的矩阵的  $m$  次乘方可写作:

$$\begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix}^m = \begin{bmatrix} M_{11}u_{m-1}(x) - u_{m-2}(x) & M_{12}u_{m-1}(x) \\ M_{21}u_{m-1}(x) & M_{22}u_{m-1}(x) - u_{m-2}(x) \end{bmatrix}, \quad (5)$$

其中

$$x = \frac{1}{2}(M_{11} + M_{22}). \quad (6)$$

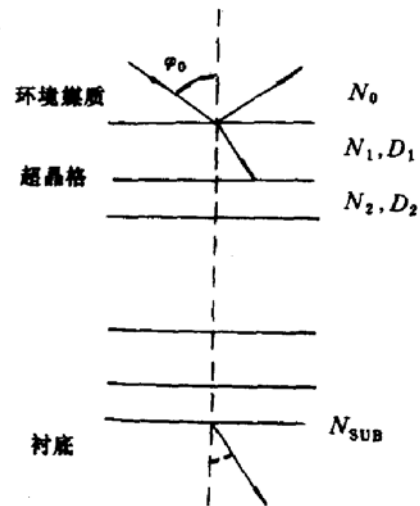


图1 半导体超晶格的光学结构示意图

将(5)、(6)式代入(3)算出  $B$ 、 $C$  值,得到超晶格的振幅反射系数为:

$$r = \frac{\eta_0 B - C}{\eta_0 B + C}, \quad (7)$$

式(7)中的  $\eta_0$  及式(3)中的  $\eta_{\text{sub}}$  分别为环境媒质和衬底的光学导纳. 把以上各式中的  $\eta$  分别以  $p$  光和  $s$  光的对应值代入,可得到超晶格的椭圆方程:

$$\begin{aligned} \text{tg}\psi e^{i\Delta} &= \frac{\gamma_p}{\gamma_s} \\ &= f(N_0, N_1, d_1, N_2, d_2, N_{\text{sub}}, \varphi_0, \lambda, n), \end{aligned} \quad (8)$$

$\Delta$ 、 $\psi$  为按传统椭圆偏方法分别由椭圆偏仪的起偏器、检偏器测得的椭圆角.

方程(8)是从基本原理出发,根据超晶格基本结构推导所得,因此原则上适合于任何材料的超晶格. 求解方程,即可得到所需的超晶格基本光学参数  $N$  和  $d$ .

### 三、 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ 超晶格的多入射角椭圆偏光学测量

由本文第二部分可知,利用方程(8),我们可以得到实部和虚部两个方程,但这不足以求解超晶格的六个未知变量  $n_1, k_1, d_1, n_2, k_2, d_2$ , 为了得到更多的约束方程,我们采用了多入射角法,通过改变入射角  $\varphi_0$  的大小,得到一系列的约束方程:

$$\begin{cases} \psi_q^0 = \psi(N_1, d_1, N_2, d_2, \varphi_q^0) \\ \Delta_q^0 = \Delta(N_1, d_1, N_2, d_2, \varphi_q^0) \end{cases} \quad (q = 1, 2, \dots, Q), \quad (9)$$

由这  $2Q$  ( $Q \geq 3$ ) 个方程组成一个超定的方程组,在所要求参量  $n_1, k_1, d_1, n_2, k_2, d_2$ , 所张成的六维空间中,我们定义最小二乘法的目标函数为:

$$S = \frac{1}{\sqrt{2Q}} \left\{ \sum_{q=1}^Q [(\psi^q - \psi_q^0)^2 + (\Delta^q - \Delta_q^0)^2] \right\}^{1/2}. \quad (10)$$

通过调节六维空间中六个坐标参量来搜寻合理区间中的最优解,使得  $S$  最小.

我们采用 Monte Carlo Method 和 Simplex Method 相结合的方法来优化求解. 即以 Monte Carlo 方法产生合理区间的随机点,作为 Simplex 优化的初始点,以此来加快全区域的优化过程和选择符合物理意义的解. 一般地,  $Q$  值越大,即变入射角提供的方程越多,越有利于解的唯一确定.

由这种多初始点随机优化可以算得子层的复折射率和厚度. 一般地,利用求出的等效复折射率,借助有效介质近似公式,即可求出其子层组分来<sup>[5]</sup>. 对于  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  合金,则可根据 Lukeš 等<sup>[10]</sup>给出的经验公式更精确地确定组份  $x$ . 如果已知折射率为  $n$ , 消光系数为  $k$ , 则 Ge 的组分  $x$  值满足:

$$R = Ax^2 + Bx + C, \quad (11)$$

其中  $A=0.0723, B=0.0635, C=0.3472$

$$R = \frac{(n-1)^2 - k^2}{(n+1)^2 - k^2}.$$

至此便已确定了  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$  超晶格各子层的厚度、复折射率和组分. 但是实验证明,椭圆角  $\psi$ 、 $\Delta$  与超晶格子层结构参数之间的关系是非常复杂的. 以生长 20 个周期的  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  超晶格为例,假定 Si 层为 4.0nm,  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  合金层为 6.0nm,  $x=0.5$ .

如果我们改变  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  层的厚度, 结果导致了椭圆角  $\Delta$  的急剧变化, 即偏振态的  $p$  光与  $s$  光的位相比发生了较大的变化. 如图2所示, 几乎每增加  $0.2\text{nm}$  就能使  $\Delta$  增加  $1^\circ$ , 而一般椭圆仪测得的  $\Delta$  值可准确到  $0.05^\circ$ , 故使用椭圆测量术足以探测到任何超薄的超晶格子层厚度, 其精度是其它表征方法所不能及的.

如果改变  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  合金层中  $\text{Ge}$  的含量  $x$  值,  $\Delta$  也同样变化很大, 并且发现  $\Delta$  对低组份的  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  结构更为敏感(如图3所示). 这可由式(2)得知, 因为  $N = n - ik$ ,  $\delta$  总以  $\exp(-i\delta)$  形式出现, 因此在椭圆方程(8)中,  $n$  主要出现在周期性的三角函数中, 函数振幅大小主要取决于  $\exp(-k)$  因子. 在富  $\text{Ge}$  区,  $k$  较大,  $\exp(-k)$  变小, 导致  $\Delta$  在  $x$  较大时由于衰减过大而呈现出较小的变化量.

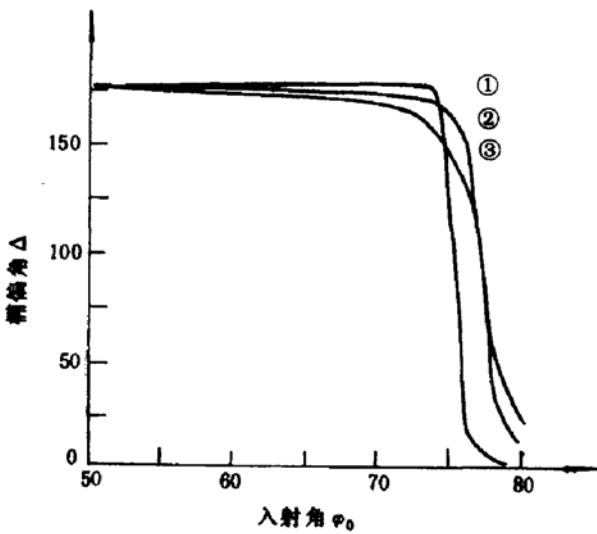


图2  $\text{GeSi}/\text{Si}$  超晶格椭圆角  $\Delta$  随  $\text{GeSi}$  子层厚度  $d_2$  的变化曲线 图中  $\text{Si}$  子层厚度  $d_1 = 4\text{nm}$   $x = 0.5$   $m = 20$  各曲线的  $d_2$  值分别为①  $d_2 = 3\text{nm}$  ②  $d_2 = 6\text{nm}$  ③  $d_2 = 15\text{nm}$

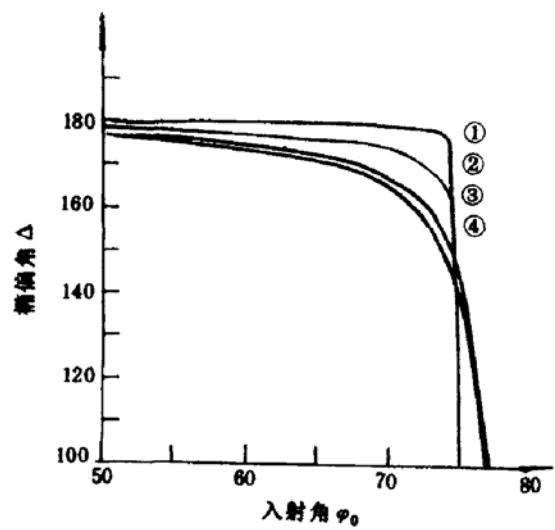


图3  $\text{GeSi}/\text{Si}$  超晶格椭圆角  $\Delta$  随  $\text{GeSi}$  子层中  $\text{Ge}$  组分  $x$  的变化曲线 图中  $d_1 = 4\text{nm}$   $d_2 = 6\text{nm}$   $m = 20$  各曲线的  $x$  值分别为①  $x = 0$  ②  $x = 0.25$  ③  $x = 0.5$  ④  $x = 1.0$

值得注意的是, 调节超晶格的周期数  $m$ ,  $\Delta$  并非象图2、图3那样单调变化, 而是如图4所示, 随着  $m$  的单调增加而回来振荡, 最后在  $m$  很大时, 趋于一极限值. 这是由于式(5)中引入的 Chebyshev 多项式所引起的. 根据 Chebyshev 多项式的性质, 当式(6)中的  $x$  处于  $-1$  和  $1$  之间时, 由式(4)所得的  $u_m(x)$  将随着周期数  $m$  的增加而振荡, 由于复折射率中虚部的衰减作用而使这种振荡越来越弱, 最后变得与  $m$  无关, 即此波长光的穿透深度已经小于所测超晶格的总厚度, 这时,  $m$  和衬底的影响都可忽略, 即简化到了 Rzhanov<sup>[7]</sup> 所提出的模型. 显然, 这种模型的近似对于一般短周期的超晶格是不适合的.

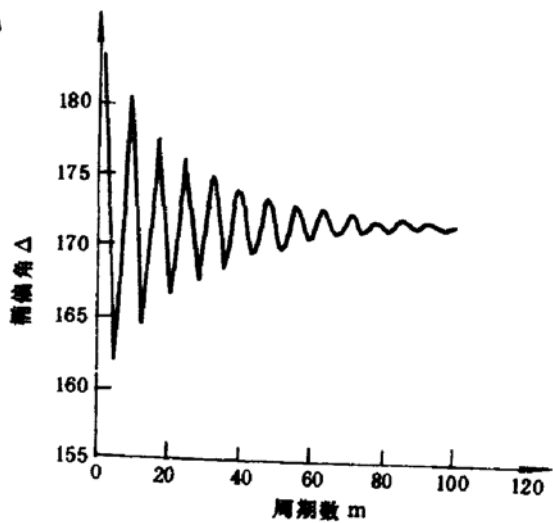


图4  $\text{GeSi}/\text{Si}$  超晶格椭圆角  $\Delta$  随超晶格周期数  $m$  的变化曲线 图中  $d_1 = 4\text{nm}$   $d_2 = 6\text{nm}$   $x = 0.5$

#### 四、测量结果与讨论

我们采用上述的多入射角椭圆偏光学法,测量分析了  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$  超晶格样品. 样品由快速辐射加热、超低压化学气相淀积(RRH/VLP-CVD)原子级外延生长系统生长<sup>[11,12]</sup>. 生长过程完全由微机实时监控,并可事先设定所要生长的超晶格的各子层厚度和组分.

测量所采用的仪器是 TP-77型椭圆偏仪. 以 He-Ne 激光器作光源,波长为632.8nm,椭圆偏仪入射角的可调范围为40°—90°,入射角的最小刻度为0.1°,椭圆角  $\psi$  和  $\Delta$  的最小刻度为0.05°. 测量采用 PCSA 制式,在空气中进行. 对于每个入射角采用两区域平均法,以减小误差.

我们对不同样品及同一样品不同的点进行测量,并把椭圆偏结果与样品生长设定值相比较. 如表1所示. 所测样品皆由 GeSi 合金层和纯 Si 层交替生长而成,其中对于样品 0671A 和0651A,在计算时把 Si 子层的复折射率考虑成已知数输入. 由表可看出,不管是超晶格各子层厚度还是 Ge 的含量,测量结果都很好地吻合了生长的设定值.

对于0584A 样品,我们还进行了小角 X 射线衍射测量. 从得到的小角衍射峰算出超晶格的调制周期为7.6nm,而由椭圆偏测量给出的厚度(对应于同一样品上的不同点)分别为7.7nm 和7.9nm,两者符合得很好.

俄歇能谱测量,由于氦离子束剥蚀速率对样品材料种类的相异性以及超晶格样品的超薄性,已很难得出各子层的准确厚度. 但对样品 0584A 进行的俄歇剖面分析,可大致估算出两子层厚度比为1:1,与椭圆偏结果较为一致.

另外,对0584A 样品还进行了扫描电子显微镜微区分析,测得其 Ge 的原子浓度为7%,略低于椭圆偏结果. 这是由于扫描电子显微镜的电子束穿透深度较大,其组分信息不仅包括了超晶格中 Si 子层的贡献,而且还有可能计及了 Si 衬底的影响.

表1  $\text{GeSi}$  超晶格的生长设定值与椭圆偏测量结果的比较

样品编号	生长设定值			椭圆偏测量结果		
	周期数	厚度(nm)	Ge 组分(%)	厚度	复折射率	Ge 组分(%)
0584A (1)	20	3	20	3.4	4.02-i0.12	19
		4		4.3	3.85-i0.05	
0584A (2)	20	3	20	3.2	3.98-i0.15	16
		4		4.7	3.87-i0.06	
19281	14	12	20	11.4	4.03-i0.12	17
		12		11.6	3.89-i0.20	5
0671A	16	20	10	21.0	3.89-i0.20	5
		30		21.0	3.88-i0.03	
0651A	15	35	100	31.0	5.42-i0.30	95
		25		21.0	3.88-i0.03	

表中还列出了0584A 样品上不同测量点的结果,其子层厚度起伏约0.5nm,比文献[8]中 MBE 样品的厚度不均匀程度小得多,这很好地说明了 CVD 方法生长样品的高质

量性.

对0671A和0651A进行的X荧光光谱分析,也定性地证实了椭偏确定组份的准确性.光谱分析所得的Ge峰峰高(0671A为0.5kcps,0651A为10kcps)与椭偏结果具有一致性.

## 五、结 语

综上所述,我们从理论上和实验上研究了半导体超晶格的椭偏光学表征技术,对 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ 超晶格样品的测试表明,该方法对样品无破坏作用,且测量简便,重复性好,能同时给出超晶格各子层的厚度、复折射率和组份等诸参量.结果准确,与X射线衍射、扫描电子显微镜、俄歇电子能谱分析及X荧光光谱分析等多种表征技术的测试结果一致,是一种富有实用价值的超晶格表征方法.

本工作得到了南京大学物理系超晶格实验室仲培新、胡立群、顾书林、江若璿、王荣华、施洪涛和韩平等同志的大力帮助,他们提供了测试所用的样品,并与作者进行了有益的讨论,特此致谢.

## 参 考 文 献

- [1] Gary L. Patton, James H. Comfort *et al.*, *IEEE Electron Device Letters*, **11**,171(1990).
- [2] T. L. Lin and J. Maserjian, *Appl. Phys. Lett.*, **57**,1422(1990).
- [3] Zheng Youdou, Gu Shulin, Hu Liqun, Zhang Rong, Jiang Ruolian, Wang Ronghua, Liu Xiangna, Zhong Peixin and Shi Hongtao, 1991 Proceedings of International Semiconductor Device Research Symposium, Charlottesville, U. S. A. (1990) pp. 159-162.
- [4] H. Temkin, T. P. Pearsall, J. C. Bean, R. A. Logan and S. Lurgi, *Appl. Phys. Lett.*, **48**,963(1986).
- [5] R. M. A. Azzam and N. M. Bashara; *Ellipsometry and polarized Light*, (North-holland, Amsterdam 1977).
- [6] J. L. Freeouf, *Appl. Phys. Lett.*, **53**,2426(1988).
- [7] A. A. V. Rzhonov, K. K. Svitashv, A. S. Mardezhov and V. A. Shvets, *Sov. Phys. Dokl.*, **33**,146, (1988).
- [8] J. Humlíček, F. Lukeš, K. Navrátil, M. Garriga and K. Ploog, *Appl. Phys.*, **A49**,407,(1989).
- [9] Max Born and Emit Volt; *Principles of Optics*, (Pergamon, Oxford, 1975) pp. 57.
- [10] F. Lukeš, E. Schmidt, J. Humlíček, M. K. Kekoua and E. Khoutsichvili, *phys. stat. sol.*, (a)(**53**),321 (1979).
- [11] Y. D. Zheng, R. Zhang, R. L. Jiang, L. Q. Hu, P. X. Zhong, S. Y. Mo, S. D. Yu, Q. Li and D. Feng; 20th International Conference on the Physics of Semiconductors, (World Scientific, Singapore, 1990) pp. 869.
- [12] Y. D. Zheng, R. Zhang, L. Q. Hu, S. L. Gu, R. L. Jiang, P. X. Zhong, L. H. Qin, H. T. Shi, S. D. Yu, Q. Li and D. Feng, 5th International Conference on Modulation Semiconductor Structures, Nara, Japan, (1991) pp. 152.

## Structure Characterization of $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ Superlattices by Ellipsometry

Qin Linhong, Zheng Youdou and Zhang Rong

*Department of Physics, Nanjing University, Nanjing 210008, China*

(Received 25 February 1992; revised manuscript received 29 May 1992)

### Abstract

A new method of characterizing semiconductor superlattices (SL) with multiple-angle-of-incidence (MAI) ellipsometry is presented for the first time. The ellipsometric properties of SL are studied,  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$  SL samples are measured, and various parameters of SL structure, such as the thickness, complex refractive index and composition of each sublayer, are achieved precisely and simultaneously. The method is proved to be simple, nondestructive and high effective.

**PACC:** 7865, 0760F