

学位论文

分类号

UDC

密级

编号

中国科学院物理研究所

研究生学位论文

题目： 半导体多层膜及超晶格的

X射线双晶衍射研究

姓名： 李建华

导师： 梁敬魁、麦振洪

申请学位级别：理学博士 专业名称： 固体物理

论文提交日期： 1993年6月 论文答辩日期：

学位授予单位和日期：

答辩委员会主席

评阅人

1993年 月 日

目 录

摘要

ABSTRACT

第一章 前言	1
§ 1.1 半导体外延薄膜结构与 X 射线衍射分析	1
§ 1.2 X 射线衍射分析外延结构的理论综述	4
第二章 实验技术	9
§ 2.1 X 射线双晶衍射技术简介	9
§ 2.2 双晶衍射仪的几何原理	10
§ 2.3 双晶衍射仪的反射能力和反射率	12
第三章 X 射线双晶衍射摇摆曲线的衍射动力学理论模拟	15
§ 3.1 X 射线动力学衍射的普遍理论——高木方程组	15
§ 3.2 多层膜结构的 X 射线反射率迭代解及双晶摇摆 曲线的计算	16
§ 3.3 迭代公式中参数的计算	19
第四章 应变层超晶格应变弛豫的研究	25
§ 4.1 引言	25
§ 4.2 应变弛豫超晶格的 X 射线双晶衍射摇摆曲线的计算	26
§ 4.2.1 弛豫机制与应变分布	27
§ 4.2.2 取向差与峰形展宽	30
§ 4.3 计算结果和讨论	32
§ 4.4 InGaAs/GaAs 应变层超晶格的研究	41
§ 4.5 结论	47
第五章 GeSi/Si 应变层超晶格结构不完美性的研究	48
§ 5.1 问题的提出	48
§ 5.2 结构参数的突变: 衍射卫星峰的分裂现象	48

§ 5.2.1	实验与结果	50
§ 5.2.2	讨论	51
§ 5.3	A_1BA_2 型结构: 衍射卫星峰的振荡现象	53
§ 5.3.1	实验与结果	53
§ 5.3.2	分析与讨论	57
§ 5.4	结论	65
第六章	$Al_xGa_{1-x}As/Al_yGa_{1-y}As/GaAs$ 台阶型多量子阱的研究	67
§ 6.1	引言	67
§ 6.2	运动学理论分析	68
§ 6.3	实验与结果	69
§ 6.4	动力学模拟分析	72
§ 6.5	讨论	79
§ 6.6	结论	81
第七章	Si 上外延 GaAs 薄膜的点阵畸变研究	83
§ 7.1	引言	83
§ 7.2	实验与结果	84
§ 7.3	分析讨论	87
§ 7.4	结论	89
致射		91
博士论文期间发表的文章		92
参考文献		93

图表清单

图 1.1	应变层超晶格结构示意图	3
图 1.2	典型的双晶衍射摇摆曲线	4
图 2.1	双晶衍射原理图	9
图 2.2	双晶衍射仪第一和第二晶体的几种排列方式	11
图 2.3	双晶衍射的 DuMond 图	12
图 2.4	(n, -n) 排列的双晶衍射仪的反射几何	13
图 3.1	外延材料结构示意图	17
图 3.2	四方畸变示意图	20
图 3.3	双晶衍射摇摆曲线理论模拟流程图	24
图 4.1	GaAs(001) 衬底之上 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 应变外延膜的临 界厚度与 In 含量 x 的关系	26
图 4.2	应变层超晶格的两种可能的应变弛豫机制	27
图 4.3	无应变弛豫时的双晶衍射摇摆曲线	33
图 4.4	弛豫机制 (1) 时, 不同弛豫比 R 时的摇摆曲线	35
图 4.5	两种弛豫机制下, 弛豫比 R 与零级峰峰位的关系	36
图 4.6	单层 InGaAs 膜时, 弛豫比 R 与峰位的关系	37
图 4.7	弛豫机制 (2) 时, 不同弛豫比 R 时的摇摆曲线	38
图 4.8	机制 (2) 是时, 零级峰峰强与 R 的关系	39
图 4.9	机制 (2) 时 ± 1 级峰峰强与 R 的关系	39
图 4.10	机制 (2) 时 ± 2 级峰峰强与 R 的关系	40
图 4.11	机制 (2) 时 ± 3 级峰峰强与 R 的关系	40
图 4.12	不同的样品取向位置时的 (004) 衍射摇摆曲线	43
图 4.13	不同的样品取向位置时的 (224) 衍射摇摆曲线	44
图 4.14	超晶格层与衬底之间取向差示意图	45
图 4.15	X 射线 (224) 衍射形貌图	46

图 5.1	样品的 (004) 衍射摇摆曲线	49
图 5.2	AB 及 BA 次序时的双晶摇摆曲线	52
图 5.3	表 5.2 中结构的模拟摇摆曲线	53
图 5.4	样品的截面透射电子显微衍衬像	54
图 5.5	样品的 (113) 衍射摇摆曲线	56
图 5.6	表 5.4 中参数的模拟摇摆曲线	59
图 5.7	表 5.5 中参数的模拟摇摆曲线	60
图 5.8	表 5.6 中参数的模拟摇摆曲线	61
图 5.9	表 5.7 中参数的模拟摇摆曲线	62
图 5.10	表 5.8 中参数的模拟摇摆曲线	63
图 5.11	图 5.10 中零级峰最近邻振荡条纹的强度与 Δf 的关系	64
图 6.1	台阶型 MQW 的能带结构示意图	67
图 6.2	1 [#] 样品的 (002) 衍射摇摆曲线	70
图 6.3	2 [#] 样品的 (002) 衍射摇摆曲线	71
图 6.4	Al 束流变化时, 其变化量 m 与层厚变化 Δt 及成份变化 Δz 的关系	74
图 6.5	Ga 束流变化时, 其变化量 m 与层厚变化 Δt 及成份变化 Δz 的关系	75
图 6.6	x 和 y 对 (002) 衍射摇摆曲线 $\pm 1, \pm 2$ 级卫星 峰强度的影响	76
图 6.7	No.1 样品的 (004) 衍射摇摆曲线	80
图 6.8	No.2 样品的 (004) 衍射摇摆曲线	80
图 7.1	样品的结构示意图	85
图 7.2	典型的双晶衍射摇摆曲线	85
图 7.3	弯曲引起切应力的示意图	87
图 7.4	GaAs 点阵的切应变模型	88
图 7.5	有效点阵失配 ε 与切应变 e 的关系	89
表 4.1	图 4.12 和图 4.13 中模拟曲线的模拟参数	42
表 5.1	图 5.1 中 (b)、(c) 两条曲线的模拟参数	50

表 5.2	图 5.3 中各曲线的模拟参数	54
表 5.3	图 5.5 中曲线 (b) 的模拟参数	57
表 5.4	图 5.6 中摇摆曲线的模拟参数	58
表 5.5	图 5.7 中各曲线的模拟参数	60
表 5.6	图 5.8 中各曲线的模拟参数	61
表 5.7	图 5.9 中各曲线的模拟参数	62
表 5.8	图 5.10 中各曲线的模拟参数	64
表 6.1	图 6.1 中各曲线的峰位值	77
表 6.2	图 6.1 中各曲线卫星峰相对零级峰的相对强度	77
表 6.3	No.1 和 No.2 样品 (004) 衍射摇摆曲线的模拟参数	79
表 7.1	实验结果	86

摘 要

X 射线双晶衍射技术及动力学衍射理论模拟双晶衍射摇摆曲线是研究半导体外延多层膜及超晶格的结构及完美性的有效手段。本文从 X 射线动力学衍射的普遍理论——高木方程组出发,推导出适用于多层膜及超晶格结构的 X 射线衍射摇摆曲线理论模拟的迭代解。对几种不同的多层膜、超晶格结构的结构参数和结构完美性进行了认真的研究分析,主要结果如下:

(1)给出了应变弛豫超晶格的 X 射线双晶衍射摇摆曲线的动力学理论模拟方法。模拟中考虑了不同的应变弛豫机制,超晶格层与衬底之间的取向差以及失配位错的形成引起的衍射卫星峰的展宽效应。模拟计算表明,如果是整个超晶格层作为一个整体在与衬底相交的界面上发生应变弛豫时(弛豫机制(1)),仅仅卫星峰的峰位受弛豫比 R 的影响,而卫星峰强度的分布则不受 R 的影响;如果应变弛豫是发生在超晶格内部所有界面上(弛豫机制(2)),那么不仅卫星峰的峰位受弛豫比 R 的影响,卫星峰的强度分布也随 R 的变化而变化。两种弛豫机制下,卫星峰相对衬底峰的距离都随弛豫比 R 的增加呈线性下降的关系。由此,通过模拟摇摆曲线峰强的办法,可以确定超晶格中应变弛豫的机制。

对一个 15 周期的 $\text{In}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{As}(150\text{\AA})/\text{GaAs}(180\text{\AA})$ 超晶格样品的实验分析表明,所有超晶格层是作为一个整体在与衬底相交的界面上发生了应变弛豫,即弛豫机制(1)起了作用,其平均应变弛豫比 R 确定为 32.7%。在超晶格层与衬底之间,观察到一个沿 $[010]$ 方向的 325° 的取向差角。X 射线双晶形貌观察则发现,在超晶格层与衬底之间的界面上,位错线呈单向分布,而在超晶格层内部,位错线则呈网格状分布。

(2)对 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ 应变层超晶格的 X 射线双晶衍射摇摆曲线中出现的两类现象——卫星峰产生分裂和卫星峰伴有强烈的振荡条纹及

其所对应的结构不完美性进行了研究。结果表明,卫星峰的分裂是由于超晶格的结构参数在生长过程中产生了一次突变所致,而卫星峰一侧的振荡条纹是由于样品结构参数的变化形成 A_1BA_2 型结构所致。在第一种情形下,如果结构参数的变化很小时,并不会引起卫星峰的分裂,而仅仅使得卫星峰出现不对称宽化。只有在结构参数的变化较大时,才会使卫星峰出现分裂。在第二种情形下,振荡条纹与 B 区的周期数,相对 A 区的平均失配变化有很大的关系。当 B 区相对衬底的平均失配比 A 区大时,振荡条纹出现在卫星峰的高角度一侧,而当 B 区相对衬底的平均失配小于 A 区时,振荡条纹则出现在卫星峰的低角度一侧。振荡条纹的强度则决定于 A、B 两区平均失配相差的大小,两者平均失配相差越大时,振荡条纹越强,反之亦然。

(3)对 $Al_xGa_{1-x}As/Al_yGa_{1-y}As/GaAs$ 台阶型多量子阱结构进行了 X 射线双晶衍射分析。衍射运动学理论的分析表明,这种结构的衍射卫星峰间距与周期的关系与二元超晶格情形时相同。在用衍射动力学理论模拟实验摇摆曲线时,考虑了生长过程中可能来自不同束源的束流的变化对层厚及成份的不同影响,并对 x 和 y 值变化对摇摆曲线的影响作了认真的分析,发现了它们对卫星峰强度影响的不同之处。获得了对实验曲线的最佳拟合。结果除了得到样品的真实结构参数外,还得到了引起它们偏离设计值的原因。通过对一个简单的 $AlGaAs/InGaAs/AlGaAs$ 三层结构进行生长,测试,再生长,再测试的循环实验,证实了上述方法可以有效地用来跟踪材料生长工艺,缩短材料的设计周期,因而有其实用价值。

(4)对采用不同生长工艺,具有不同结构的 Si 上外延 GaAs 薄膜进行了研究。对实验中观察到的 GaAs 外延膜的点阵参数小于体材料点阵参数这一现象,提出了一个外延膜点阵的切应变模型作出了成功地解释。我们发现,在切应变小于 0.7% 时, GaAs 点阵形变很小,其与衬底 Si 的点阵失配接近体材料的 GaAs 与 Si 之间的失配;但当切应变大于 0.7% 时,随着切应变的增加, GaAs 点阵的形变迅速增大,使得点阵面间距减小,从而测量得到的 GaAs 外延膜与 Si 衬底之间的失配小于

两者材料之间的失配。

关键词: 双晶衍射, 动力学衍射, 摇摆曲线, 模拟, 半导体外延膜, 超晶格, 量子阱, 应变弛豫, 点阵畸变。

ABSTRACT

X-ray double-crystal diffractometry combined with theoretical simulation of rocking curves using the x-ray dynamical scattering theory is one of the most powerful tools for structural analysis of semiconductor multilayer and superlattice structures. In this thesis, a recurrence formula used for theoretical simulation of the x-ray double-crystal diffraction rocking curves is derived from the general theory of x-ray dynamical diffraction—the Takaki-Taupin equations. Different kinds of multilayer and superlattice samples were studied and the main results are as following:

(1) A method for theoretical simulation of the rocking curves for strain relaxed superlattice was given out. The mechanism of strain relaxation, the misorientation between the superlattice layers and the substrate, and the peak broadening due to the formation of misfit dislocations were taken into account in the simulation. We demonstrate that if the strain is relaxed only on the superlattice/substrate interface (mechanism 1), the relative position of the superlattice satellites will be influenced by the relaxation ratio R , but not the distribution of their intensities. While if the strain is relaxed on the interfaces throughout the superlattice layers (mechanism 2), both the relative position and the intensity distribution of the superlattice satellites will be changed with the change of R . Therefore by fitting the intensities of the simulated rocking curves to their experimental counterparts, the mechanism of strain relaxation for a superlattice can be determined.

For a $\text{In}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{As}$ ($150\text{\AA}$) / GaAs ($180\text{\AA}$) superlattice with 15 periods, the experimental results show that the strain is relaxed with mechanism 1. The average percentage strain relaxation ratio R is 32.7%. A misorientation angle with $325''$ along $[010]$ direction between the superlattice layers and the substrate was observed.

(2) The peak separation of the superlattice satellites and the appearance of strong oscillation fringes around the satellites in the rocking curves of GeSi/Si superlattices and its related structural imperfection were studied. We show that the peak separation of

the satellites is caused by an abrupt variation of the structural parameters during the growth process, while the appearance of the oscillation fringes around the satellites is due to the formation of a A_1BA_2 type structure. If the average misfit of B is larger than that of A, the fringes appear on the higher angle sides of the satellites, and if the average misfit of B is smaller than that of A, then the fringes appear on the lower angle sides of the satellites.

(3) The structures of $Al_xGa_{1-x}As/Al_yGa_{1-y}As/GaAs$ step multiquantum wells on (001) GaAs was studied. In the simulation of the experimental rocking curves the possible variation of the structural parameters due to the variation of beam fluxes during the growth process were considered. The effect of the variation of x and y on the rocking curves were analyzed. Good agreements between the theoretical simulated rocking curves and the experimental ones were obtained. As a result, both the real structures and the possible reasons for them drifting from the design ones were deduced.

(4) GaAs/Si materials grown by different growth process with different structure ~~were~~^{are} studied. A shear strain model was proposed to interpret the experimental phenomenon that the observed lattice parameters of the GaAs epilayers are smaller than that of GaAs bulk materials. We found that when the shear strain is smaller than 0.7%, the lattice deformation of GaAs epilayers are small and then the measured lattice misfit between the GaAs epilayers and the Si substrates are close to that between GaAs and Si bulk materials. When the shear strain is greater than 0.7%, the lattice deformation of GaAs epilayers increased sharply, so that the measured lattice misfit between the GaAs epilayers and the Si substrates obviously smaller than that between GaAs and Si bulk materials.

关键词
Key words: Double-crystal diffraction, Dynamical scattering, Rocking curve, Simulation, Semiconductor epilayer, Superlattice, Multiquantum well, Strain relaxation, Lattice deformation.

第一章 前言

§1.1 半导体外延薄膜结构与 X 射线衍射分析:

随着技术先进的,性能可靠的薄膜淀积技术,如分子束外延(MBE)^[1],金属氧化物化学气相淀积(MOCVD)^[2]以及液相外延(LPE)^[3]等技术的不断发展和完善,对半导体多层膜和超晶格、量子阱作为新的微电子和光电子器件材料的研究兴趣也与日俱增^[4-6],并已成为当今半导体科学技术中极为重要的前沿和领域。半导体器件的设计制造也随之由原先的所谓“杂质工程”发展到了“能带工程”和“电子特性与光学特性的裁剪”等新的范畴。现在人们已可以在Si、GaAs、InP等衬底上生长几乎所有可能的半导体化合物,其组元包括Ga、As、Ge、Si、Al、Sb、P、In、Hg、Cd等等。通常,外延结构的能带随着其结构参数而变,因而仔细地控制生长的结构参数对于裁剪能带以适应特殊的光发射频率等要求就显得十分重要。对半导体超晶格和量子阱,早期的研究工作主要集中在由“晶格匹配”的半导体材料(如AlAs/GaAs)构成的各种异质结构上,这是因为构成超晶格的各材料之间的微小晶格失配,可以很容易地通过材料的弹性应变来调节,因而比较容易生长。但是,晶格匹配的半导体材料的数量比较少,可供选择的材料组合也就很有限。近几年来,人们越来越多地把目光转向由较大晶格失配材料组成的超晶格系统,这不仅使得制备超晶格可选用的材料大大增加,更有意义的是使得人们可以通过调节应变来调节能带,从而实现所需的光电性能^[7-10]。由于生长技术的不断完善以及对失配材料的生长工艺的不断探索,现在已能生长出高质量的,晶格失配高达7%的应变层超晶格或量子阱结构。图1.1给出了一个典型的应变层超晶格结构,各个应变层交替地处于压缩和伸张状态以使它们在生长面上的晶格常数处于一致。如果每个单层的厚度都保持在产生失配的临界厚度以下,那么所有的晶格失配都将由层间应变来调节而不会产生失配位错^[11-16]。

外延材料的性能与其结构和完美性密切相关,因而生长时就要求严格准确地控制材料的结构参数,以实现最优性能,但尽管是采用最先进的生长技术如分子束外延等,通常这种严格的控制都很难准确实现。生长工艺的不完善或生长过程中偶然因素(如分子束外延生长中温度或束流的波动等)存在时,晶体中就会产生一些不完美性,如超晶格周期的波动,相对层厚的变化,成份的不均匀,界面不理想以及产生失配位错等。这些不完美性直接影响器件的性能,如在一个激光器结构中,失配位错将直接损害其使用寿命。因而,分析和研究外延材料的结构,成份和完美性等对于了解材料的真实情况,优化生长条件,获得高性能的器件无疑是十分重要的。

在众多研究外延结构的实验方法,如 X 射线衍射,透射电子显微镜,光荧光,喇曼散射等中,X 射线双晶衍射技术被证明是最为有效的手段之一。它不同于普通的 X 射线衍射技术所检测到的作为角度函数的总衍射强度的变化,晶体中点阵应变随深度的变化会对强度与角度的关系曲线,即所谓的摇摆曲线产生极强的影响。这种技术的优点是高的应变分辨率,无需对样品进行处理,对样品无损伤和无污染,因而可以继续进行其它工艺和测量,以获得不同工艺阶段的信息。对于高完美度的晶体,X 射线双晶衍射测得的摇摆曲线的半峰宽非常接近理想晶体的 X 射线动力学衍射理论曲线的半峰宽,其值大约在几秒的数量级^[17]。如果晶体中存在缺陷,其摇摆曲线的半峰宽就会增大。这一特性很早就被用来检测晶体的完美性^[18-21]。最近的工作则集中在异质外延生长于半导体衬底上的低维结构。典型的摇摆曲线示于图 1.2。分析摇摆曲线的基本技术在一些评论性的文章中也已有了详细的描述^[22-24]。通过分析,我们可以得到许多关于外延材料结构的信息,诸如:

(1)从衍射峰的分离,得到晶格失配以及成份^[24]。

(2)以衬底衍射矢量为轴转动样品,测量不同位置时的衍射峰的距离,可获得外延膜与衬底之间的点阵倾角(或取向差)^[25]。

(3)从衍射峰的积分强度比^[26, 27]或 Pendellosung 条纹的周期

,可得到外延膜的厚度。

(4)通过研究从几个非对称反射得到的有效失配,可获得点阵共格与否的信息^[25-32]。

(5)从摇摆曲线的峰宽与束斑大小的关系,或者当光束沿样品扫描时的绝对峰位可得到样品的弯曲情况^[32]。

(6)从衍射峰宽可判断外延膜的质量或完美性^[33-37]。

(7)通过模拟实验数据,可获得层厚或成分随深度的变化^[38-40],包括界面梯度^[41, 42]。

(8)对超晶格和多量子阱结构,由卫星峰的周期可获得结构的周期;由零级峰的位置可得到平均成份^[42]。

(9)超晶格的界面粗糙或周期波动^[43]

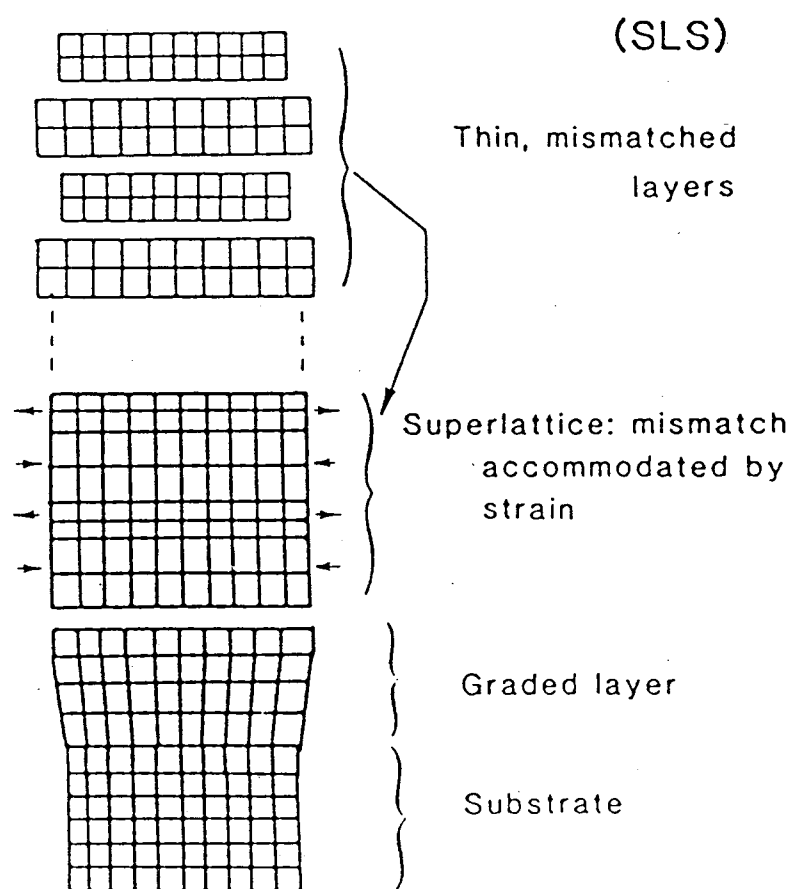


图 1.1 应变层超晶格结构示意图

更高精度的 X 射线衍射还可采用多晶单色器或三晶衍射仪。采用多晶单色器可以有效地降低入射光束波长和角变的发散度,提高其准直性和单色性,因而可以更有效地降低背底散射,提高分辨率^[44]。三晶衍射仪由于在探测器前面又加了一块分析晶体,因而可以得到衍射强度在倒易空间中的二维分布。这种技术可以区别相干散射与漫散射,同时还可消除样品弯曲等的影响,因而适于研究晶体的表面与界面,点阵的倾斜,微应变和微缺陷等等^[45-47]。但是由于 X 射线经多次反射后强度损失也较大,这就要求采用高亮度的光源,而这是普通 X 光源不易实现的。随着高亮度旋转靶 X 光机和同步辐射光源的应用和不断发展,这一领域的研究也日趋活跃。可以期望,在不远的将来,这一技术将会得到更广泛的应用和发展。

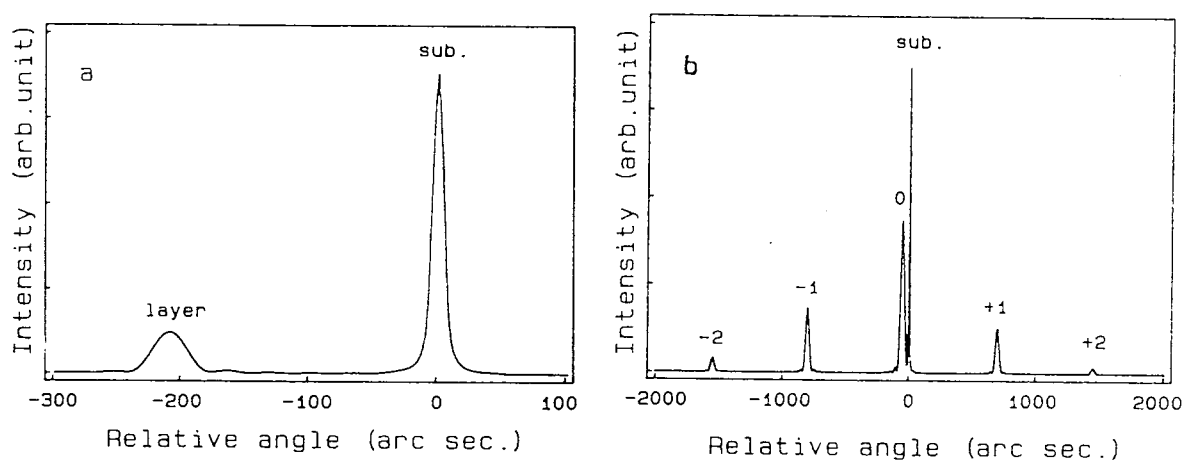


图 1.2 典型的 X 射线双晶衍射摇摆曲线。(a) 异质外延膜结构。
外延膜为 GaAs(001) 衬底之上的 AlGaAs 单层膜, (004)
(b) AlAs/GaAs 超晶格结构, (002) 反射

§ 1.2 X 射线衍射分析外延结构的理论综述

目前,用 X 射线衍射法进行外延结构分析的理论主要有运动学理论,半运动学理论,动力学理论及统计动力学理论。早在 1912 年晶体

的 X 射线衍射现象发现之际, Laue 就提出了一种简单的衍射理论来进行解释。这种理论就是后来称为的运动学(或几何)衍射理论。70 年代, Segmuller^[48] 及 Speriosu^[49, 50] 等人将这种理论应用于解释多层膜和超晶格的衍射现象, 其基本点是对衍射因子的分析。按照 Speriosu 的理论, N 层膜的 X 射线衍射振幅为:

$$E_N = i \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} \sum_{j=1}^N a_j \exp[-i(A_j Y_j + \phi_j)] \frac{\sin A_j Y_j}{Y_j} \quad (1.1)$$

其中:

$$a_j = \exp\left(-\mu \frac{\gamma_0 + |\gamma_h|}{2|\gamma_0 \gamma_h|} \sum_{i=1}^N t_i\right)$$

$$a_N = 1$$

$$\phi_j = 2 \sum_{i=1}^{j-1} A_i Y_i$$

$$\phi_1 = 0$$

$$A_j = \frac{r_e \lambda |F_j| t_j}{V_j \sqrt{|\gamma_0 \gamma_h|}} \quad (1.2)$$

$$Y_j = \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} \frac{\pi V_j \sin 2\theta_B}{r_e \lambda^2 |F_j|} \Delta\omega \quad (1.3)$$

$$\Delta\omega = \theta - \theta_B^+ (\varepsilon^\perp \cos^2 \varphi + \varepsilon^\parallel \sin^2 \varphi) \operatorname{tg} \theta_B \pm (\varepsilon^\perp - \varepsilon^\parallel) \sin \varphi \cos \varphi \quad (1.4)$$

式中, r_e 为经典电子半径, μ 为线吸收系数, t_j 为层厚, F_j 为结构因子, V_j 为单胞体积, θ_B 为衬底的衍射 Bragg 角, φ 为衍射面与晶体表面的夹角, γ_0 和 γ_h 分别为入射光束与衍射光束相对衬底表面内法向的方向余弦, $\varepsilon^\parallel$ 和 $\varepsilon^\perp$ 则为平行及垂直生长面方向的应变, $(\pm)$ 号分别对应掠入射

和掠出射,即入射角分别为 $(\theta_B - \varphi)$ 和 $(\theta_B + \varphi)$ 的情形。

对 M 周期的超晶格结构,每一周期中都包含有两个组元层,分别记为 a 和 b ,它们分别具有各自的层厚、应变、结构因子以及与之相关的 A_a , Y_a 和 A_b , Y_b , 其衍射振幅 (1.1)) 式可转化为:

$$E_M = i \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} e^{-i\beta F_s} \frac{\text{Sin}[M(A_a Y_a + A_b Y_b)]}{\text{Sin}(A_a Y_a + A_b Y_b)} \quad (1.5)$$

其中:

$$\beta = (M-1)(A_a Y_a + A_b Y_b) + A_a Y_a \quad (1.6)$$

$$F_s = \frac{\text{Sin} A_a Y_a}{Y_a} + e^{-i(A_a Y_a + A_b Y_b)} \frac{\text{Sin} A_b Y_b}{Y_b} \quad (1.7)$$

这里 F_s 可认为是超晶格一个周期的结构因子。

$$\text{由 (1.5) 式可知, 当: } A_a Y_a + A_b Y_b = n\pi \quad (1.8)$$

时, E_M 有极大值,即可观察到衍射峰,其中 $N=0, \pm 1, \pm 2 \dots$ 对应于衍射峰的级数。从两级衍射峰之间的角距离 $\Delta\theta_p$, 我们还可以得到超晶格的周期:

$$t_p = t_a + t_b = \frac{\lambda |\gamma_h|}{\Delta\theta_p \text{Sin} 2\theta_B} \quad (1.9)$$

从 (1.5) 式还可发现,各级卫星峰的振幅正比于超晶格的结构因子 F_s , 第 n 级峰对应的结构因子 F_{sn} 为:

$$F_{sn} = \text{Sin} A_{an} Y_{an} \left(\frac{1}{Y_{an}} - \frac{1}{Y_{bn}} \right) \quad (1.10)$$

运动学理论最大的优点是数学表达简洁,物理意义明确。但由于它只考虑了每一个原子与入射 X 射线的相互作用而完全忽略了入射光与各

衍射光之间的相互作用,因而其弱点也是明显的,即缺乏自洽性,也破坏了能量守恒定律。上述 Speriosu 的理论只适用于反射率小于 6% 的衍射,如果外延膜较厚,反射率大于 6% 时,用该理论就会产生明显的误差。

动力学理论^[51, 52]克服了运动学理论的这些不足之处,又进一步考虑到多重散射效应和 X 射线在穿过晶体时所产生的能量损失,因而是一种更为严格和准确的理论。在处理有畸变的晶体和任意形状波阵面的入射光束的衍射问题时,动力学理论是基于著名的 Takagi-Taupin 方程组来求解的^[53, 53]。本文的研究将以该理论为主要依据,因而将在下一章中作详细讨论。

为了克服运动学理论遇到的困难,同时也为了获得有清晰物理意义的表达以及比较简单的数学计算, Petrashen^[55]及 Tapfer 和 Ploog^[56]等人又提出了一种所谓的半运动学理论。其基本思想是考虑一个作为角度函数 y 的函数的反射率 $R(y)$, 它由两部分组成;完美晶体的 Darwin 反射率 $R(y)$ 和一个与形变有关的项。

$$R(y) = R_p(y) \left| 1 - 2iy \sum_{i=1}^n \exp(i\Phi_j) \sin[y - S_j] \Delta_j / (y - S_j) \right|^2 \quad (1.11)$$

$$R_p(y) = |g - y|^2 \quad (1.12)$$

其中:

$$y = \frac{-2b \sin(2\theta_B) \delta\theta - (1-b) \chi_0^r + i \chi_0^i}{2C [|b| (\chi_h^r \chi_{\bar{h}}^r - \chi_h^i \chi_{\bar{h}}^i)]^{1/2}} \quad (1.13)$$

$$g = \text{Sign}(y^2 - 1 - 2i \frac{\chi_{\bar{h}}^r - \chi_h^i + \chi_h^r \chi_{\bar{h}}^i}{\chi_h^r \chi_{\bar{h}}^r - \chi_h^i \chi_{\bar{h}}^i})^{1/2} \quad (1.14)$$

$$\phi_j = -y \Delta_j [2(n-j) + 1] + \Delta_j S_j + 2 \Delta_j \sum_{j=j+1}^n S_j \quad (1.15)$$

其中, S_j 是第 j 层的应变, $b = \gamma_0 / \gamma_h$, θ_B 是衬底衍射 Bragg 角, Δ_j 是第 j 层以消光距离 l_{ex} 除以 π 为单位的厚度, 而 l_{ex} 为:

$$l_{ex} = \frac{\lambda (\gamma_0 / \gamma_h)^{1/2}}{2\pi C(\chi_h^r \chi_h^r - \chi_h^i \chi_h^i)^{1/2}} \quad (1.16)$$

该理论的实质是对可以看作体材料的衬底作动力学处理, 而对外延薄膜作运动学处理。因而它仍有一定的局限性, 尤其对厚度较厚, 完美程度较高的薄膜分析, 仍然会产生较大的误差。

统计动力学理论是在动力学理论的基础上, 最新发展的一种理论^[57-59], 它分别考虑了晶体完美部分的相干散射和缺陷产生的非相干散射, 特别适于研究晶体中的缺陷尺寸和缺陷密度等, 因而将会日益受到人们的关注。

第二章 实验技术

§ 2.1 X 射线双晶衍射技术简介

单晶 X 射线衍射技术很早就被广泛用来研究外延薄膜^[60],但是由于其 Bragg 反射峰的宽度是由准直仪的几何来决定的,因而就限制了它对点阵失配的分辩率在 500ppm 以上,这显然不能满足对外延薄膜精细结构和应力状态了解的需求。于是,X 射线双晶衍射技术在最近得到了越来越广泛的应用。虽然这种技术早在二十年代已有报道,但主要是用于测定 X 射线波长,谱线宽度,晶体反射系数等。只是在近十几年由于近完美晶体,尤其是外延单晶薄膜在半导体、激光、红外等新兴科学技术方面逐渐得到广泛的研究和应用,为了研究检测这些材料的结构和完美性,显示其中微观缺陷与性能之间的关系,双晶衍射技术才又重新得到人们的重视^[61, 62]。

双晶衍射技术的工作原理示于图 2.1,它包含 X 射线从参考晶体(或称第一晶体,单色器)和样品晶体(或称第二晶体)的两次连续的反射,即从光源出射的 X 射线首先照射在一块高完美的晶体(即第一晶体)上,由于只有满足一定衍射条件的 X 射线才能得到衍射,因而衍射线束的单色性好,发散度小。用它作为样品(第二晶体)的入射线,可以得到接近理论值的衍射谱线宽度。衍射谱线对微小应变非常敏感,灵敏度可达 50ppm,比单晶衍射仪提高了十多倍。

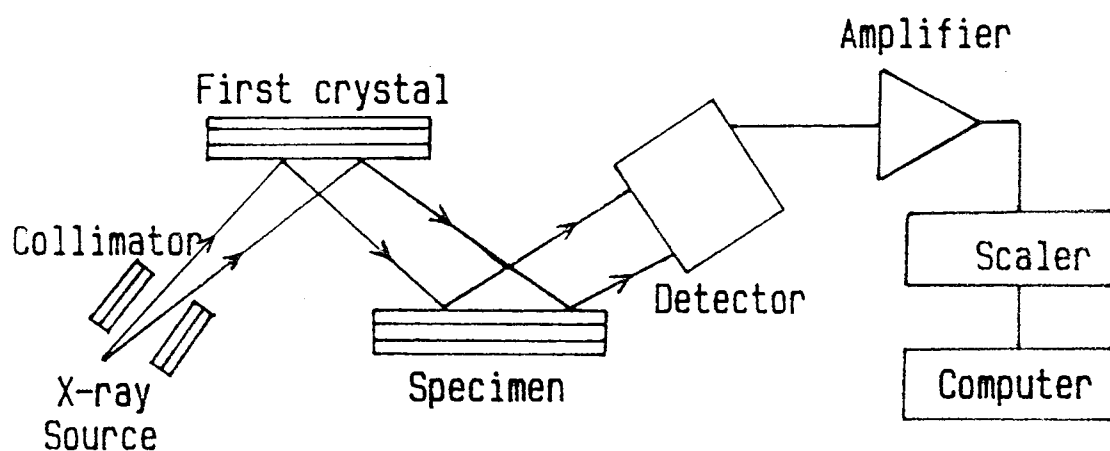
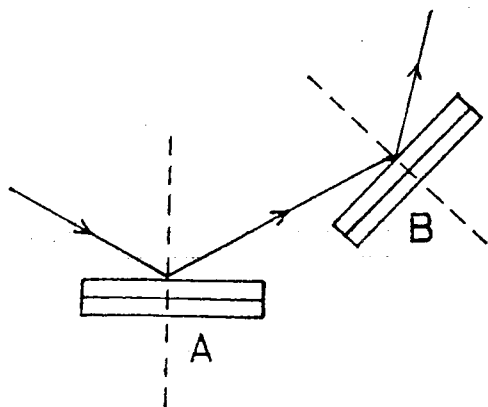


图 2.1 双晶衍射原理图

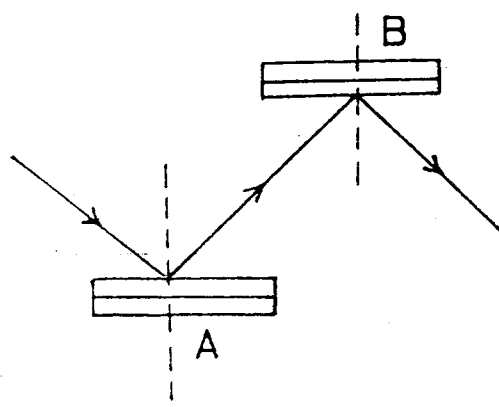
在实验布置中,第一晶体和第二晶体都可以其法线为轴自转。第二晶体且可平动,仰俯和倾动,以保证可调整样品至最佳衍射状态。在 Bragg 角附近转动第二晶体,记录衍射强度随角度的变化,就得到双晶衍射谱线——即通常称之的“摇摆曲线”。数据的采集和晶体的转动都可采用计算机控制,因而可以有很高的精度和角度分辨率。以我们实验所用的双晶衍射仪为例,角度分辨率可达一秒,因而非常适合于研究近完美晶体及微缺陷。如果在探测器的前边加放 X 光底片,那么还可以拍摄到高分辨的双晶形貌图,是观察晶体中的缺陷和微应变的一种有效手段。

§2.2 双晶衍射仪的几何原理

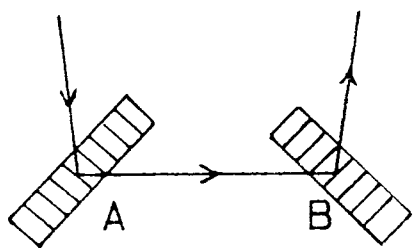
根据不同的需要,双晶衍射仪可以是反射型或透射型,可以是对称排列的,也可以是非对称排列的^[63]。图 2.2 给出了几种常见的排列方式。当入射线束与衍射线束在晶体的一侧是,称为 $(+,+)$ 排列,反之则称为 $(+,-)$ 排列。若两块晶体 A,B 属同一材料,且反射面级数一致时,这种装置称为 (n,n) 或 $(n,-n)$ 排列;若两块晶体的反射面级数不同或晶体材料不同时,则称为 (m,n) 或 (m,n) 排列。双晶衍射仪取 $(n,-n)$ 排列时,两块晶体分别取 (hkl) 和 $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ 反射。这时,入射 X 射线在第一晶体满足 Bragg 定律而产生的衍射必然满足第二晶体的衍射条件得到相应的反射,因而是无波长色散(或无能量色散)的排列。这在 DuMond 图上表现为两个“ $\lambda - \theta$ ”曲线的重迭,如图 2.3(a)所示。当第二晶体有局部的微小取向差时,则在原来的 λ_1, θ_1 条件下,这一局部不再反射,两个曲线不再重迭,如图 2.3(b)和(c)所示。这时,总的反射强度下降,必须将第二晶体转到 θ_2 处才能使 λ_1 反射。因此,这种排列给出极好的角分辨率,对第二晶体中微小应变极为灵敏,因而应用也最广。图 2.3(d)是对称反射 (n, n) 排列的 DuMond 图,“ $\lambda - \theta$ ”关系的两根曲线相交。当第二晶体有局部的微小应变时,曲线 1、2 仍能相交,其交点沿曲线移动,总能在一个小的 $\Delta\lambda$ 范转内发生另一个 λ 的反射,因而是有色散的排列。它对晶体微小应变并不灵敏,反射强度也很低,所以在



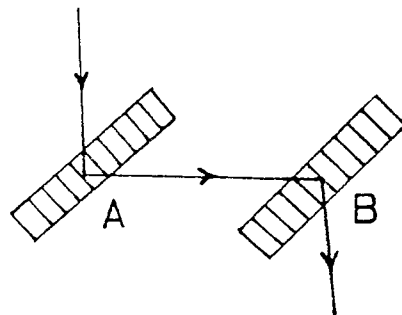
(a) (m, n) 反射型双晶排列



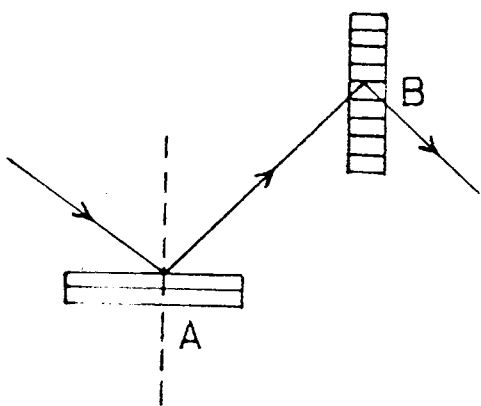
(b) $(m, -n)$ 反射型双晶排列



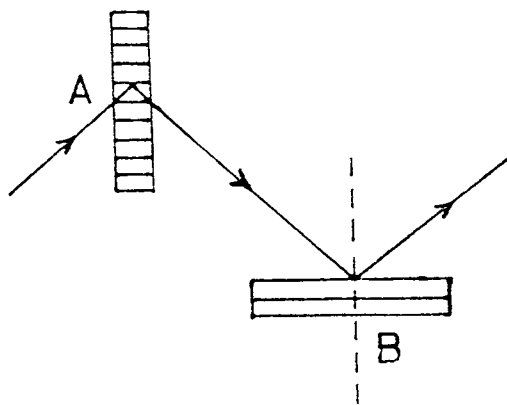
(c) (m, n) 透射型双晶排列



(d) $(m, -n)$ 透射型双晶排列



(e) 反射—透射型双晶排列



(f) 透射—反射型双晶排列

图 2.2 双晶衍射仪双晶的几种排列方式

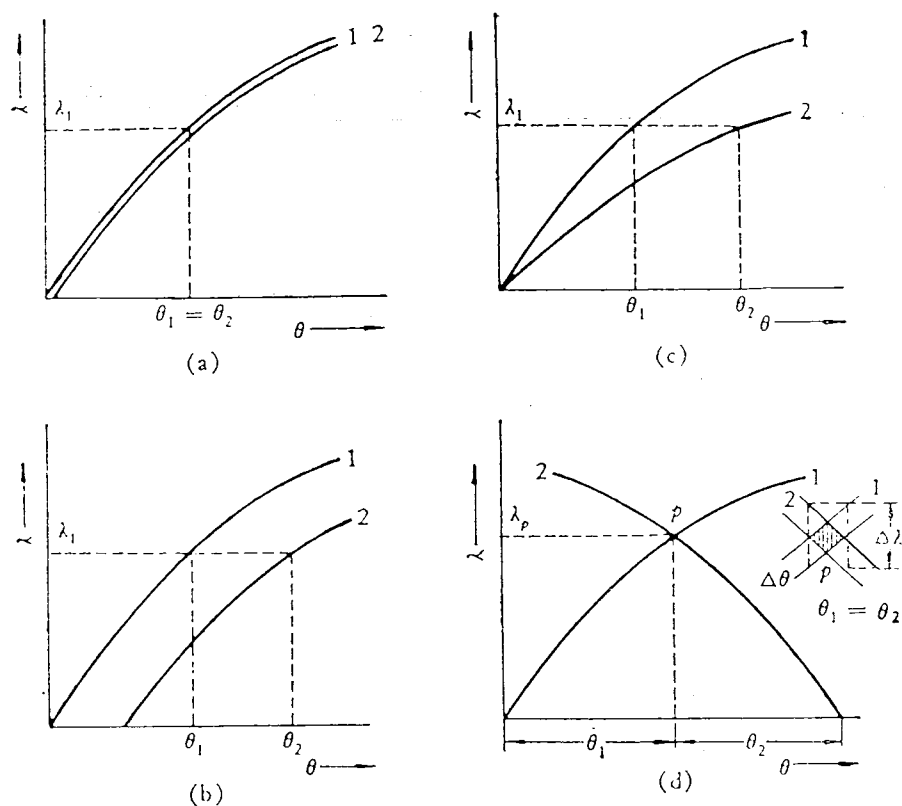


图 2.3 双晶衍射的 DuMond 图 (a) $(n, -n)$ 排列, 两块完美晶体; (b) $(n, -n)$ 排列, 第二晶体点阵有局部位移; (c) $(n, -n)$ 排列, 第二晶体点阵有局部转动; (d) (n, n) 排列

晶体缺陷研究中较小应用。

§ 2.3 双晶衍射仪的反射能力和反射率

双晶衍射仪的反射能力取决于两块晶各自的反射能力以及衍射的几何关系。图 2.4 表示一台 $(n, -n)$ 排列的双晶衍射仪, 入射线 PO 与第一晶体 A 的表面形成 Bragg 角 θ_1 , 当晶体完美时, 反射线只有在几秒的范围内才有明显的强度, 在通常的实验工作中, 入射线虽经光阑限制, 但其发散角仍在数百秒的范围内, 远大于晶体的反射范围。令入射线束 MO 与 PO 在水平面内形成 α 角 (称为入射束的水平发散度), 忽略

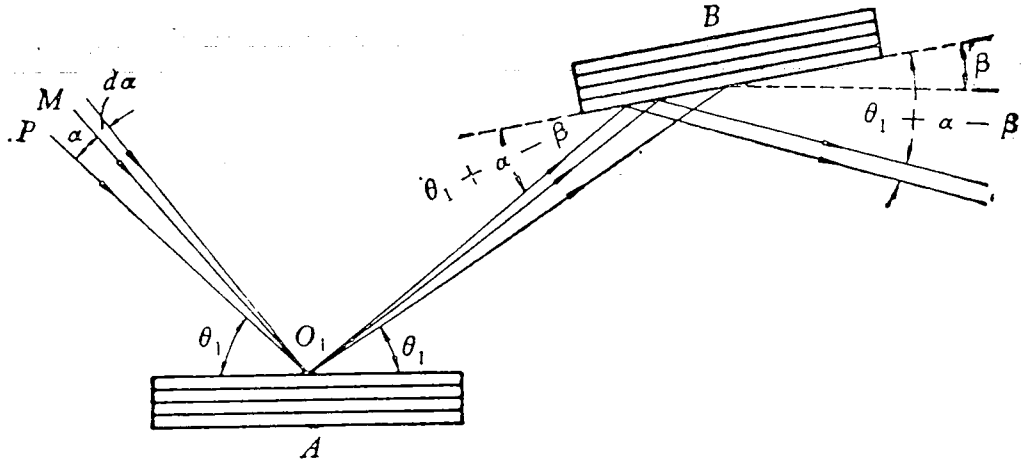


图 2.4 (n, -n) 排列的双晶衍射仪的反射几何

其垂直发散度, 并将第二晶体 B 沿逆时针方向转动取为正, 顺时针方向转动取为负。

设入射束的强度为 I_0 , 入射束中水平发散度在 α 与 $\alpha + d\alpha$ 之间部分的反射能力为 $I_0(\alpha) d\alpha$, 晶体 A 与 B 的反射率分别为 R_A 和 R_B , 则晶体 A 在入射角为 $(\theta_1 + \alpha)$ 到 $(\theta_1 + \alpha + d\alpha)$ 之间的反射能力为:

$$P_1(A) = I_0(\alpha) R_A(\alpha) d\alpha \quad (2.1)$$

晶体 B 转动 β 角后, 这一部分入射线束与 B 所成的角度在 $(\theta_1 + \alpha - \beta)$ 到 $(\theta_1 + \alpha - \beta + d\alpha)$ 之间, 因此在 B 位置时, 晶体 B 的总反射能力为:

$$P_B = \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} I_0(\alpha) R_A(\alpha) R_B(\alpha - \beta) d\alpha \quad (2.2)$$

由于 $I_0(\alpha)$ 随 α 的变化非常缓慢, 因此在 $R_A(\alpha)$ 有明显变化的 α 范围内可以认为 $I_0(\alpha)$ 是一个常数, 从而 (2.2) 式可写为:

$$P_B = I_0(\alpha) \int_{-\infty}^{\infty} R_A(\alpha) R_B(\alpha - \beta) d\alpha \quad (2.3)$$

同样,晶体 A 的反射能力为:

$$P_A = I_0(\alpha) \int_{-\infty}^{\infty} R_A(\alpha) d\alpha \quad (2.4)$$

由此得到在 B 位置时, (n, -n) 排列的双晶衍射仪的反射率为:

$$R(\beta) = \frac{P_B}{P_A} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} R_A(\alpha) R_B(\alpha - \beta) d\alpha}{\int_{-\infty}^{\infty} R_A(\alpha) d\alpha} \quad (2.5)$$

对于非偏振化的 X 射线, 上式应写为:

$$R(\beta) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} [R_A^{\sigma}(\alpha) R_B^{\sigma}(\alpha - \beta) + R_A^{\pi}(\alpha) R_B^{\pi}(\alpha - \beta)] d\alpha}{\int_{-\infty}^{\infty} [R_A^{\sigma}(\alpha) + R_A^{\pi}(\alpha)] d\alpha} \quad (2.6)$$

其中 σ 和 π 分别表示 X 射线的 σ 偏振和 π 偏振分量。

第三章 X 射线双晶衍射摇摆曲线的 动力学理论模拟

早在 1914 年, Darwin^[64] 就首次提出了形式简单的动力学衍射理论, 其后 Edwald^[65] 和 Laue^[66] 又分别从不同的角度对动力学理论进行了阐述和发展。到 50 年代后期, 由于高完美晶体的问世和 X 射线形貌技术的发展, 原有的平面波理论在对 X 射线衍射干涉现象的解释中遇到了新的困难, 从而导致 Kato^[67] 发展了球面波衍射理论。进入 60 年代, 由于解释晶体缺陷衍射现象的需要, 又使畸变晶体的动力学衍射理论得到了发展, 其结果是 Takagi^[49] 和 Taupin^[50] 提出了可处理有畸变的晶体和任意形状波面的入射光束衍射问题的理论——即著名的高木方程组。本文中, 我们只讨论其主要结果, 详细的动力学衍射理论可参考 James^[68], Authier^[69] 和 Pinsker^[70] 等人的专著。

§ 3.1 X 射线动力学衍射的普遍理论——高木方程组

当晶体具有畸变, 且入射 X 射线不是平面波的情形, 衍射波振幅 D_h 满足如下普遍的衍射方程^[49]

$$(\mathbf{s}_h \cdot \Delta) D_h = i2\pi K \beta_h D_h - i\pi K \sum_{h' \neq h} \chi_{h-h'} [D_{h'}]_h \quad (3.1)$$

其中:

$$\beta_h = \frac{k_h^2 - k^2}{2K^2} \quad (3.2)$$

$\mathbf{s}_h$ 为沿衍射波矢 $\mathbf{k}_h$ 方向的单位矢量, k 为真空中的波数, χ_h 为极化率的傅里叶系数, K 为晶体的平均波矢

$$k = K(1 + \chi_0)^{1/2} = nK \quad (3.3)$$

引入偏振因子 C

$$C = \begin{cases} 1 & \sigma \text{ 偏振} \\ \cos 2\theta_B & \pi \text{ 偏振} \end{cases} \quad (3.4)$$

并考虑双光束近似,即除了入射光束外,只有一个强的衍射光束,其波矢分别为 $\mathbf{k}_0$ 和 $\mathbf{k}_h$, 则 (3.1) 式可简化成如下的标量形式:

$$\begin{cases} \frac{\partial D_0}{\partial s_0} = -i\pi K C \chi_h D_h \\ \frac{\partial D_h}{\partial s_h} = -i\pi K C \chi_h D_0 + i2\pi K \beta_h D_h \end{cases} \quad (3.5)$$

此即通常所称的高木方程组。

选择不同的波矢,则可得到另一种与之等价的 Taupin 形式^[50,71]:

$$\begin{cases} \frac{i\lambda}{\pi} \frac{\partial D_0}{\partial s_0} = \chi_0 D_0 + C \chi_h D_h \\ \frac{i\lambda}{\pi} \frac{\partial D_h}{\partial s_h} = C \chi_h D_0 + (\chi_0 - \alpha_h) D_h \end{cases} \quad (3.6)$$

其中 $\alpha_h = 2\beta_h$

§ 3.2 多层膜结构的 X 射线反射率迭代解及双晶摇摆曲线的计算

半导体外延多层膜是在近完美晶体上生长的一种单晶薄膜材料,其结构如图 3.1 所示。它在水平方向上的几何尺度远大于在垂直方向上的几何尺度,因而可以认为在水平面内它是无限大的,从而 X 射线在其中的场变量只是深度 Z 的函数,方程 (3.6) 可简化成一维形式:

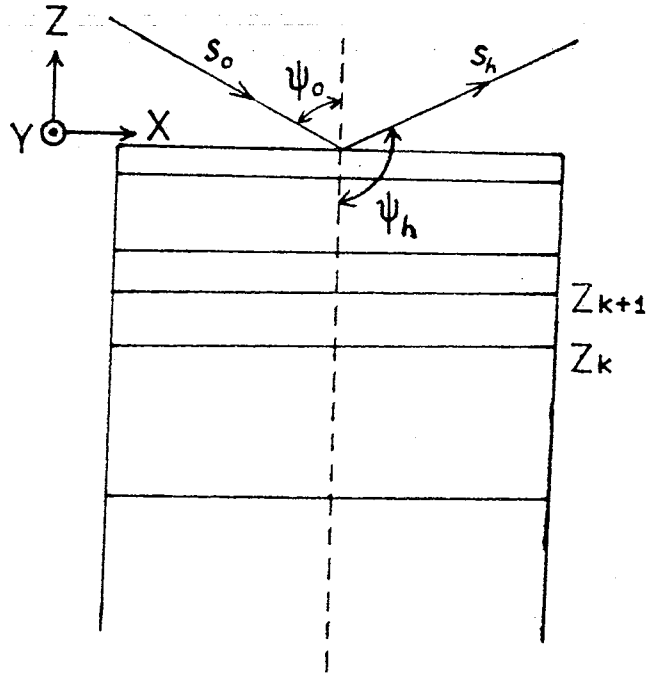


图 3.1 多层膜结构及反几何示意图

$$\begin{cases} \frac{i\lambda}{\pi} \gamma_0 \frac{dD_0}{dZ} = \chi_0 D_0 + C\chi_{\bar{h}} D_h \\ -\frac{i\lambda}{\pi} |\gamma_h| \frac{dD_h}{dZ} = C\chi_h D_0 + (\chi_0 - \alpha_h) D_h \end{cases} \quad (3.7)$$

这时, $\alpha_h = -2\Delta\theta \sin 2\theta_B$, θ_B 为衬底 Bragg 角。

定义反射振幅:

$$Q = \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} \frac{D_h}{D_0} \quad (3.8)$$

则由 (3.7) 式可得

$$\frac{dQ}{dZ} = \frac{i\pi}{\lambda} \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}} \left[\frac{C\chi_{\bar{h}}}{|\gamma_h|} Q^2 + \left(\frac{\chi_0}{\gamma_0} + \frac{\chi_0}{|\gamma_h|} - \frac{\alpha_h}{\gamma_0} \right) \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} Q + \frac{C\chi_h}{|\gamma_h|} \right] \quad (3.9)$$

令：

$$A = C\chi_h / |\gamma_h|$$

$$B = \frac{1}{2} \left(\frac{\chi_0}{\gamma_0} + \frac{\chi_0}{|\gamma_h|} - \frac{\alpha_h}{\gamma_0} \right) \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}}$$

$$D = \frac{\pi}{\lambda} \sqrt{\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}}$$

$$E = \frac{C\chi_h}{|\gamma_h|}$$

则 (3.9) 式可改写为：

$$\frac{dQ}{dZ} = iD(AQ^2 + 2BQ + E) \quad (3.10)$$

A、B、D、E 均为实验的几何条件以及材料本身的特性参数，是深度 Z 的函数。把外延层分成若干薄层，使每一薄层内成份均一，则在该层内上述特性参数均为常数，方程 (3.10) 变为常微分方程。在第 k 个薄层内，即区间 $Z_k \leq Z \leq Z_{k+1}$ 内，通过对 (3.10) 式积分，可求得该层上表面的反射振幅 Q_{k+1} 与下表面的反射振幅 Q_k 的关系：

$$Q_{k+1} = \frac{Q_k S + i(E + BQ_k) \operatorname{tg}(-DSt_k)}{S - i(B + AQ_k) \operatorname{tg}(-DSt_k)} \quad (3.11)$$

其中 $S = \sqrt{B^2 - EA}$ ， $t_k = Z_{k+1} - Z_k$ 为第 k 个外延层的厚度。由于反射振幅在界面上是连续的，因而可利用 (3.11) 式从衬底的反射振幅 Q_0 出发，逐层迭代，求得样品表面处的反射振幅。

考虑到晶体的吸收效应，A、B、E 和 S 均为复数，衬底材料可看作半无限厚的完美晶体，其反射率也可由 (3.11) 式求出。令衬底下表面处的反射振幅为 $Q=0$ ，代入 (3.11) 式，则可得衬底上表面处的反射振幅^[71]

$$Q_0 = \frac{B + S \cdot \text{Sign}[\text{Im}(s)]}{A} \quad (3.12)$$

由 (3.11) 式求得样品表面的反射振幅 Q_N 后, 由

$$R = |Q_N|^2 \quad (3.13)$$

可求得表面处的反射率。改变入射角, 则得到反射率随角度的变化关系, 即样品的反射率曲线 $R_2(\alpha)$ 。第一晶体的反射率曲线 $R_1(\alpha)$ 可由 (3.12) 和 (3.13) 式求得。将 $R_1(\alpha)$ 和 $R_2(\alpha)$ 代入 (2.5) 式求卷积, 即得到样品的双晶衍射摇摆曲线。

如果双晶衍射采用波长色散的排列, 则由 (2.5) 式求得的双晶摇摆曲线还必须与一个仪器函数 $G(\alpha)$ 卷积^[70]

$$G(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} S(\lambda - \lambda_0) R_1\left(\alpha - \frac{\lambda - \lambda_0}{\lambda_0} (\text{tg}\theta_1 - \text{tg}\theta_2)\right) d\lambda \quad (3.14)$$

其中 $S(\lambda - \lambda_0)$ 是特征 X 射线的谱形, $\theta_{1,2}$ 分别是第一和第二晶体在平均波长 λ 时的 Bragg 角。

§ 3.3 迭代公式中参数的计算。

方程 (3.11) 和 (3.12) 中的参数 A 、 B 、 D 、 E 和 α_h 是点阵参数, 成份、结构因子及衍射几何的函数, 所以在迭代计算前必须先求解这些参数。

1. 点阵参数

对异质外延结构, 由于外延膜与衬底之间以及不同的外延膜之间的点阵参数可能并不完全相等, 即存在一定的点阵失配。当它们生长在一起时, 如果每一层的厚度都小于产生失配位错的临界厚度, 那么这种失配通常由点阵受到压缩或扩张来调节。这种情况就是通常所说的共格生长, 外延膜点阵发生了四方畸变。如图 3.2 所示。发生四方畸变的点阵的参数就与体材料状态时有一定的差别。

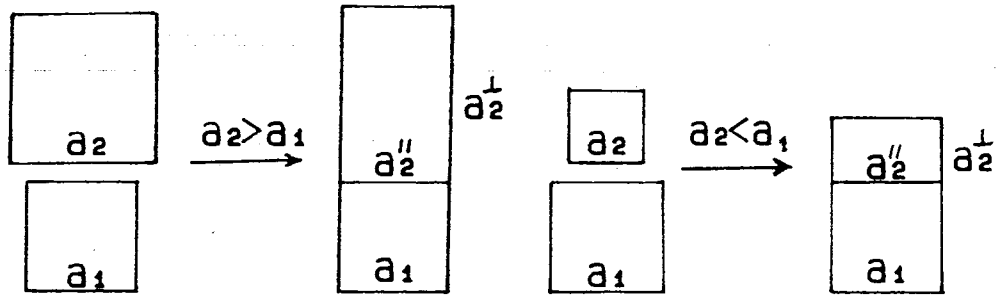


图 3.2 四方畸变示意图

对一元或二元单晶,其体材料的点阵参数可查有关的物理定数表得到^[72]。三元及四元材料的点阵参数则一般根据 Vegard 定律求得。如对三元化合物 $A_xB_{1-x}C$ 其点阵参数为:

$$a = xa_{AC} + (1-x)a_{BC}$$

对四元化合物 $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$, 其点阵参数则为:

$$a = xya_{AC} + x(1-y)a_{AD} + (1-x)ya_{BC} + (1-x)(1-y)a_{BD} \quad (3.16)$$

对于共格生长的外延层,其在生长面内的点阵参数与衬底材料的相同。这时水平方向的应力是均匀的,因而只有轴向应力而没有剪切应力。外延层的应变张量可表达为:

$$(e_{ij}) = \begin{pmatrix} e_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & e_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & e_{zz} \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

其中:

$$e_{xx} = e_{yy} = e^{\parallel} = \frac{a^{\parallel} - a_0}{a_0} \quad (3.18)$$

$$e_{zz} = e^{\perp} = \frac{a^{\perp} - a_0}{a_0} \quad (3.19)$$

a_0 为外延膜体材料的点阵参数； $a^{\parallel}$ 和 $a^{\perp}$ 分别是发生四方畸变后沿平行生长面方向和垂直生长面方向的点阵参数。

如果外延膜材料属立方晶系，在四方畸变下，其应变能可写成^[73]：

$$U = C_{11}[(e^{\parallel})^2 + \frac{1}{2}(e^{\perp})^2] + C_{12}[(e^{\parallel})^2 + 2e^{\parallel}e^{\perp}] \quad (3.20)$$

其中 C_{11} 和 C_{12} 均为弹性常数。应变能极小的条件为：

$$\frac{dU}{de^{\perp}} = C_{11}e^{\perp} + 2C_{12}e^{\parallel} = 0 \quad (3.21)$$

因此有：

$$e^{\perp} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}} e^{\parallel} \quad (3.22)$$

代入 (3.19) 式，则得：

$$a = a_0(1 + e^{\parallel}) = a_0 + \left(-\frac{2C_{12}}{C_{11}}\right)(a^{\parallel} - a_0) \quad (3.23)$$

定义外延层与衬底的点阵失配为：

$$f = \frac{a_0 - a_s}{a_s} \quad (3.24)$$

其中 a_s 为衬底材料的点阵参数。由共格生长，有

$$a^{\parallel} = a_s \quad (3.25)$$

代入 (3.24) 式则得：

$$a^{\perp} = a_s \left[1 + \left(1 + \frac{2C_{12}}{C_{11}}\right)f\right] \quad (3.26)$$

(3.25) 和 (3.26) 两式即为共格生长条件下外延层发生四方畸变后的点阵参数。如果失配外延层的厚度超过其产生失配位错的临界厚度，则这种失配也部分地由失配位错来调节。在完全应变弛豫的状态下，外延层完全按其体材料的点阵参数生长。应变弛豫情形下点阵参数的求

解将在下一节中另作专门讨论。

2. 几何参数

如果外延层发生四方畸变,则各晶面的面间距, Bragg 角, 不同晶面之间的夹角等都会因此而发生变化。指数为 (hkl) 的衍射面的 Bragg 角为:

$$\theta_B = \arcsin(\lambda/2d_{hkl})$$

其中:

$$d_{hkl} = \left[\frac{h^2 + k^2}{(a'')^2} + \frac{l^2 \varphi_s}{(a^+)^2} \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (3.28)$$

为畸变后 (hkl) 面的面间距, (hkl) 面与表面 (HKL) 之间的夹角为:

$$\varphi = \arccos \left[\frac{\frac{hH + kK}{(a'')^2} + \frac{lL}{(a^+)^2}}{\left[\frac{h^2 + k^2}{(a'')^2} + \frac{l^2}{(a^+)^2} \right] \left[\frac{H^2 + K^2}{(a'')^2} + \frac{L^2}{(a^+)^2} \right]} \right] \quad (3.29)$$

此外, (3.7) 式中 $\Delta\theta$ 是入射 X 射线与外延膜衍射面的夹角与该衍射面 Bragg 角的偏离。

$$\Delta\theta = \Delta\theta_0 + (\theta_{BS} - \theta_{BL}) + (\varphi_s - \varphi_L) \quad (3.30)$$

其中 $\Delta\theta_0$ 为入射 X 射线与衬底衍射面的夹角与衬底严格 Bragg 角的偏离; θ_{BS} 和 θ_{BL} 分别为衬底及外延膜的 Bragg 角。 φ_s 和 φ_L 分别为衬底和外延层衍射面与表面的夹角, “+”号和“-”号分别对应掠入射及掠出射的情况。

在非对称衍射几何下, 入射 X 射线与衍射 X 射线相对衬底内法向的方向余弦 γ_0 和 γ_h 表达为:

$$\gamma_0 = \sin(\theta_{BS} \mp \varphi_s) \quad (3.31)$$

$$\gamma_h = -\sin(\theta_{BS} \pm \varphi_s) \quad (3.32)$$

这里“±”号的选取同式 (3.30) 相同。

3. 结构因子

X 射线在晶体中传播时,极化率 χ_h 与结构因子 F_h 有如下关系:

$$\chi_h = \frac{e^2 \lambda^2}{4\pi^2 m V} F_h = - \frac{r_e \lambda^2}{\pi V} F_h \quad (3.33)$$

h 为衍射面的倒易点阵矢量, V 为原胞体积, r_e 为经典电子半径。

(hkl) 衍射的原子结构因子由下式给出:

$$F_{hkl} = \sum_j^n f_j \exp \{ i 2\pi (hx_j + ky_j + lz_j) \} \quad (3.34)$$

其中 n 为单胞内原子个数, (x_j, y_j, z_j) 为单胞内第 j 个原子的坐标。原子散射因子 f_j 是 $\frac{\sin \theta}{\lambda}$ 的函数, 假定入射 X 射线的频率比原子的共振频率大的多, 则原子中的外层电子可近似地认为是经典的自由电子。这时, 原子散射因子 f 是实数, 记为 f_0 。为便于计算, 引入纯数字意义的分析近似^[74]:

$$f_0 \left(\frac{\sin \theta}{\lambda} \right) = \sum_{i=1}^4 a_i \exp \left(-b_i \frac{\sin^2 \theta}{\lambda} \right) + c \quad (3.35)$$

其中 a_i , b_i 和 c 均为拟合参数。

实际上原子内的电子是处于束缚态的, 对 X 射线的散射能力与自由电子的散射能力略有差异。因此考虑到原子的色散效应, 原子的平均散射因子 f 中还需引入色散修正项 $\Delta f'$ 和 $\Delta f''$:

$$f = f_0 + \Delta f' + i \Delta f'' \quad (3.36)$$

其中, $\Delta f''$ 对应吸收项。 $\Delta f'$ 和 $\Delta f''$ 也都是 $\frac{\sin \theta}{\lambda}$ 的函数, 但由于它们主要来自内层电子的影响, 因此对角度 θ 的关系非常小, 对一定波长的 X 射线, 可视为常数。这样结构因子就可由 (3.34) 式得到。

对于多元化合物的结构因子, 仍可由 Vegard 定律求得。例如, 对三元化合物 $A_x B_{1-x} C$, 其结构因子可表达为:

$$F_{ABC} = x F_A + (1-x) F_B + F_C \quad (3.37)$$

至此,我们已完成了摇摆曲线理论模拟的全部准备工作。图 3.3 给出了模拟实验曲线的流程图。

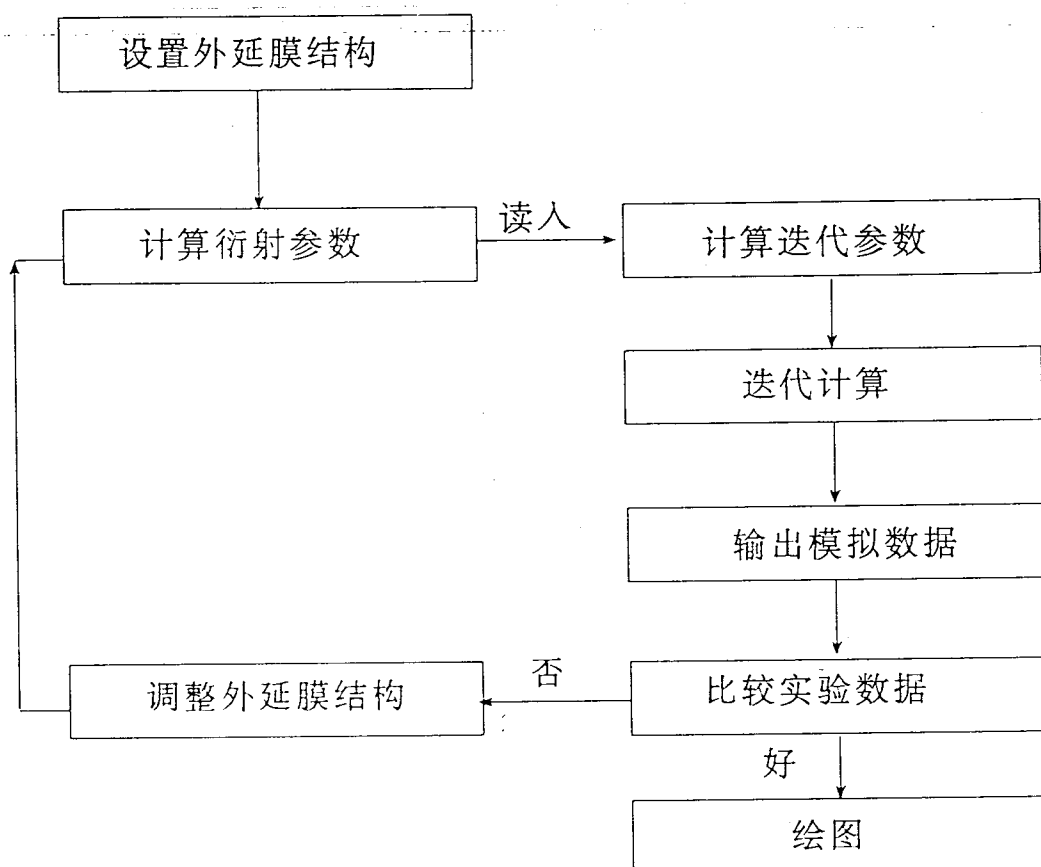


图 3.3 X 射线双晶衍射摇摆曲线理论模拟流程图

第四章 应变层超晶格应变弛豫的研究

§ 4.1 引言

在对半导体异质外延结构的研究中,点阵失配系统最近受到了越来越多的重视。这不仅是为了寻求和扩大可选用的半导体材料的范围,或者为了使用廉价的衬底材料,也是为了探索和应用应变层系统新奇的光电性能。此外,内在应变对材料的能带结构也起着很大作用,因而可以被用来裁剪材料的光电性能。但是,为了获得高质量的外延膜,防止失配位错的形成,外延膜的厚度必须限制在其产生应变弛豫的临界厚度之下。到目前为止,已发展了好几种理论来计算临界厚度的大小,如Matthews和Blakeslee^[75, 76]的平衡模型,People和Bean^[77]的非平衡模型以及Dodson-Tsao的塑性流体模型^[78]等。其中,Matthews和Blakeslee的理论被证明与实验结果符合的最好^[79, 80]。根据这一理论,临界厚度 h_c 满足:

$$h_c = \frac{b}{2\pi f} \frac{(1-\nu)\cos^2\beta}{(1+\nu)\cos\psi} \left(\ln \frac{h_c}{b} + 1\right) \quad (4.1)$$

其中 ν 为泊松比, β 为位错线与 Burgers 矢量之间的夹角, ψ 是滑移方向与外延膜平面内垂直于滑移面与界面截线方向之间的夹角; b 是 Burgers 矢量的大小; f 是无应变时外延膜与衬底之间的点阵失配。例如对生长于 GaAs(001) 衬底之上的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 应变层,其临界厚度 h_c 与 In 含量 x 的关系如图 4.1 所示^[81]。

另一方面,多种实验技术,如 X 射线衍射 (XRD),透射电子显微镜 (TEM) 及喇曼散射等已被广泛用来研究应变层外延结构以及了解应变弛豫及失配位错的形成与扩展的机制。X 射线双晶衍射技术就是其中一种非常有效的手段。这种技术通过测量外延膜点阵的应变或者说点阵参数 a 的变化来得到应变弛豫的信息,其分辨率可达 $\Delta a/a \sim 10^{-4}$,因而有很高的灵敏度。此外,X 射线双晶形貌可用来观察失配位错的分

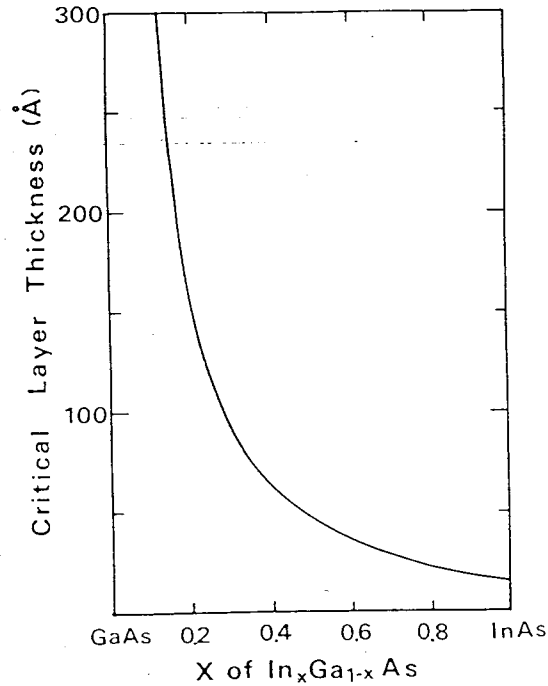


图 4.1 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 应变外延膜的临界厚度 h_c 与 In 含量 x 的关系。GaAs(001) 衬底

布情况,以及确定位错的种类和 Burgers 矢量。对应变层超晶格,情况比单层膜更为复杂。这不仅是因为失配位错的存在会引起衍射卫星峰的展宽甚至消失,使得峰位不易准确确定,确定那个峰为零级峰也是一件困难的事情,而能否准确确定零级峰将直接影响对实验结果的分析。解决这些困难的最好办法是对实验摇摆曲线进行计算机模拟。下面我们将在上一章的基础上,讨论有应变弛豫存在时,超晶格的 X 射线衍射摇摆曲线的模拟计算问题。

§4.2 应变弛豫超晶格的 X 射线双晶衍射摇摆曲线的计算

在上一章中,我们讨论了双晶衍射摇摆曲线的动力学模拟问题,但假设了应变外延层是完全共格生长的完美单晶。如果发生应变弛豫,那么外延膜与衬底之间将出现非共格生长,外延膜中的应变分布也

将发生变化。因而对第三章中的方法还需作一些修正,并要考虑下面几个问题:

(1)对应变层超晶格,存在不只一种弛豫机制。在不同的弛豫机制中,应变的分布也不相同。

(2)在发生大的应变弛豫后,在超晶格层与衬底之间常常会产生一个倾角^[82, 83],即取向差,这将导致衍射卫星峰偏离其正常位置。

(3)由于应变弛豫,会在界面上产生失配位错,从而使得衍射卫星峰展宽。

§ 4.2.1 弛豫机制与应变分布

对应变层超晶格,通常认为存在两种可能的应变弛豫机制^[84],如图 4.2 所示:

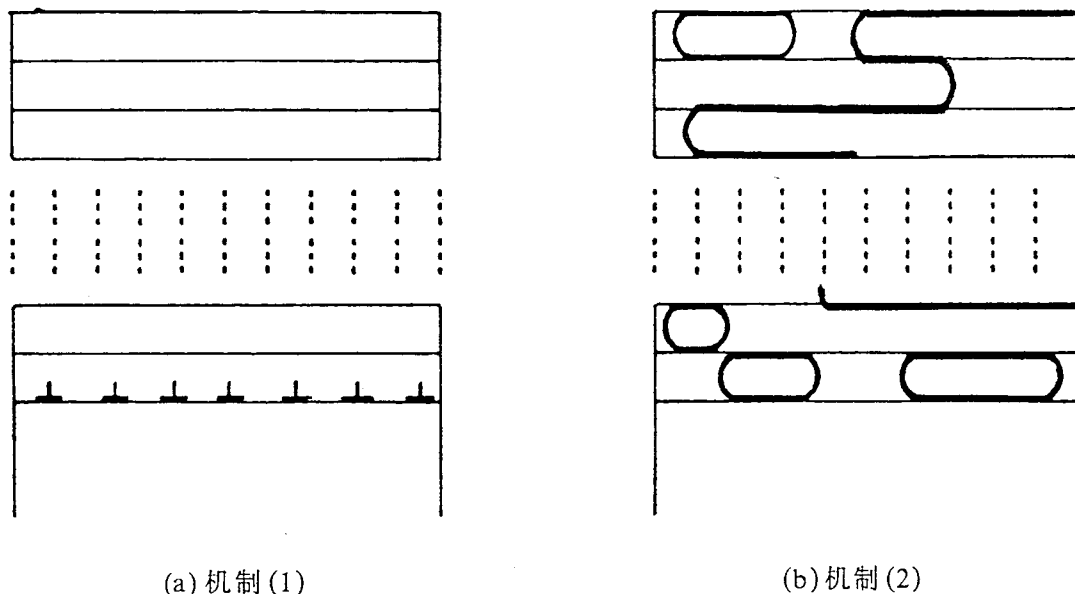


图 4.2 应变层超晶格的两种可能的应变弛豫机制

(1)失配位错只产生在超晶格层与衬底的界面上,超晶格层作为一个整体趋于以无衬底存在时的自由点阵参数而存在。

(2)失配应变的弛豫贯穿整个超晶格层,在每一界面上都有位错形成,各组元层趋于以自己本身的固有参数存在。

如果在机制(2)下,应变达到完全弛豫,则在超晶格中不再有残余应变存在;而在机制(1)中,即使应变完全弛豫,在两个组元层之间仍有部分应变能存在。

组元层 $i(i=1,2)$ 与衬底之间在无应变时的点阵失配可定义为:

$$f_i = \frac{a_i - a_s}{a_s} \quad (4.2)$$

其中, a_i 为组元层 i 的点阵参数, a_s 为衬底材料的点阵参数。在两种机制下,各组元层沿平行及垂直于超晶格生长面方向上的 X 射线应变(即 X 射线测得的应变层与衬底之间的有效失配) $\varepsilon^{\parallel}$ 和 $\varepsilon^{\perp}$ 都可表达为:

$$\varepsilon_i^{\parallel} = \frac{a_i^{\parallel} - a_s}{a_s} \quad (4.3)$$

$$\varepsilon_i^{\perp} = \frac{a_i^{\perp} - a_s}{a_s} \quad (4.4)$$

各组元层的真实应变则为:

$$e_i^{\parallel} = \frac{a_i^{\parallel} - a_i}{a_i} \quad (4.5)$$

$$e_i^{\perp} = \frac{a_i^{\perp} - a_i}{a_i} \quad (4.6)$$

由式(3.22),则得到:

$$\frac{a_i^{\perp} - a_i}{a_i} = \left(-\frac{2C_{12}^i}{C_{11}^i} \right) \frac{a_i^{\parallel} - a_i}{a_i} \quad (4.7)$$

其中 C_{11} 和 C_{12} 代表组元层 i 的弹性常数。由(4.7)式及(4.3)式,我们得到:

$$\begin{aligned}
a_i^+ &= a_i + \left(-\frac{2C_{12}^i}{C_{11}^i}\right)(a_i^{\parallel} - a_s) \\
&= \left(1 + \frac{2C_{12}^i}{C_{11}^i}\right)a_i - \frac{2C_{12}^i}{C_{11}^i}(1 + \varepsilon_i^{\parallel}) \\
&= \left[1 + f_i + (f_i - \varepsilon_i^{\parallel})\frac{2C_{12}^i}{C_{11}^i}\right]a_s
\end{aligned} \tag{4.8}$$

$$\varepsilon_i^+ = f_i + (f_i - \varepsilon_i^{\parallel})\frac{2C_{12}^i}{C_{11}^i} \tag{4.9}$$

由(4.3)式, 还可方便地得到:

$$a_i^{\parallel} = (1 + \varepsilon_i^{\parallel})a_s \tag{4.10}$$

(4.9)、(4.10)两式即是应变弛豫状态下超晶格各组元层的点阵参数的表达式, 可用它们代替(3.25)和(3.26)式以计算应变弛豫状态下超晶格的衍射摇摆曲线。

(4.9)和(4.10)式中除了材料本射的特征参数外, 还有一个变量 $\varepsilon_i^{\parallel}$, $\varepsilon_i^{\parallel}$ 的大小反映了应变弛豫的大小。如果 $\varepsilon_i^{\parallel} = 0$, 则表明组元层*i*没有发生应变弛豫, 而如果 $\varepsilon_i^{\parallel} = f_i$, 则表示组元层*i*处于完全应变弛豫状态。在应变弛豫机制(1)的情形下, 显然有 $\varepsilon_1^{\parallel} = \varepsilon_2^{\parallel}$; 而在机制(2), 则一定有 $\varepsilon_1^{\parallel} \neq \varepsilon_2^{\parallel}$ 。

在机制(1)的情形, 由于超晶格层是作为一个整体在与衬底的界面上发生应变弛豫, 故有 $\varepsilon_1^{\parallel} = \varepsilon_2^{\parallel} = \varepsilon^{\parallel}$ 。定义其平均弛豫比*R*为:

$$R = \frac{a^{\parallel} - a_s}{\langle a \rangle - a_s} = \frac{\varepsilon^{\parallel}}{\langle f \rangle} \tag{4.11}$$

其中:

$$\langle a \rangle = \frac{t_1 a_1 + t_2 a_2}{t_1 + t_2} \tag{4.12}$$

$$\langle f \rangle = \frac{t_1 f_1 + t_2 f_2}{t_1 + t_2} \tag{4.13}$$

分别是没有应变时超晶格材料的平均点阵参数和平均点阵失配。将(4.11)式中的 $\varepsilon^{\parallel}$ 代入(4.9)和(4.10)式中,则得到:

$$a_i^{\parallel} = (1 + R \langle f \rangle) a_s \quad (4.14)$$

$$a_i^{\perp} = [1 + f_i + (f_i - R \langle f \rangle) \frac{2C_{12}^i}{C_{11}^i}] a_s \quad (4.15)$$

在机制(2)情形下,由于 $\varepsilon_1^{\parallel} \neq \varepsilon_2^{\parallel}$, 情形略为复杂。考虑在实际中一种最常见的情况,即组元1与衬底材料相同,且完全应变弛豫,而组元2则部分应变,其弛豫比 R 定义为:

$$R = \frac{a_2^{\parallel} - a_s}{a_2 - a_s} = \frac{\varepsilon_2^{\parallel}}{f_2} \quad (4.16)$$

于是由(4.9)和(4.10),有:

$$a_1^{\parallel} = a_1^{\perp} = a_s \quad (4.17)$$

$$a_2^{\parallel} = (1 + R f_2) a_s \quad (4.18)$$

$$a_2^{\perp} = [1 + f_2 + (1 - R) f_2 \frac{2C_{12}^2}{C_{11}^2}] a_s \quad (4.19)$$

§ 4.2.2 取向差与峰形展宽

1. 取向差

一个应变外延层,在发生大的应变弛豫后,外延层与衬底之间常常令出现一个倾角^[82, 83, 85, 86],或称取向差角。在双晶摇摆曲线中,由于这一倾角的存在,会引起超晶格衍射峰与衬底峰之间的相对位置发生变化,进而影响对实验结果的分析。因而在对应变弛豫超晶格的摇摆曲线进行模拟时,必须考虑取向差角的影响。

对外延膜点阵与衬底点阵之间的倾角及其取向的测量,可通过转动样品至不同的取向令 X 光入射,然后测量外延膜峰与衬底峰之间的距离的办法获得。在每一次衍射中,这一测量距离都由三部分组成:

(1) 由于外延膜与衬底点阵面间距 d 的差异引起的 Bragg 角的差异 $\Delta\theta_B$ 。

(2) 由于四方畸变引起的外延膜与衬底的衍射面 (hkl) 之间的夹角 $\Delta\varphi$ 。

(3) 外延膜与衬底之间的取向差角 Ω 。

令外延膜峰与衬底峰之间的测量距离为 $\Delta\theta$, 则

$$\Delta\theta = \Delta\theta_B + \Delta\varphi \pm \Omega \quad (4.20)$$

$$\Delta\theta_B = -\text{tg}\theta_B(\varepsilon^\perp \cos^2\varphi + \varepsilon^\parallel \sin^2\varphi) \quad (4.21)$$

$$\Delta\varphi = \pm \sin\varphi \cos\varphi(\varepsilon^\perp - \varepsilon^\parallel) \quad (4.22)$$

其中 (4.20) 式中的 $\pm$ 号取决于入射 X 射线与取向差角 Ω 之间的相对取向, 而 (4.22) 式中的 $\pm$ 号取决于入射 X 射线与衍射面 (hkl) 之间的相对取向。在掠入射情形, 取 $+$ 号, 在掠出射情形, 取 $-$ 号。 θ_B 是衬底 Bragg 角, φ 是 (hkl) 面与表面的夹角。

Ω 通常由一组对称衍射测得, 此时, 在 (4.20) 式中有 $\Delta\varphi = 0$ 。首先在样品的某一取向测一条摇摆曲线, 记录其外延膜峰与衬底峰的角距离 $\Delta\theta_1$; 然后转动样品 180° , 即让 X 射线沿与刚才相反的方向入射, 再测得一个 $\Delta\theta_2$, 那么外延膜与衬底沿这一方向的取向差 Ω 为:

$$\Omega = \frac{|\Delta\theta_1 - \Delta\theta_2|}{2} \quad (4.23)$$

沿不同的样品取向测 X 射线摇摆曲线, 就可测得一组外延膜与衬底沿不同方向上的取向差 Ω , 从而可确定总的取向差角的大小和方向。一般对同一衍射, 我们至少测量 4 条摇摆曲线, 即沿取向 $\omega = 0^\circ, 90^\circ, 180^\circ$ 和 270° 。各测一条曲线。对 (001) 取向的外延膜系统, 定义 ω 顺时针方向转动, 在 $\omega = 0^\circ$ 时, 入射与衍射 X 射线在样品表面的投影都沿 $[110]$ 方向。

考虑到取向差角 Ω 后, 第三章中的一些几何参数也需作相应的修正。(3.30) 式中的 $\Delta\theta$ 应由 $\Delta\theta'$ 来代替:

$$\Delta\theta' = \Delta\theta + \Omega \quad (4.24)$$

方向余弦的表达式(3.31)和(3.32)也相应变为:

$$\gamma_0 = \sin(\theta \mp \varphi \pm \Omega) \quad (4.25)$$

$$\gamma_h = -\sin(\theta \pm \varphi \mp \Omega) \quad (4.26)$$

上面各式中 φ 与 Ω 前 + 号的选取与 (4.20) ~ (4.22) 式中相同。

2. 衍射峰形的展宽

如果外延膜与衬底之间的点阵失配是部分地由失配位错来调节的话,那么在摇摆曲线中,由于位错的存在,将导致衍射峰展宽,甚至完全消失。这就对准确确定峰位和衍射峰的强度分布等造成一定的困难。为了使理论模拟曲线能与实验曲线作完全对应的比较,在理论模拟摇摆曲线时,必须考虑峰形的展宽。缺陷(如位错)对摇摆曲线峰形的影响目前还很难作出清晰的数学描述,因而难以直接通过描述衍射的物理过程来考虑峰形的展宽效应。许多工作都表明,纯数学意义的展宽用于模拟实验曲线也是一种极为有效的办法^[84, 87]。这可以通过对模拟摇摆曲线卷积一个标准高斯函数来实现,所用高斯函数的半高宽 $\Delta\theta_g$ 即为衍射峰的展宽。

$$f(\alpha) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma} e^{-\frac{\alpha^2}{2\sigma^2}} \quad (4.27)$$

$$\Delta\theta_g = 2\sqrt{2\ln 2} \sigma \quad (4.28)$$

由于 $\int_{-\infty}^{\infty} f(\alpha) d\alpha = 1$, 因而这一处理并不影响衍射峰的积分强度。这样摇摆曲线 $R(\beta)$ 见(2.6)式)应由下式来代替:

$$R(\beta) = \int_{-\infty}^{\infty} R(\beta + \alpha) f(\alpha) d\alpha \quad (4.29)$$

§4.3 计算结果和讨论

考虑一个 15 周期的应变层超晶格,衬底为 GaAs(001), 结构参数如下:

$$150\text{\AA} \text{ In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/200\text{\AA} \text{ GaAs}$$

我们可以计算它在不同的弛豫机制和不同弛豫比下的摇摆曲线,来研究弛豫机制和弛豫比对摇摆曲线的影响。为了简单和便于比较,也因为取向差角和峰形展宽的确定需要依赖实验结果,这里我们可以不考虑这两个因素,但这并不影响我们对峰间距和峰强分布的观察。此外,由于对称衍射对应变弛豫不敏感,因而我们采用非对称的(224)衍射。

图 4.3 是在没有应变弛豫时的摇摆曲线。图 4.4 则给出了在弛豫机制(1)下,不同弛豫比时的摇摆曲线。可以看到弛豫比 R 并不影响卫星峰的间距。这是因为卫星峰的间距为:

$$\Delta\theta_p = \frac{\lambda |\gamma_h|}{t_p \sin 2\theta_B} \quad (4.30)$$

对于一个确定条件的衍射, $\Delta\theta_p$ 取决于周期 t_p , 而应变的弛豫对 t_p 的影响微乎其微, 因而对 $\Delta\theta_p$ 的影响也很微弱。但卫星峰相对衬底峰的位置却随 R 的增加逐渐变化。图 4.5 示出了弛豫比 R 与零级峰与衬底峰间距 $\Delta\theta_0$ 的模拟结果, 可以看到, 随 R 的增加, $\Delta\theta_0$ 呈线性下降。

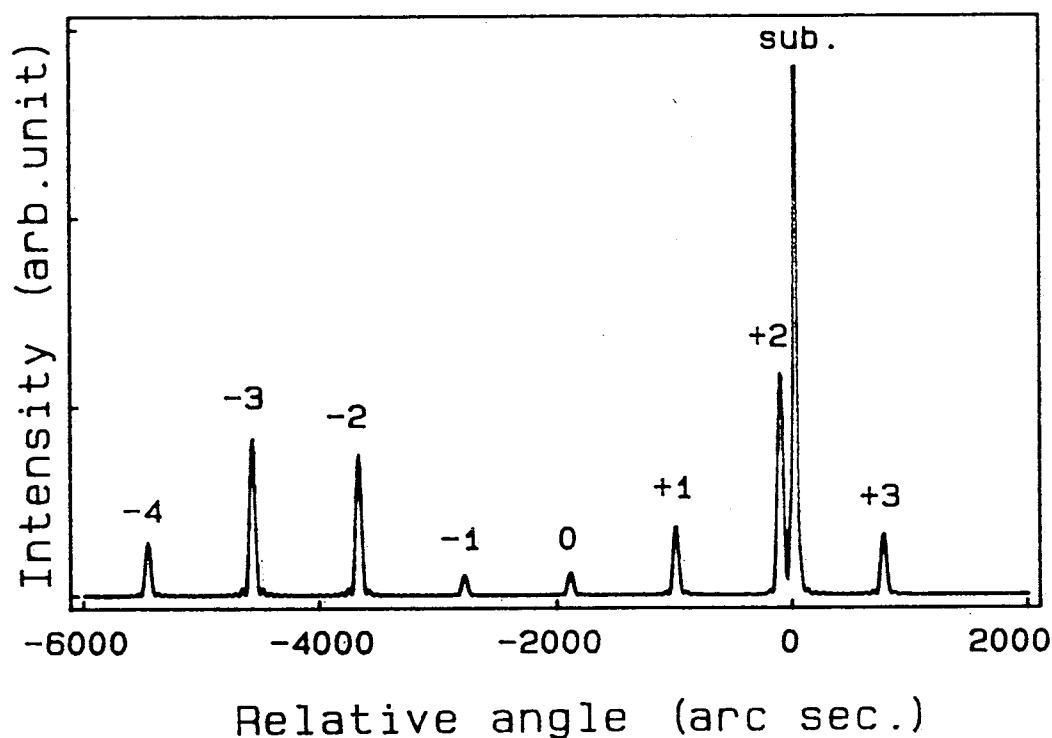


图 4.3 无应变弛豫时的双晶摇摆曲线

在运学理论中, $\Delta\theta_0$ 可表达为^[50]

$$-\Delta\theta_0 = k_1 \langle \varepsilon^\perp \rangle + k_2 \langle \varepsilon^\parallel \rangle \quad (4.31)$$

$$k_1 = \cos^2\varphi \operatorname{tg}\theta_B \pm \sin\varphi \cos\varphi \quad (4.32)$$

$$k_2 = \sin^2\varphi \operatorname{tg}\theta_B \mp \sin\varphi \cos\varphi \quad (4.33)$$

其中 $\langle \varepsilon^\perp \rangle$ 和 $\langle \varepsilon^\parallel \rangle$ 分别为沿垂直生长面及平行生长面方向上的平均 X 射线应变, 其余各符号的意义及正负号的选取均同 (4.21)、(4.22) 式中相同。下面我们考虑掠入射的情形, 故 (4.32) 式中取 + 号, (4.33) 式中取 - 号。

在机制 (1) 时, 由 (4.9) 及 (4.10) 式, 有:

$$\langle \varepsilon^\parallel \rangle = \varepsilon^\parallel = R \langle f \rangle \quad (4.34)$$

$$\langle \varepsilon^\perp \rangle = \frac{t_1 \varepsilon_1^\perp + t_2 \varepsilon_2^\perp}{t_1 + t_2} = \langle (1 + \frac{2C_{12}^i}{C_{11}^i}) f_i \rangle - \langle \frac{2C_{12}^i}{C_{11}^i} \rangle R \langle f \rangle \quad (4.35)$$

其中,

$$\langle (1 + \frac{2C_{12}^i}{C_{11}^i}) f_i \rangle \text{ 及 } \langle \frac{2C_{12}^i}{C_{11}^i} \rangle \text{ 分别为对 } (1 + \frac{2C_{12}^i}{C_{11}^i}) f_i \text{ 及 } \frac{2C_{12}^i}{C_{11}^i}$$

求平均。令:

$$\langle (1 + \frac{2C_{12}^i}{C_{11}^i}) f_j \rangle = u \quad (4.36)$$

$$\langle \frac{2C_{12}^i}{C_{11}^i} \rangle = v \quad (4.37)$$

则 (4.31) 变为:

$$\Delta\theta_0 = k_1 u + (k_2 - k_1 v) \langle f \rangle R \quad (4.38)$$

可以清楚地看到 $\Delta\theta_0$ 与 R 成线性关系。图 4.5 中的实线就是用上式的计算结果。显然, 用 (4.38) 式计算得到的 $\Delta\theta_0$ 略大于动力学模拟结果, R 越大, 两者也越趋接近。这一差别可能是来源于 (4.34) 和 (4.35) 式中对 $\langle \varepsilon^\parallel \rangle$ 和 $\langle \varepsilon^\perp \rangle$ 简单的数学平均计算所致。对单层膜结构, 则不会出现类似现象。如图 4.6 给出了一个与上述超晶格具有相同平均失配的 InGaAs 单层膜的弛豫比与峰位的关系, 动力学模拟结果与 (4.38) 式的计算结果完全一致。从图 4.4, 我们还发现, 弛豫机制 (1)

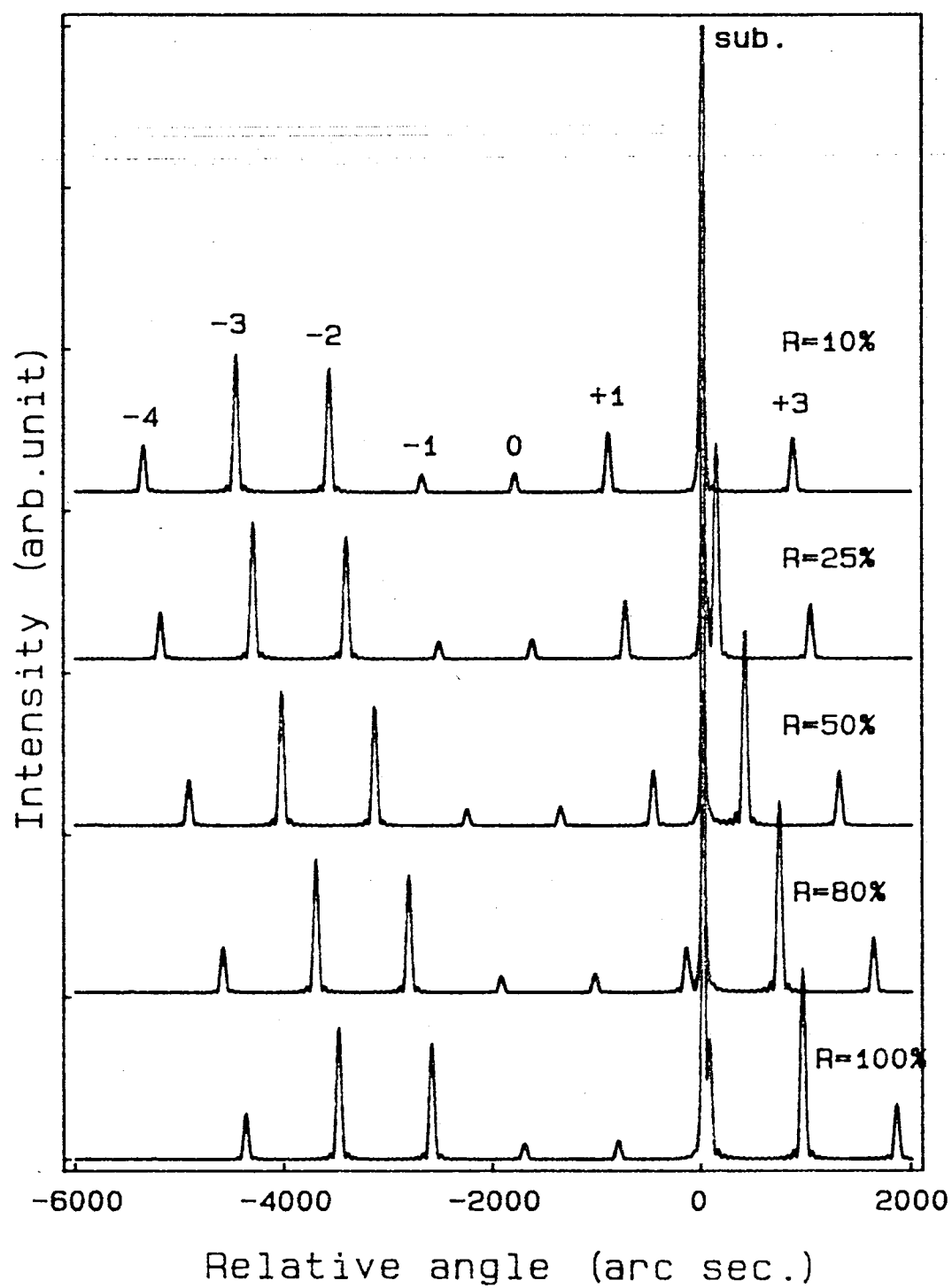


图 4.4 弛豫机制(1)时, 不同弛豫比 R 时的摇摆曲线。(224)衍射

时,各级卫星峰的强度随弛豫比 R 的变化并不发生变化(除了当某卫星峰非常靠近衬底峰时,由于衬底峰的影响,卫星峰的强度略有变化以外),这是这种机制的一个重要特征。下面我们将看到,这也是它与机制(2)区别加的一个主要判据。

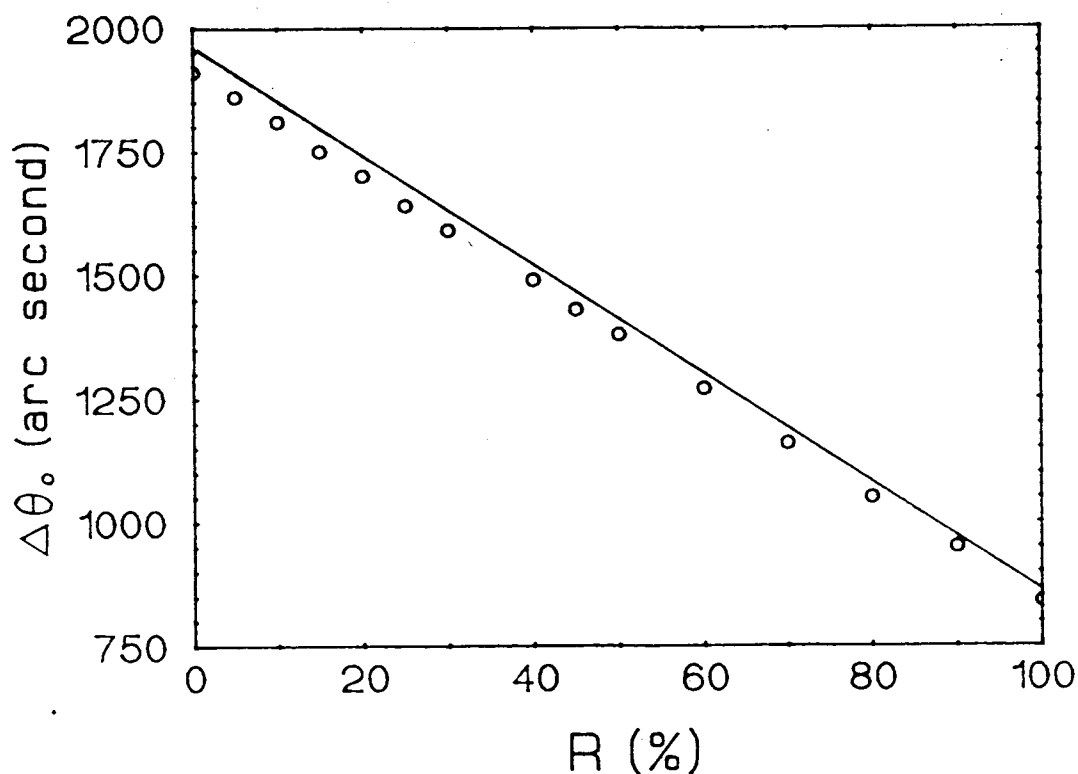


图 4.5 两种弛豫机制下,弛豫比 R 与零级峰与衬底峰间距 $\Delta\theta_0$ 关系,两条曲线完全重合。 $\circ$ 为动力学理论模拟结果;— 为(4.38)式的计算结果

图 4.7 是机制(2)时,不同弛豫比 R 时的模拟摇摆曲线。我们发现,与机制(1)时的情形不同,不但卫星峰相对衬底峰的峰位随 R 发生变化,卫星峰的强度分布也随 R 的变化而变化。图 4.5 给出了零级峰峰位与弛豫比 R 的关系。值得注意的是在相同的弛豫比 R 是,零级峰峰位的模拟结果与在机制(1)时完全相同,模拟的 $\Delta\theta_0$ 也略小于(4.38)式的计算结果。产生这一现象的原因是因为在机制(2)时也有如下关系成立:

$$\langle \varepsilon^{\parallel} \rangle = \frac{t_1 \varepsilon_1^{\parallel} + t_2 \varepsilon_2^{\parallel}}{t_1 + t_2} = \frac{t_2 \varepsilon_2^{\parallel}}{t_1 + t_2} = \frac{t_2 f_2}{t_1 + t_2} R = R \langle f \rangle$$

$$\langle \varepsilon^{\perp} \rangle = \frac{t_1 \varepsilon_1^{\perp} + t_2 \varepsilon_2^{\perp}}{t_1 + t_2} = \left\langle \left(1 + \frac{C_{12}^i}{C_{11}^i} \right) f_i - \frac{2C_{12}^i}{C_{11}^i} \right\rangle R \langle f \rangle$$

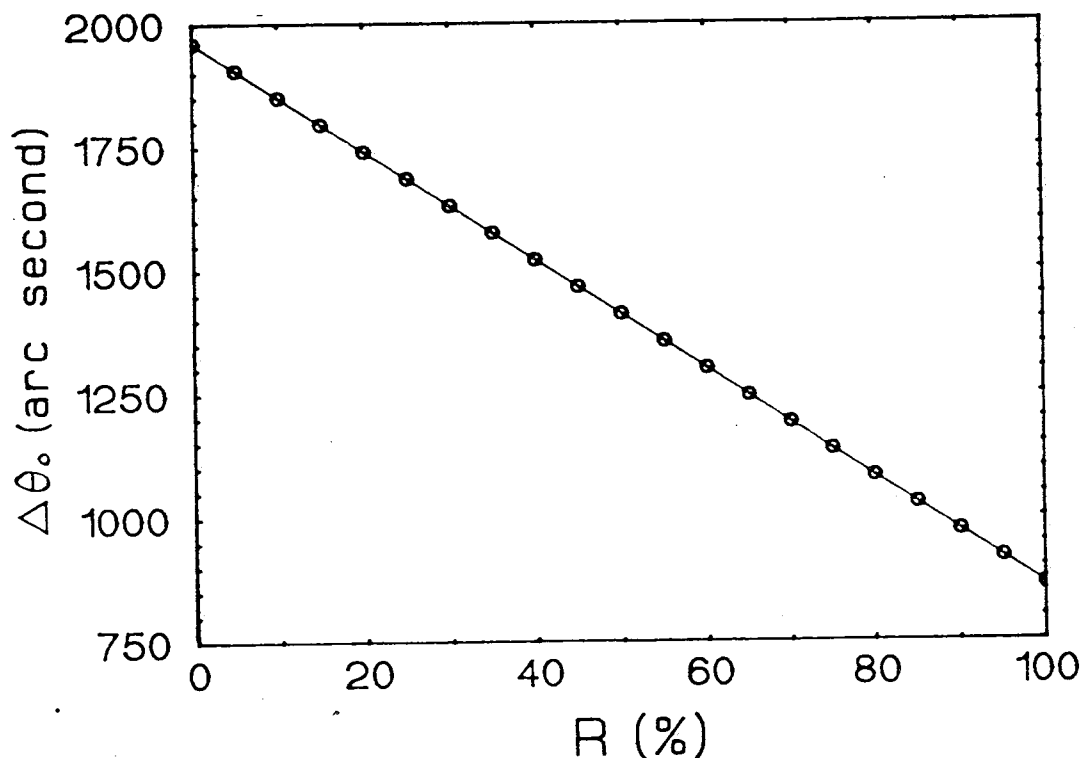


图 4.6 单层 $\text{In}_{0.086}\text{Ga}_{0.914}\text{As}$ 薄膜弛豫比 R 与其衍射峰与衬底峰间距的关系

其中 $i=1$ 代表 GaAs 层, $i=2$ 例表 InGaAs 层。上两式与 (4.34)、(4.35) 式完全相同, 故而由 (4.31) 式确定的 $\Delta\theta_0$ 。也相同。

图 4.8 ~ 图 4.11 分别给出了机制 (2) 时, R 与 0, $\pm 1, \pm 2$ 及 ± 3 级卫星峰强度的关系。我们看到, 较高级的卫星峰 ($\pm 2, \pm 3$ 级) 的强度随应变弛豫的增加逐渐减弱甚至完全消失, 而较低级的 ± 1 级峰和零级峰则呈上升趋势。这表明, 超晶格内部的应变对衍射卫星峰起着十分重要的作用。这一现象在实验中也多次观察到, 如对 AlAs/GaAs 点阵近

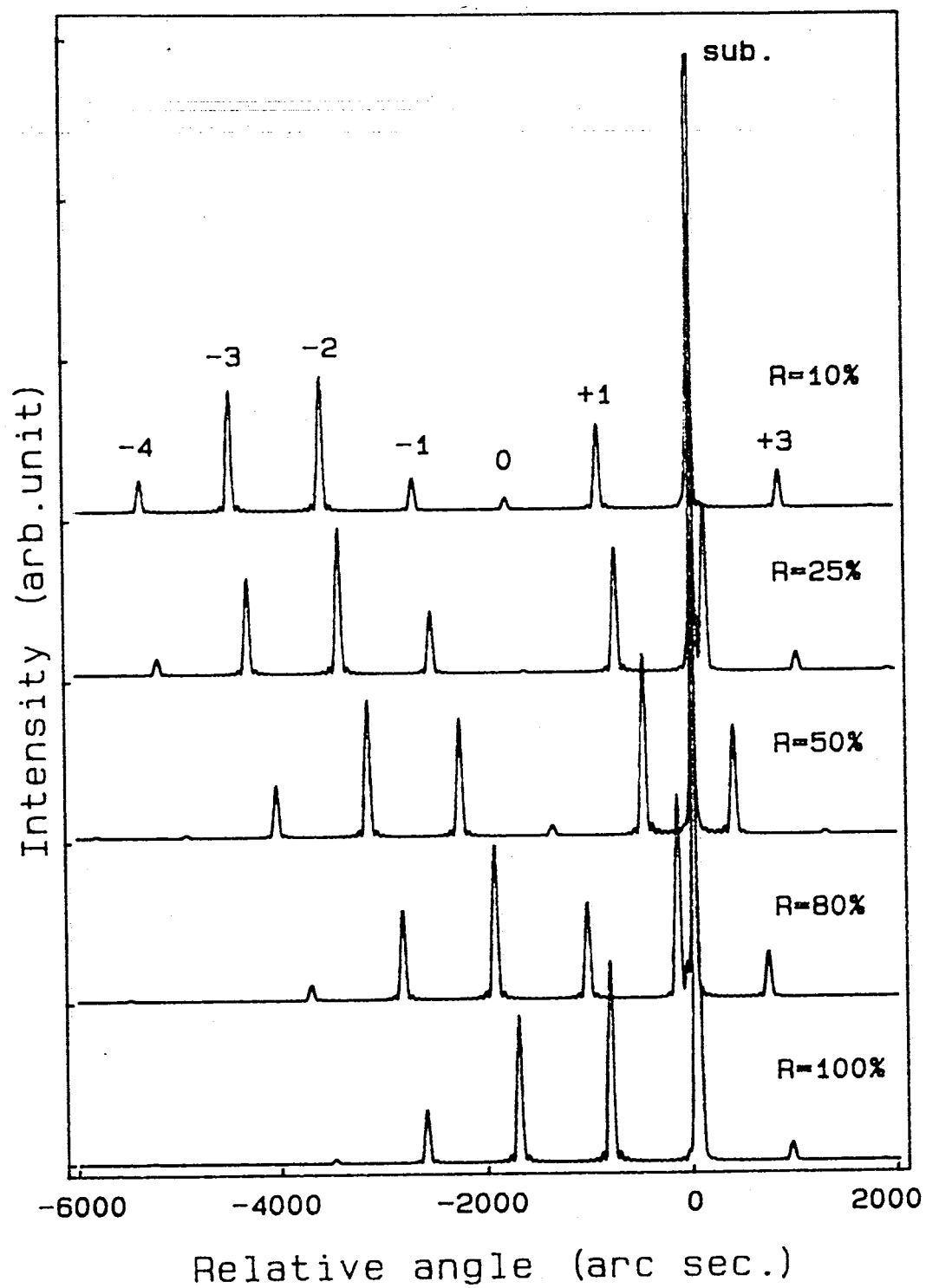


图 4.7 机制 (2) 时, 不同弛豫比 R 时的模拟摇摆曲线 (224) 衍射

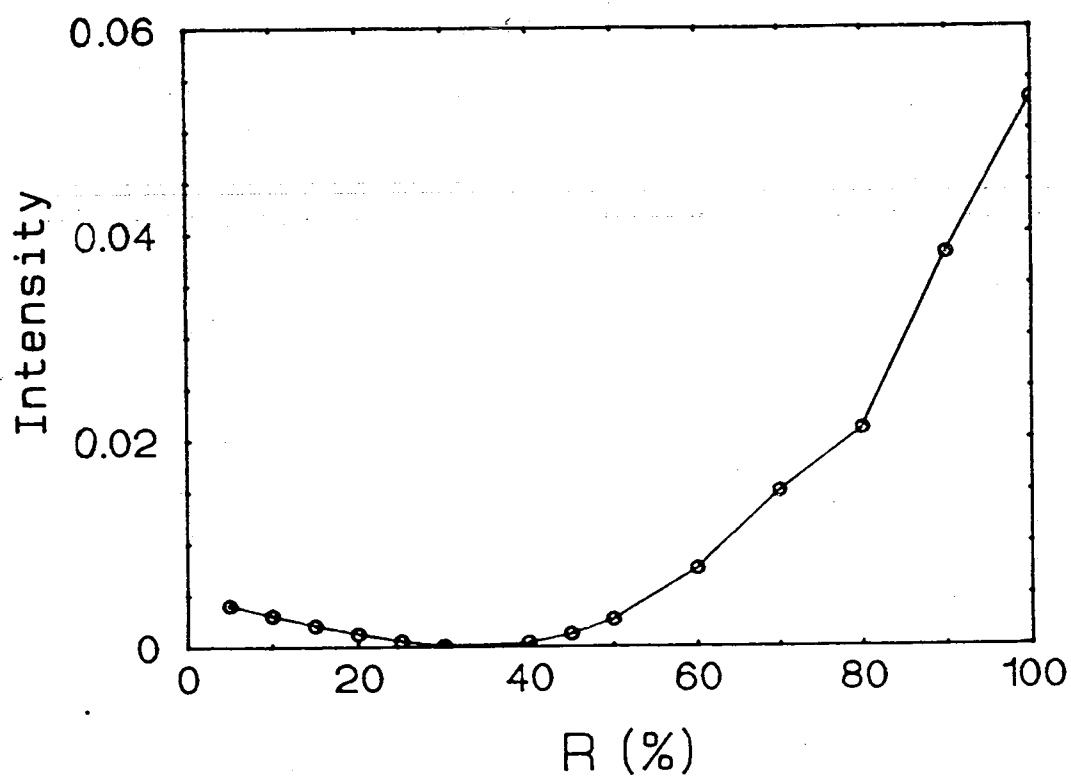


图 4.8 机制(2)时, 零级峰峰强与 R 的关系。(224)衍射

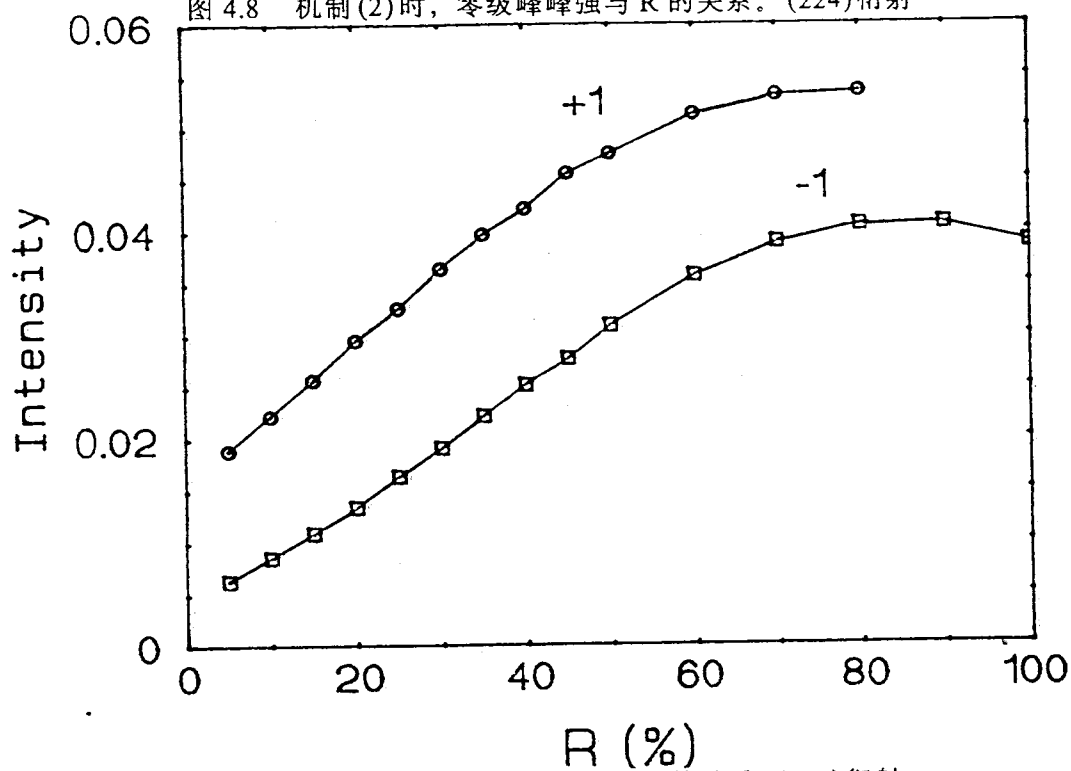


图 4.9 机制(2)时, ± 1 级峰峰强与 R 的关系。(224)衍射

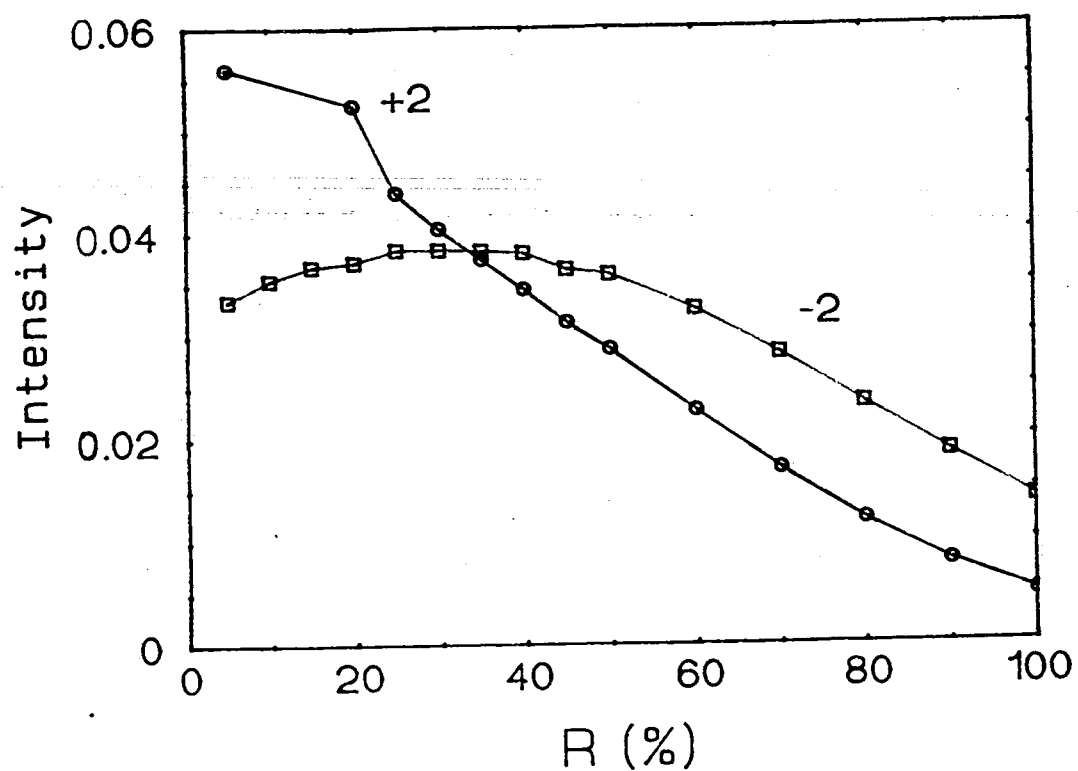


图 4.10 机制(2)时, ± 2 级峰峰强与 R 的关系。(224)衍射

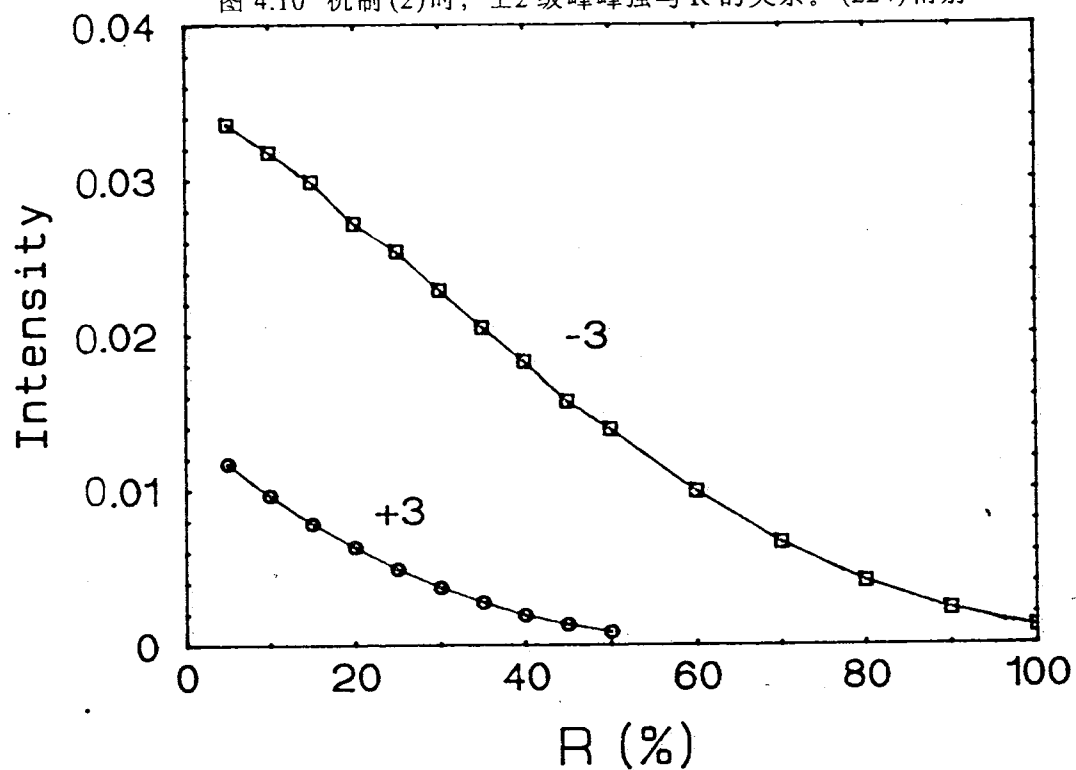


图 4.11 机制(2)时, ± 3 级峰峰强与 R 的关系。(224)衍射

乎匹配的系统,通常很难观察到较强的高级卫星峰,且正负各级峰在衬底峰两侧的分布趋于对称,而对象 InGaAs/GaAs 及 GeSi/Si 等具有较大应变的系统,一般都比较容易观察到高级卫星峰,且卫星峰在衬底峰两侧的分布不再对称。

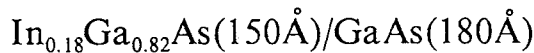
应变弛豫机制(1)和(2)两种情形下,弛豫比 R 对摇摆曲线卫星峰峰强分布的不同效应可用来判断样品应变弛豫的机制。两种机制时 R 对峰强的不同影响可以认为是在两种机制下, R 对两组元层之间相对应应变的不同影响所致。这一点在运动学理论中可以看的很清楚。根据 Segmullar 和 Blakeslee^[48] 的理论,在考虑超晶格组元层之间的相对应应变后,超晶格的衍射振幅可表达为^[88]

$$A_g(s) = \frac{\sin(\pi s N M)}{\sin(\pi s N)} \left(F_1 \frac{\sin[\pi(s + Le_1)N_1]}{\sin[\pi(s + Le_1)]} + F_2 \exp(i\pi s N) \frac{\sin[\pi(s + Le_2)N_2]}{\sin[\pi(s + Le_2)]} \right) \quad (4.39)$$

式中 M 是超晶格的周期数, N 是一个周期中沿生长方向总的单胞数, N_1 和 N_2 分别是两组元层沿生长方向各自的单胞数,且 $N = N_1 + N_2$ 。 F_1 和 F_2 分别是两组元层一个单胞的结构因子, e_1 和 e_2 则是两组元层相对平均点阵 $\langle a \rangle$ 的相对应应变。 L 是严格 Bragg 反射时的倒易点(HKL)的 L 分量, s 是偏离 Bragg 反射时 L 的偏移量。在机制(1)时,所有超晶格层作为一个整体在与衬底相交的界面上发生应变弛豫,因而两组元层之间的相对应应变 e_1 和 e_2 保持不变;而在机制(2)时,随 R 的变化,两组元层之间的相对应应变 e_1 和 e_2 也发生变化。从而根据(4.39)式在机制(1)时,卫星峰峰强不受 R 变化的影响,而在机制(2)时,则发生明显的变化。

§ 4.4 InGaAs/GaAs 应变层超晶格的研究

实验所用样品由分子束外延技术生长,标称结构为 15 周期的



衬底为 GaAs(001). X 射线双晶衍射采用 $\text{CuK}\alpha_1$ 辐射。第一晶体为 GaAs (001), (004) 反射。衍射束斑限制在 $0.05\text{mm} \times 0.8\text{mm}$ 。在样品的四个取向位置 $\omega = 0^\circ, 90^\circ, 180^\circ$ 和 270° 处记录 (004) 和 (224) 衍射摇摆曲线 (ω 的确定参见 §4.2.2) 图 4.12 和图 4.13 分别给出了这些实验曲线, 我们发现, 在 $\omega = 0^\circ$ 和 90° 以及 180° 和 270° 处记录的同一衍射的摇摆曲线几乎完全一致, 而在 $\omega = 0^\circ$ (右 90°) 及 180° (或 270°) 处记录的摇摆曲线则存在卫星峰与衬底峰距离上的差异。这表明在超晶格层与衬底之间存在一个沿 $[010]$ 方向的倾角, 如图 4.14 所示。其中 Γ 和 Ω 分别是超晶格层与衬底表面沿 $[010]$ 和 $[110]$ 方向的夹角。从四条 (004) 衍射摇摆曲线出发, 利用 (4.23) 式, Ω 确定为 $230''$ 。根据图 4.14 中简单的几何关系, 得到

$$\Gamma = \arcsin(2\sin\Omega\sin45^\circ) = 325''$$

根据前几节讨论的方法, 可以对上述实验曲线进行理论模拟。我们发现, 只有在假设弛豫机制 (1) 时, 模拟摇摆曲线才可能与实验曲线相拟合。图 4.12(C) 和 4.13(C) 分别是在机制 (1) 时, 用表 4.1 中的参数对 (004) 和 (224) 摇摆曲线的模拟结果。其中 (4.24) ~ (4.26) 各式中 Ω 前取负号; (4.27) 中 $\Delta\theta_g$ 取 $172''$, 对应 σ 为 73.04。可以看到模拟曲线与 $\omega = 180^\circ(270^\circ)$ 时的 (004) 和 (224) 实验曲线都符合得很好。如果在 (4.24) ~ (4.26) 各式中 前取正号, 则模拟曲线与 $\omega = 0^\circ(90^\circ)$ 时的实验曲线相拟合。根据表 4.1 中的参数, 求得 $\langle f \rangle = 0.55\%$ 。由 (4.11) 式, 样品的平均弛豫比为:

$$R = \frac{\varepsilon_{\parallel}^{\parallel}}{\langle f \rangle} = 32.7\%$$

表 4.1 图 4.12 和 4.13 中模拟曲线用模拟参数

周期	t_B	t_T	x	$\varepsilon_B^{\parallel}$	$\varepsilon_T^{\parallel}$	$\varepsilon_B^{\perp}$	$\varepsilon_T^{\perp}$	σ
	(Å)	(Å)		(%)	(%)	(%)	(%)	
15	177	151	0.172	0.18	0.18	-0.16	2.21	73.04

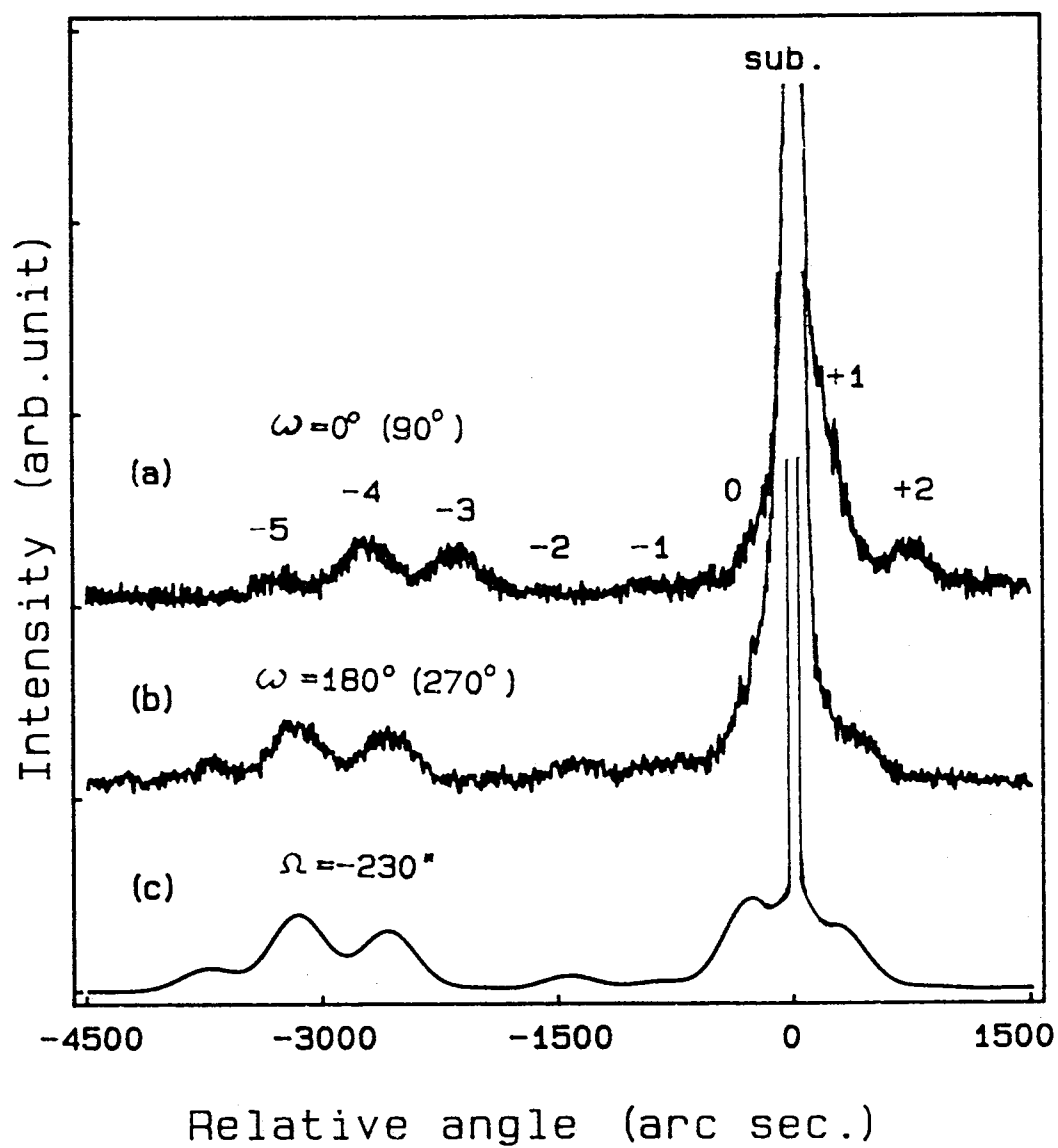


图 4.12 在不同的样品取向位置时的 (004) 衍射摇摆曲线, (a)、(b) 为实验曲线, (c) 为动力学理论模拟曲线

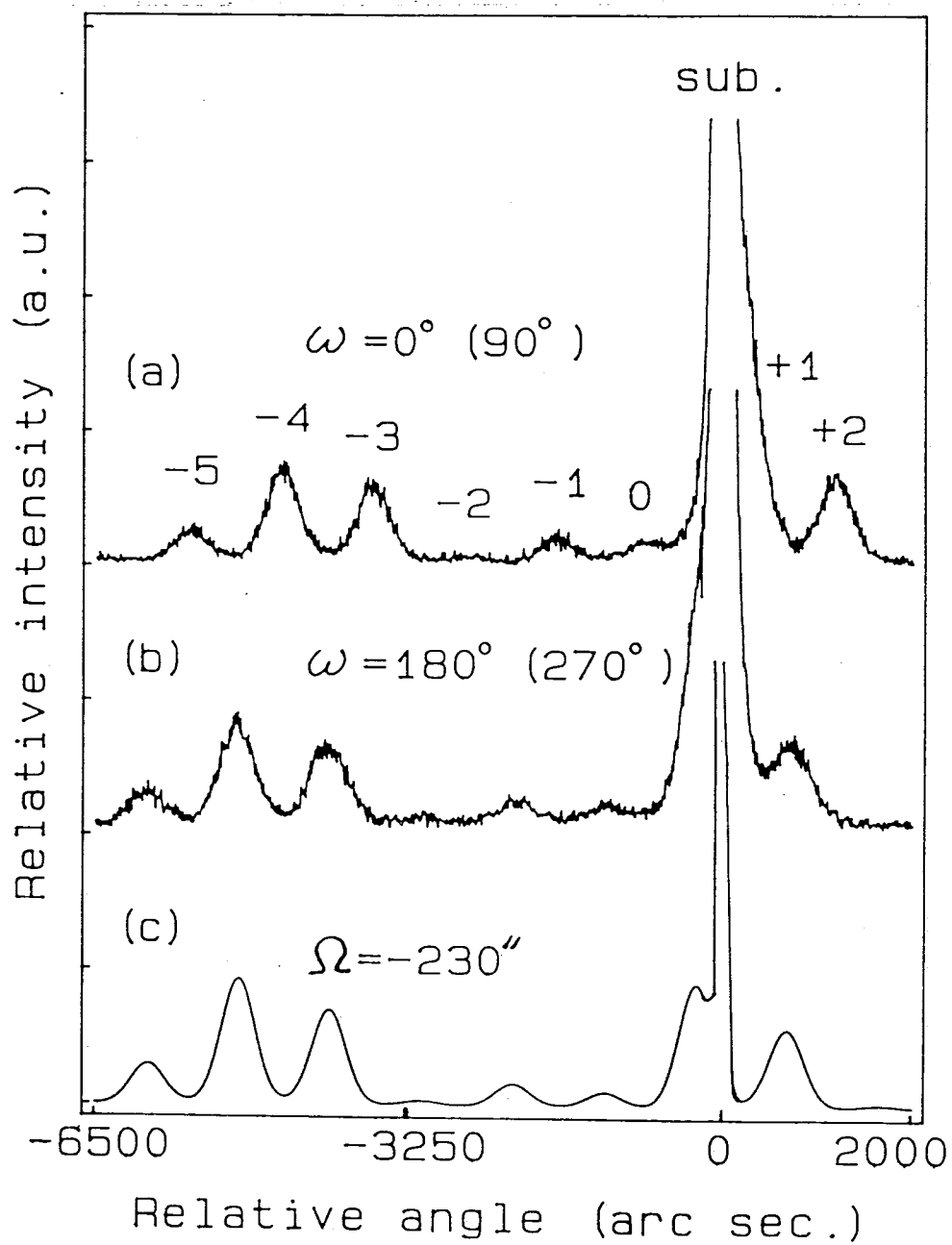


图 4.13 在不同的样品取向位置时的 (224) 衍射摇摆曲线。
(a)、(b) 为实验曲线，(c) 为动力学理论模拟曲线。

如果假设在衬底表面附近形成的失配位错都是 III - V 族外延膜中常见的 60° 位错的话, 其 Burgers 矢量 $\mathbf{b} = (a/2)\langle 110 \rangle$, 则我们可以估计这些失配位错的平均线密度为^[89, 90]:

$$\rho_i = \varepsilon'' (\cos \delta \times b)^{-1} = 9 \times 10^4 \text{cm}^{-1}$$

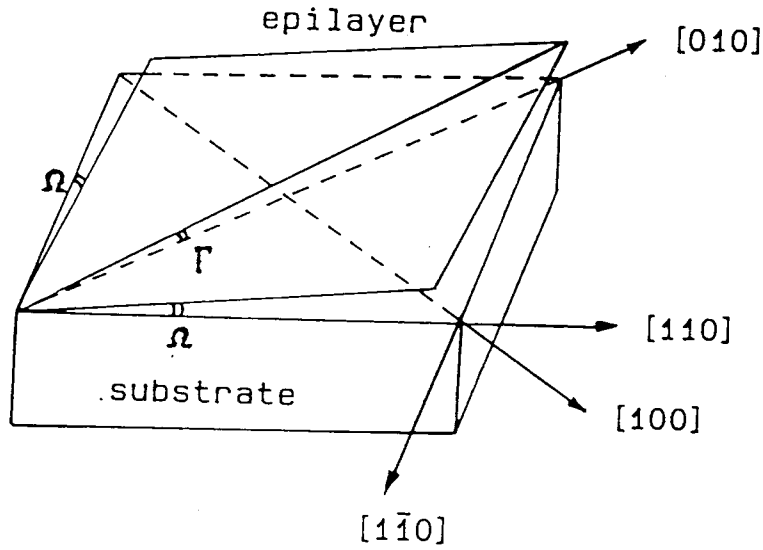


图 4.14 超晶格层与衬底之间取向差的示意图

其中 δ 为 Burgers 矢量与位错线之间的夹角, b 为 Burgers 矢量的大小。从卫星峰的展宽这一现象, 我们可以判断在超晶格层中也有位错存在, 但由于失配应变仅在超晶格层与衬底的界面上产生了弛豫, 因而这些位错只可能是超晶格层与衬底界面处失配位错的扩展所致。用一个简单的表达式^[91], 从峰形的展宽 $\Delta\theta_g$ 可以估计其密度为:

$$\rho = \left(\frac{\Delta\theta_g}{4b} \right)^2 = 2.71 \times 10^7 \text{cm}^{-2}$$

为了观察衬底表面附近及超晶格内部的位错分布, 我们分别在 (224) 衍射的衬底峰及 -4 级卫星峰上拍摄了双晶形貌图。拍摄采用

Kodak 底片, 曝光时间分别为 5 小时和 40 小时, 结果示于图 4.15(a) 和 (b)。在图 (a) 中, 可以看到几乎所有的位错线都平行于 $[1\bar{1}0]$ 方向。由于衬底为高完美单晶, 位错密度很低, 因而可以认为它反映了超晶格层与衬底的界面附近的位错分布。在 III - V 族化合物中, 类似这样各向异性的位错分布已被多次用 X 射线衍射及透射电子显微镜等观察到^[92, 93]。产生这种现象的原因被认为是由于位错在 A(g) 和 B(g) 类滑移面 (Ga 原子面和 As 原子面) 上的滑移速度相差很大所致^[94, 95]。因而在图 4.15(a) 中观察到的位错线对应于位错滑移较快的 B(g) 面与界面的截线。在图 4.15(b) 中, 即 -4 级卫星峰上拍摄到的形貌图中, 位错呈网格状分布, 即位错不仅沿 $[1\bar{1}0]$ 方向分布, 也沿 $[110]$ 方向分布。图中还观察到超晶格层存在严重的应力使得右上部不衍射。由于 -4 级卫星峰远离衬底峰, 因而可以认为它反映的是超晶格层中的位错分布。形成这一位错分布的原因可能是失配位错在由衬底表面向超晶格层扩展的过程中, 发生了交叉滑移, 从而在形貌图中表现为网格状。

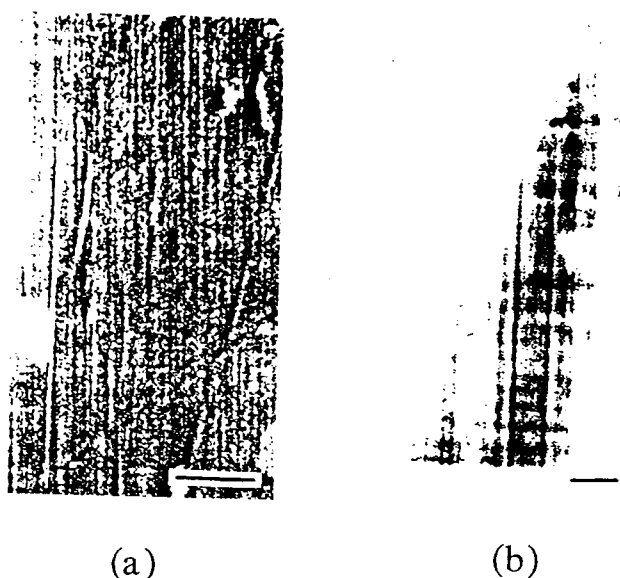


图 4.15 X 射线 (224) 衍射形貌。(a) 在衬底峰拍摄, (b) 在 -4 级卫星峰拍摄。图 (a) 和 (b) 中的标尺分别为 100μ 和 $250\mu\text{m}$

§4.5 结论

在本章中,我们给出了用 X 射线衍射动力学理论模拟应变弛豫超晶格双晶摇摆曲线的方法。模拟时考虑了不同的应变弛豫机制,超晶格层与衬底之间的取向差以及由于失配位错的形成导致的衍射卫星峰的展宽效应。讨论了在两种可能的机制下超晶格内部的应变分布及其与弛豫比 R 的关系。模拟计算表明,在机制(1)起作用时,衍射卫星峰的强度分布不受 R 的影响;而在机制(2)起作用时,衍射卫星峰的强度分布则受到 R 的强烈影响。这就使得用模拟摇摆曲线的办法来确定超晶格中应变的弛豫机制成为可能。在两种机制下,弛豫比 R 对衍射卫星峰与衬底峰相对位置的影响相同。随 R 的增加,零级峰与衬底峰之间的距离 $\Delta\theta$ 呈线性下降。对超晶格结构,动力学理论模拟得到的 $\Delta\theta$ 略小于用运动学理论的估计值,且随 R 的增加,这种差别减小,而对单层膜结构,两者之间则完全相同。因而在对应变层超晶格的应变状态作精确分析时,运动学理论可能会带来一定的误差。对一个标称结构为 15 周期的 $\text{In}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{As}(150\text{\AA})/\text{GaAs}(180\text{\AA})$ 超晶格样品的分析表明,所有超晶格层作为一个整体在与衬底的界面上发生了应变弛豫,即机制(1)起作用,平均应变弛豫比 R 为 32.7%。这一应变弛豫导致超晶格层与衬底之间产生了一个沿 $[010]$ 方向的 $325''$ 的取向差角。X 射线双晶形貌观察表明,在超晶格层与衬底之间的界面上,位错呈单向分布,平均线密度约 $9 \times 10^4 \text{cm}^{-1}$;而在超晶格内部,位错呈网格状分布,其密度约为 $2.71 \times 10^7 \text{cm}^{-2}$ 。

第五章 GeSi/Si 应变层超晶格结构不完美性的研究

§5.1 问题的提出

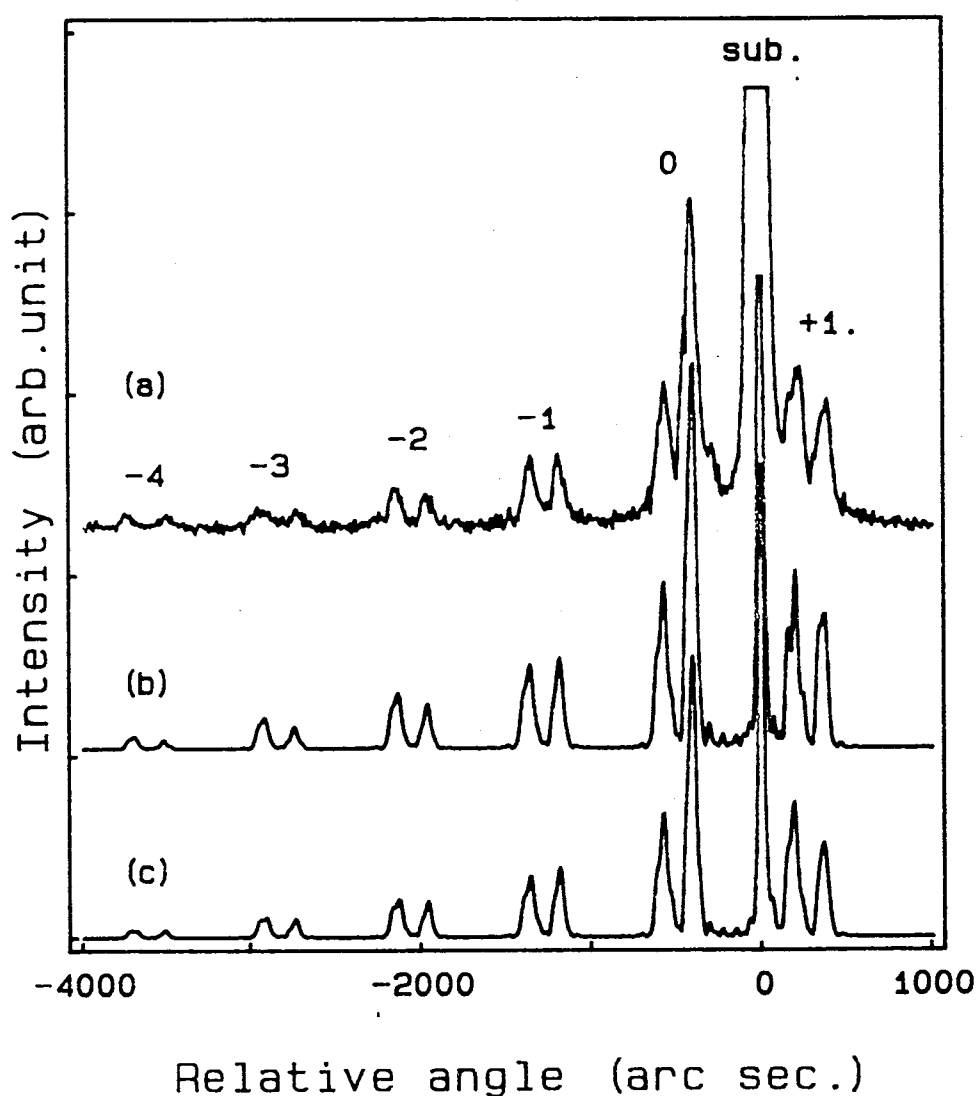
最近几年, $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ 应变层超晶格日益受到人们的关注。由于它可以与常规的 Si 集成电路技术匹配, 又具有类似 GaAs 的高频高速特性, 加上其优异的光电性能, 因而有着广泛的应用前景^[96-98]。许多研究表明, $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ 合金的带隙可以通过控制 Ge 的含量来调节, 其能带结构也可通过选择适当的应变状态来改变^[100, 101]。但由于 Ge 和 Si 之间存在较大的点阵失配(约4.2%), Ge 含量或 GeSi 合金层与 Si 层相对厚度的一个微小变化就足以引起超晶格的应变状态发生明显的变化。因而, 为了获得优异的器件性能, 在生长时就要求严格控制外延层的层厚、成份及其均匀性等。在实验上, 通过多种办法测量样品的结构和完美性也因此倍受人们的重视。在诸多的实验技术, 如透射电子显微镜, 离子束沟道分析, 喇曼散射等当中, X 射线双晶衍射技术是最为有效的手段之一。尤其对应变层超晶格, 由于可探测到许多衍射卫星峰, 因而可以得到样品结构的许多信息。但是对结构完美性较差的样品, 对衍射摇摆曲线的直接分析往往很困难, 这就需要借助适当的理论模拟手段。

对 GeSi/Si 超晶格, 一种研究得较多的不完美性是层厚及成份的随机波动, 但实际中有时层厚与成份的变化并不是随机的。在本章中, 我们将通过对 GeSi/Si 超晶格的 X 射线双晶衍射摇摆曲线进行模拟分析, 得到关于层厚及成份变化引起的结构不完美性的一些信息。

§5.2 结构参数的突变: 衍射卫星峰的分裂现象

Lyons 等人^[102]对 GeSi/Si 超晶格系统中层厚及成份的随机变化对双晶衍射摇摆曲线中超晶格卫星峰的强度及峰形的影响作了认真的研究, 得到了一些与结构变化相对应的摇摆曲线变化的一些特征现象。他们发现, 超晶格卫星峰的强度分布因层厚及成份的随机变化而

有所改变,而且在卫星峰的周围出现了次极大。这些次极大也随卫星峰级数的变化而变化。朱南昌等人^[103]也对 GeSi/Si 超晶格的这类结构不完美性作了研究,并得到了类似的结论。在实验中,我们发现了另外一些与超晶格结构参数的变化有关的摇摆曲线的变化特征。它们明显不同于上述研究人员的结果,因而显然不能再用结构参数的随机变化模型来处理。本节中,我们着重对 GeSi/Si 超晶格衍射卫星峰的分裂现象进行研究,从而得到与之相关的超晶格结构和不完美性。



• 图 5.1 样品的(004)衍射摇摆曲线。(a)实验, (b), (c)理论模拟

§ 5.2.1 实验与结果

实验所用的 GeSi/Si 超晶格样品由分子束外延技术生长, 衬底为 Si (001), 样品设计结构为:

20 周期, $\text{Ge}_{0.2}\text{Si}_{0.8}(50\text{\AA})/\text{Si}(200\text{\AA})$

双晶衍射是采用 $(m, -n)$ 排列, 第一晶体为 Si(111), (111) 衍射, $\text{CuK}_{\alpha 1}$ 辐射。测量了样品的 (004) 衍射摇摆曲线。入射 X 射线束的大小由一组狭缝限制在 $0.8\text{mm} \times 0.05\text{mm}$, 因而足以消除样品沿表面可能存在的均匀性的影响。

图 5.1(a) 是样品的实验摇摆曲线。可以看到每一级卫星峰都分裂成两个子峰, 且各个峰的峰形也不再象完美超晶格的卫星峰那样近似成对称分布。从有高级卫星峰出现, 可以判断, 样品的单晶性及界面都比较好。由于零级峰的峰位是由超晶格中的平均应变决定的, 它与超晶格组元层的层厚及成份有关, 所以如果我们把图中分裂的卫星峰看作两组独立的卫星峰的话, 可以认为它们分别对应平均应变不同的两个子超晶格, 它们的层厚或成份或两者同时都有一定的差别。

表 5.1 图 5.1 中 (b), (c) 两条模拟曲线的模拟参数。

曲线	周期	x	$t_{\text{Si}}(\text{\AA})$	$t_{\text{GeSi}}(\text{\AA})$
b	1-11	0.176	55.2	193
	12-20	0.223	63.1	184
c	1-9	0.223	63.1	184
	10-20	0.176	55.2	193

图 5.1(b) 是对 5.1(a) 的模拟摇摆曲线, 模拟参数见表 5.1。可以看到, 两条曲线在峰位, 峰形及峰强等方面都拟合的很好, 因而可以认为表中的模拟参数反映了样品结构的真实情况。从模拟参数, 我们注意到, 从第 12 周期开始, 超晶格周期中两组元层 GeSi 和 Si 的相对厚度以及 Ge 含量都发生了变化, 但每一周期的总厚度变化不大。事实上, 这种现象在实际中并不奇怪, 因为在生长过程中, 生长参数及生长条件的

任一微小变化都可能会引起样品的结构参数发生相应的变化,而前者在生长过程中有时总难免发生。在实验所用的样品中,结构参数的变化导致形成两个子超晶格,分别由前 11 周期和后 9 周期组成。两者相对衬底的平均失配相差 0.074%。

§5.2.2 讨论

在一个由 A、B 两个应变层构成的外延结构中,如果 A 和 B 都足够薄以至吸收效应不太明显时,从 X 射线双晶衍射摇摆曲线中,很难判断出两者的堆积次序究竟是 AB 还是 BA。图 5.2 是对一个假想结构的模拟计算结果。在该结构中, A 和 B 分别为厚 $2000\text{\AA}$ 的 $\text{Ge}_{0.1}\text{Si}_{0.9}$ 和 $1000\text{\AA}$ 的 $\text{Ge}_{0.2}\text{Si}_{0.8}$ 合金膜,衬底为 $\text{Si}(001)$,入射 X 射线为 $\text{CuK}_{\alpha 1}$ 辐射, (004) 衍射。图中两条曲线 (a) 和 (b) 分别对应 AB 和 BA 次序。可以看到,两条曲线几乎完全相同,实际上很难对它们作出判别,因而也就无法对 A、B 两层的实际堆积次序从摇摆曲线作出判断。但是对超晶格,情况则有所不同。由于大量卫星峰的存在和它们对结构的敏感,使得我们可以确定一个样品中可能存在的两个子超晶格的堆积次序。图 5.1(c) 是将表 5.1 中曲线 (b) 的模拟参数的前 11 周期和后 9 周期互换次序后的模拟结果。与图 5.1(b) 相比,两曲线中零级峰的峰形及相对高度没有什么差别,但较高级的卫星峰,如 $-2, -3$ 级卫星峰中两个子峰的相对强度,以及 $+1$ 级卫星峰的峰形等都有明显的差异,而只有曲线 (b) 才能较好地拟合实验曲线 (a)。所以我们可以认为样品的实际结构具有曲线 (b) 的模拟参数那样的堆积次序。

并不是每一超晶格中存在一个结构参数的突变时都会像图 5.1(a) 那样产生完全分裂的双峰。能否产生完全分裂的峰,是由结构参数变化的大小决定的。图 5.3 给出了一组类似结构的模拟摇摆曲线,模拟参数见表 5.2。在表中的最后一栏,给出了平均失配的变化 Δf 。图 5.3(a) 是结构没有变化,即完美超晶格的模拟摇摆曲线。从图 5.3 (b) 至 (d) Δf 逐渐增大。我们看到,当 Δf 较小时,在摇摆曲线上反映为衍射卫星峰变得不对称,并在其一侧出现次极大,如图 5.3(b) 所示。随着

Δf 的增加, 衍射峰产生劈裂, 同时由于干涉现象, 引起卫星峰的严重变形, 产生许多肩峰 (图 5.3(c))。当 Δf 增加到一定程度时衍射卫星峰才完全分裂为两组独立的峰 (图 5.3(d)), 但由于干涉现象的存在, 每一衍射峰的峰形都受到了一定程度的调制, 不同于完美超晶格的衍射峰峰形。从这些结果我们可以看到, 结构不完美的超晶格的摇摆曲线将会变得非常复杂, 只有通过精心的模拟才能获得样品的真实结构参数。

为了证实我们的结论, 对样品作了截面透射电子显微镜分析。电

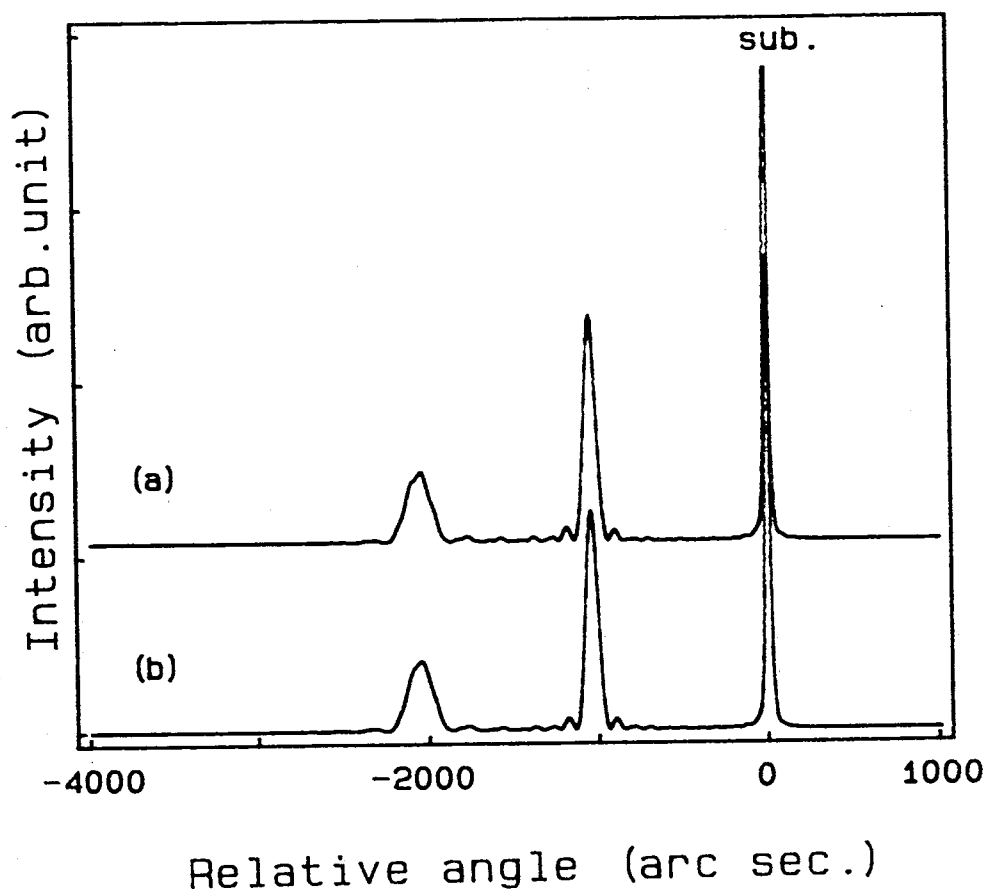


图 5.2 (a)AB 次序及 (b)BA 次序时的双晶摇摆曲线,
(004) 衍射 A:2000ÅGc_{0.1}Si_{0.9}; B:1000Å Gc_{0.2}Si_{0.8}

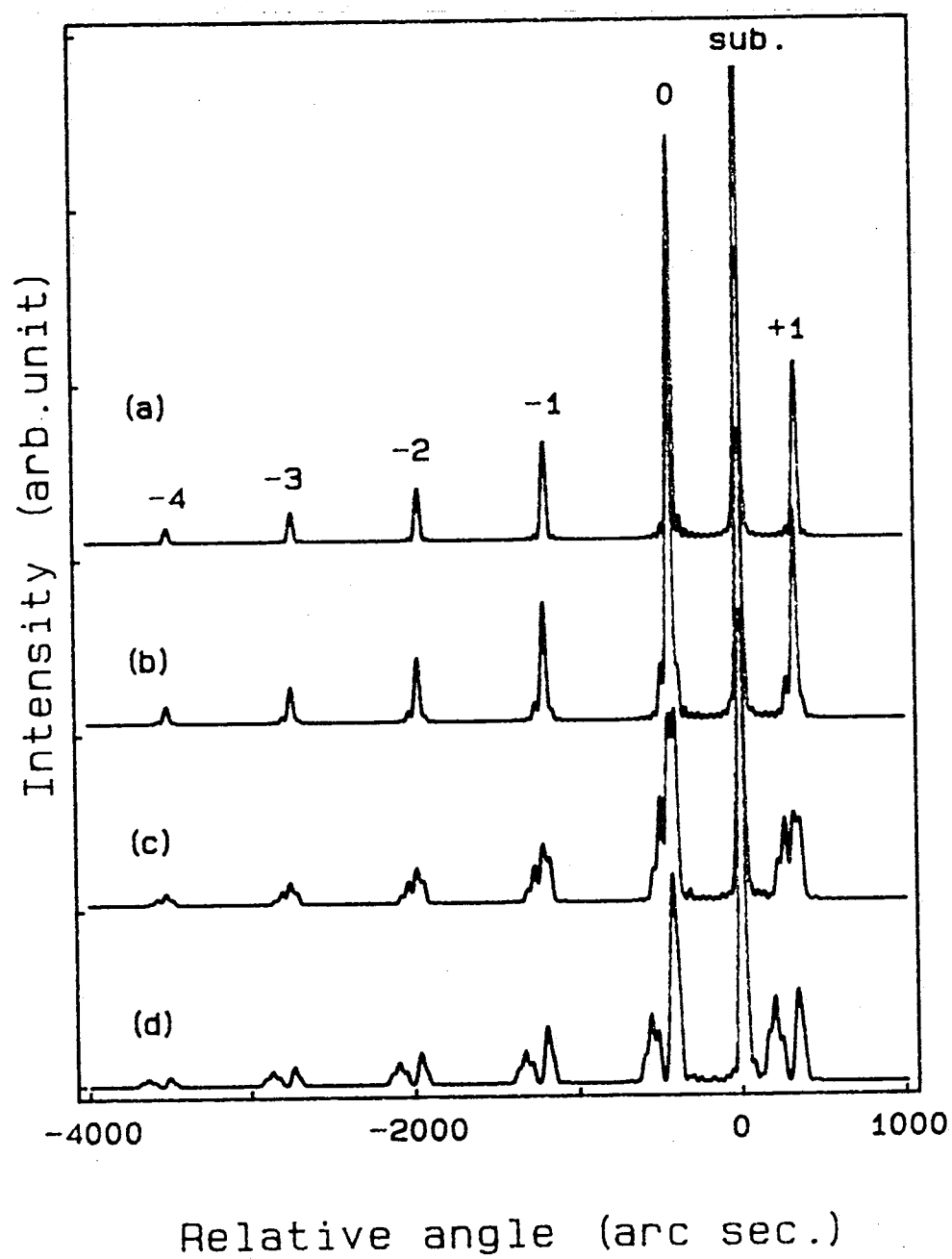


图 5.3 表 5.2 中结构的模拟双晶摇摆曲线, (004)衍射。

表 5.2 图 5.3 中各曲线的模 2 参数

曲线	周期	$t_{\text{Si}}(\text{\AA})$	$t_{\text{GeSi}}(\text{\AA})$	x	Δf
a	1-20	200	50	0.2	
b	1-8	200	50	0.2	0.015%
	9-20	198	52	0.21	
c	1-8	200	50	0.2	0.036%
	9-20	198	53	0.23	
d	1-8	200	50	0.2	0.063%
	9-20	198	55	0.25	

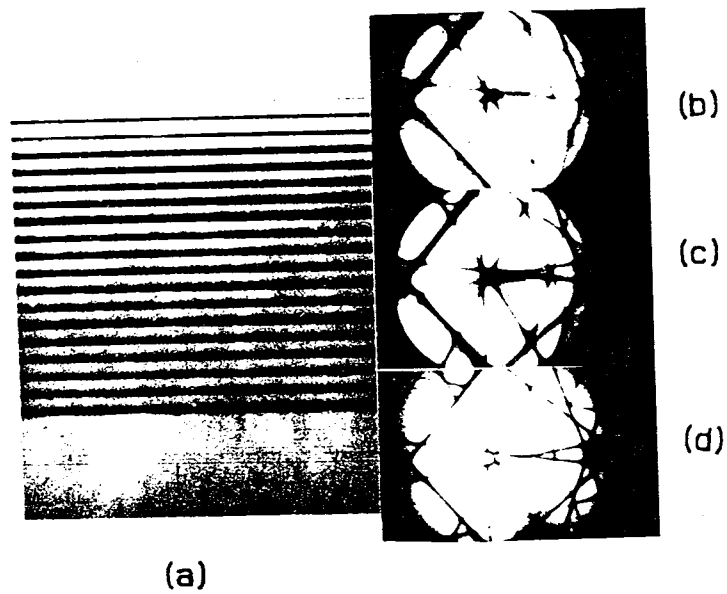


图 5.4 (a) 样品的截面透射电子显微衍衬像, (b)、(c)、(d) 在超晶格的上半部, 下半部和衬底的 CBED 明场像

镜样品首先由机械减薄到一定程度,然后采用离子束轰击的办法减薄至适于作电镜分析。实验是在 Philips EM-420 型电子显微镜上进行的,电压 100KV。图 5.4(a) 给出了样品的截面衍衬显微像。可以看到, $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ 合金层的衬度在前 11 周期和后 9 周期存在一定的差异,这表明这两部分中的 Ge 含量存在有差别。另外我们还注意到,上边 9 个周期下边 11 个周期中 GeSi 与 Si 层的相对厚度也有所不同。在上边 9 个周期中,GeSi 层相对较厚而 Si 层相对较薄。图 5.4(b), (c) 和 (d) 分别是样品的上半部,下半部及衬底的 $\{210\}$ 会聚束电子衍射明场像。研究表明,高级劳厄带轴线 (HOLZ) 的截距提供了应变超晶格平均点阵参数的信息^[104, 105]。在图 5.4(b), (c) 和 (d) 的中心, HOLZ 线截点的距离的增加,表明 Ge 的含量在样品的上半部大于下半部,这与图 5.4(a) 的观察一致。这一结论还得到了 X 射线微区分析的证实,结果表明,在这两部分中,Ge 的平均含量分别约为 4.9% 和 3.8%,对应 GeSi 合金层中的 Ge 含量 X 分别约为 0.24 和 0.19,与 X 射线衍射的结果表 5.1 比较接近。

§5.3 A_1BA_2 型结构: 衍射卫星峰的振荡现象

超晶格的 X 射线衍射摇摆曲线的变化反映了样品结构的变化情况。对摇摆曲线精细结构的分析可获得关于样品精细结构的许多信息。在本节中,我们将对摇摆曲线中出现的另外一种现象——在超晶格衍射卫星峰的一侧伴有强烈的振荡条纹以及与它相对应的样品结构的变化进行详细的分析研究。

§5.3.1 实验与结果

实验用 GeSi/Si 超晶格为分子束外延生长于 Si(001) 衬底之上,标称结构为:

$$15 \text{ 周期}, 50\text{\AA} \text{ Ge}_{0.25} \text{ Si}_{0.75} / 70\text{\AA} \text{ Si}$$

双晶衍射的实验条件同上节,只是这时我们选取的是非对称的 (113) 衍射,而不是对称的 (004) 衍射。这样做的目的是为了能更清楚地观察到

卫星峰的精细结构,因为在采用掠入射非对称衍射几何时,衍射峰的强度比采用对称衍射几何时要强得多。从(3.9)式,衍射振幅比 Q 正比于 $\sqrt{|\gamma_h|/\gamma_0}$ 。在对称衍射几何下, $|\gamma_h|=\gamma_0$ 因而 $\sqrt{|\gamma_h|/\gamma_0}=1$;而在掠入射非对称衍射条件下, $|\gamma_h|=\sin(\theta_B+\varphi)$, $\gamma_0=\sin(\theta_B-\varphi)$, 对(001)取向的 Si, 如取(113)衍射, 则 $\theta_B=28.06^\circ$, $\varphi=25.06^\circ$, 于是 $\sqrt{|\gamma_h|/\gamma_0}=4.05$ 。这样一些在对称衍射中不易观察到的衍射峰,在非对称衍射中则有可能清楚地观察到,因而在研究摇摆曲线的精细结构时,非对称衍射比对称衍射更有效。

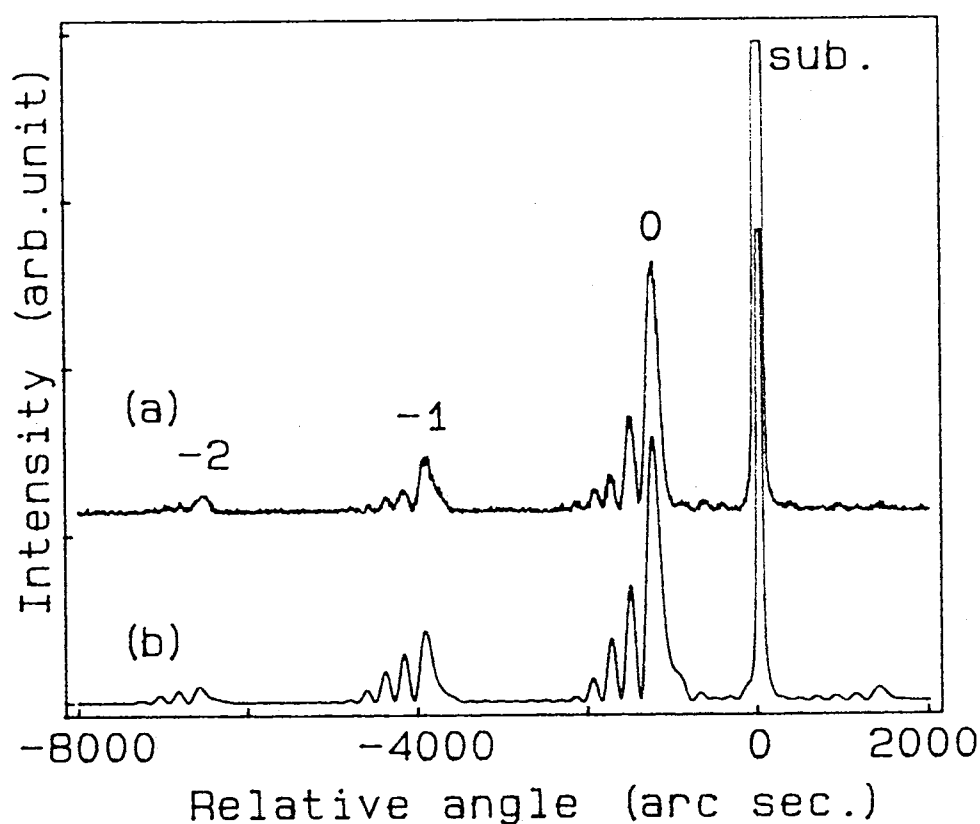


图 5.5 样品的(113)衍射摇摆曲线。(a)实验; (b)对曲线(a)的最佳拟合

表 5.3 图 5.5 中曲线(b)的模拟参数

周期	$t_{\text{Si}}(\text{\AA})$	$t_{\text{GS}}(\text{\AA})$	x
1-3	64	51	0.294
4-11	69	47	0.234
12-15	64	51	0.294

图 5.5(a) 是样品的实验 (113) 衍射摇摆曲线, 在每一级卫星峰的低角一侧都有很强的振荡条纹出现。这一现象既表明超晶格可能存在某些不完美性, 但又显然不同于存在层厚和成份随机变化或者突变时的情形。由衍射振荡条纹, 很容易使人联想到衍射干涉现象。关于 X 射线的干涉现象, 在外延结构中研究得很多的就是所谓的“三明治结构”或称 A_1BA_2 型结构^[106, 108]。这类结构由于夹心层 B 的存在, 可以引起两个 A 类层的衍射波发生很强的干涉现象, 从而引起摇摆曲线发生明显的变化。通过模拟计算, 我们发现, 超晶格卫星峰的振荡现象也可用一个类似 A_1BA_2 的结构模型来解释。图 5.5(b) 给出了对图 5.5(a) 的最佳拟合结果。模拟参数见表 5.3。可以看到, 模拟曲线与实验曲线在卫星峰主峰的峰位, 峰形, 峰强, 峰间距及振荡条纹的位置及间距等方面都拟合的非常好, 甚至对 -2 级峰高角度一侧的非对称展宽也拟合得非常好。这表明, 表 5.3 中的模拟参数反映了样品的真实情况, 即样品结构在第 4 周期和第 12 周期开始发生了两次变化。其中第 1-3 和 12-15 周期的结构参数偏离标称结构参数较严重, 因而我们可以认为在样品生长的初始阶段和结尾阶段, 生长条件有所波动, 造成样品形成 A_1BA_2 型结构。A、B 两部分相对衬底的平均失配相差 $\Delta f = 0.14\%$ 。

§5.3.2 讨论

X 射线双晶 摇摆曲线反映了样品的结构信息, 因而在一个具有

A_1BA_2 型结构的超晶格中,衍射卫星峰的振荡现象是与 A_1BA_2 这三部分的结构有关的,尤其对夹心 B 的周期数,层厚和成份更为敏感。图 5.6 给出了对一个 12 周期的 GeSi/Si 超晶格的模拟 (113) 衍射摇摆曲线。模拟参数见表 5.4。其中 B 区相对衬底的平均失配比 A 区小 $\Delta f=0.1\%$ 。表中 A、B 前的数字代表该部分的周期数。图中曲线 (a) 是仅有 A 的情况,即结构完美时的摇摆曲线,在每一级卫星峰的两侧都有很弱的干涉条纹,即通常称之的 Pendellosung 条纹出现,且呈对称分布。这种干涉条纹在 X 射线衍射理论中早有预言,干涉条纹的间距 $\Delta\theta_i$ 满足^[50]:

$$\Delta\theta_i = \frac{\lambda |\gamma_h|}{N t_p \sin 2\theta_B} \quad (5.1)$$

其中 N 是周期数,其余各符号的意义与前几章中相同。从曲线 (b) 开始,我们可观察到随着 B 区周期数开始增加,卫星峰低角度区干涉条纹强度逐渐增加,但当 B 区周期数进一步增加时,最邻近卫星峰的条纹强度减弱,但观察到的干涉条纹数却逐渐增多。当 B 区周期数增加到一定程度后,整个结构趋于接近以 B 区结构构成的完美超晶格,因而摇摆曲线也趋于接近这一完美超晶格的摇摆曲线。对不太完美的晶体,或者在衍射仪采用 (m, n) 排列时,通常很难在实验中观察到 Pendellosung 条纹。但象在图 5.6 中 (b) 到 (f) 的曲线那样,当卫星峰一侧的干涉条纹被加强时,在实验中就有可能观察到。这也就是在图 5.5 的实验曲线中观察到的振荡条纹。从图 5.6 我们注意到,随 B 区周期数的增加,仅仅

表 5.4 图 5.6 中摇摆曲线的模拟参数。

A: 50Å Gc _{0.4} Si _{0.6} /80Å Si	
B: 46Å Gc _{0.37} Si _{0.63} /85Å Si	
曲线	结构
a	12A
b	5A-2B-5A
c	4A-4B-4A
d	3A-6B-3A
e	2A-8B-2A
f	1A-10B-1A

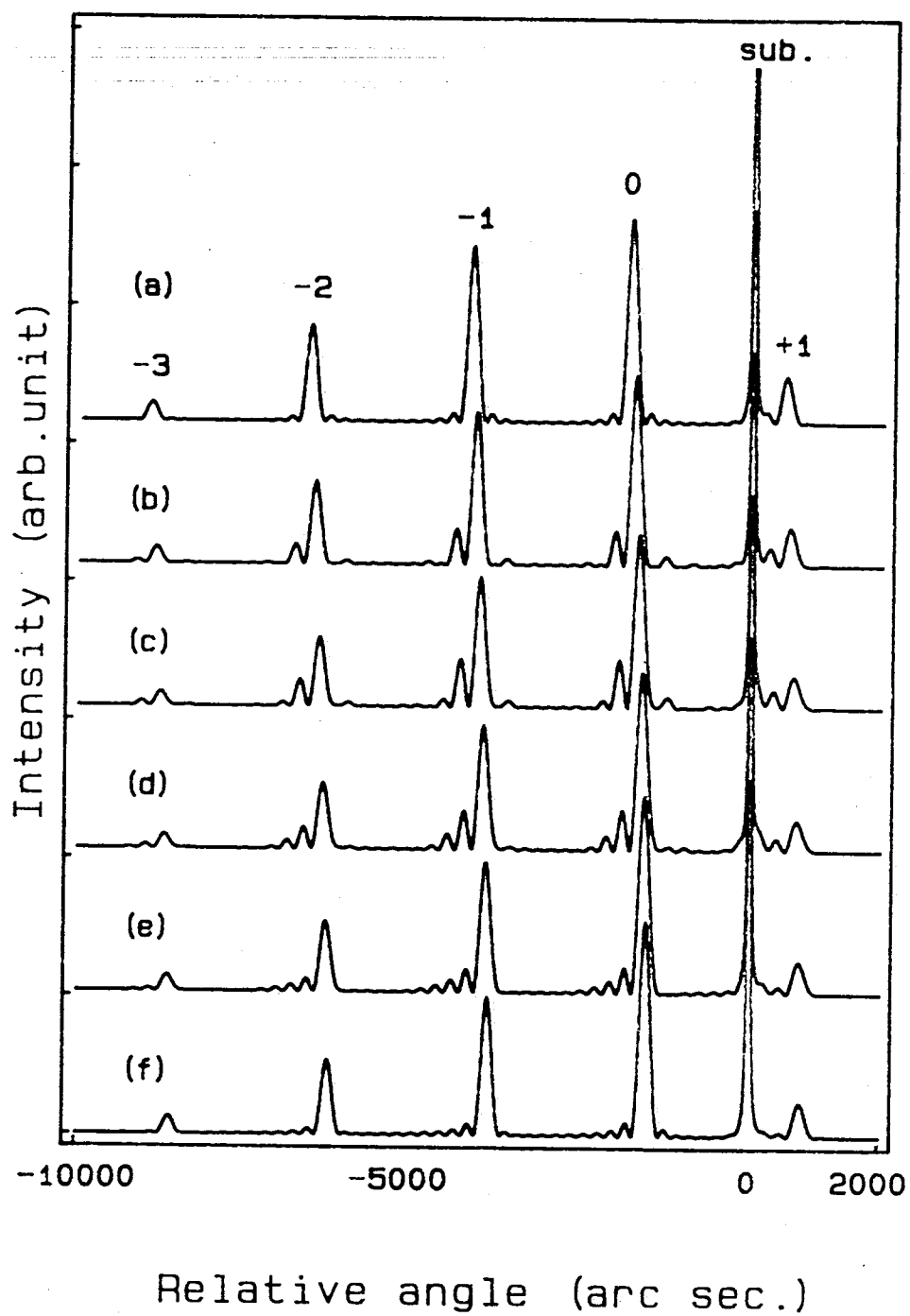


图 5.6 表 5.4 中参数的模拟摇摆曲线。B 区周期数变化。(113)衍射

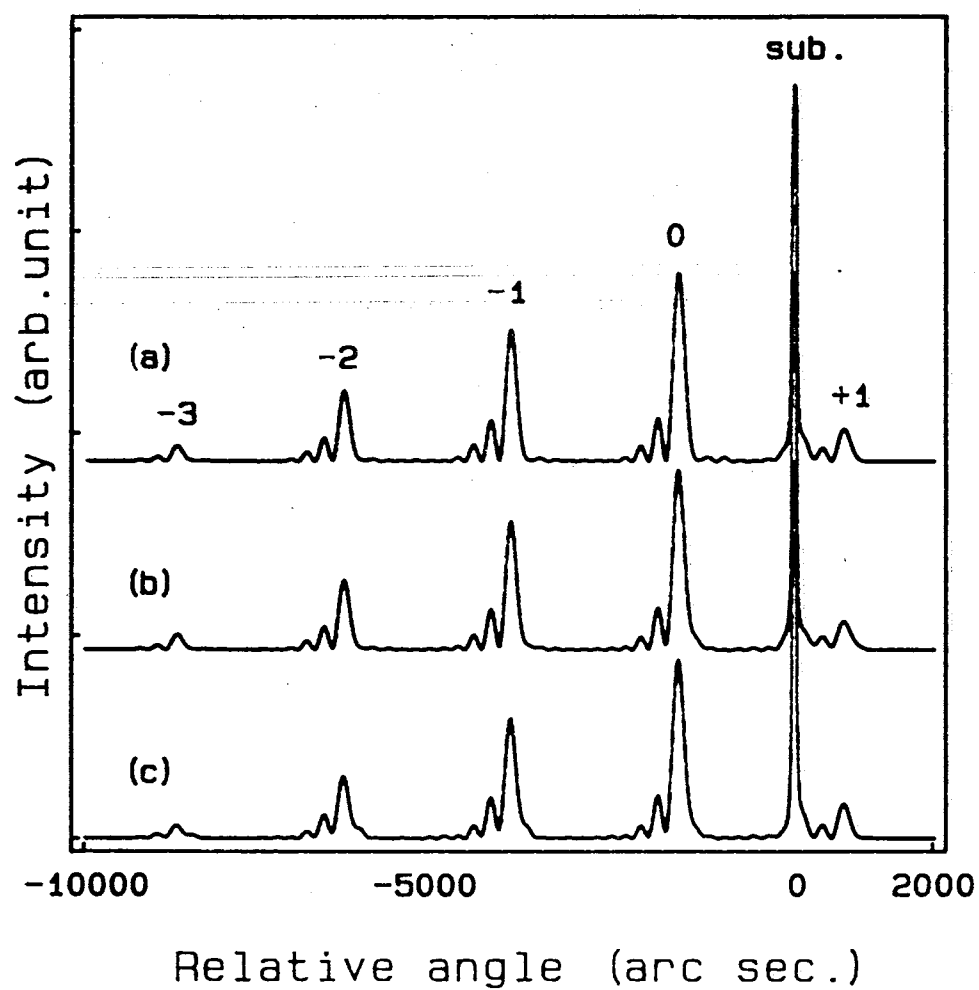


图 5.7 表 5.5 中结构参数的模拟摇摆曲线。(113)衍射

表 5.5 图 5.7 中各曲线的模拟参数

A: 50Å $\text{Ge}_{0.4}\text{Si}_{0.6}/80\text{Å Si}$	
B: 40Å $\text{Ge}_{0.37}\text{Si}_{0.63}/85\text{Å Si}$	
曲线	结构
a	3A - 6B - 3A
b	2A - 6B - 4A
c	4A - 6B - 2A

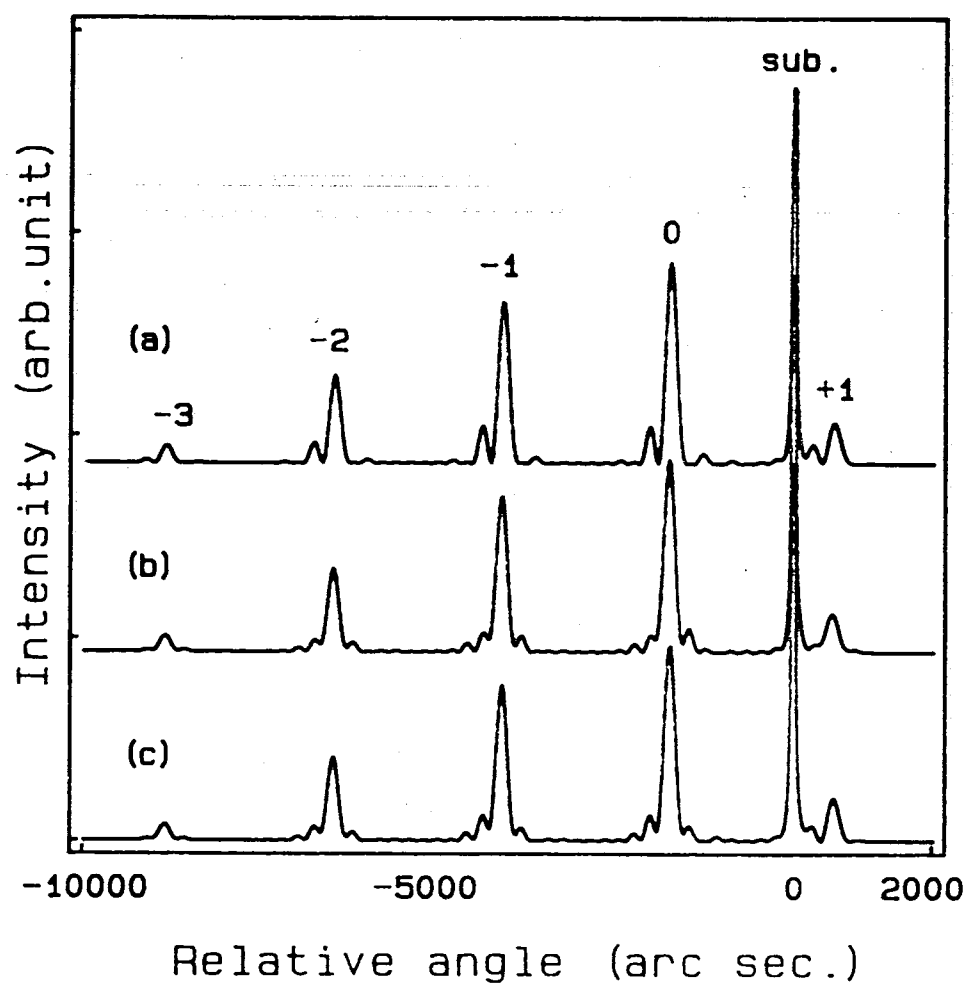


图 5.8 表 5.6 中结构参数的模拟摇摆曲线。

表 5.6 图 5.8 中各曲线的模拟参数。

A: 50Å Gc _{0.4} Si _{0.6} /80Å Si	
B: 46Å Gc _{0.37} Si _{0.63} /85Å Si	
曲线	结构
a	5A - 2B - 5A
b	2A - 2B - 8A
c	7A - 2B - 3A

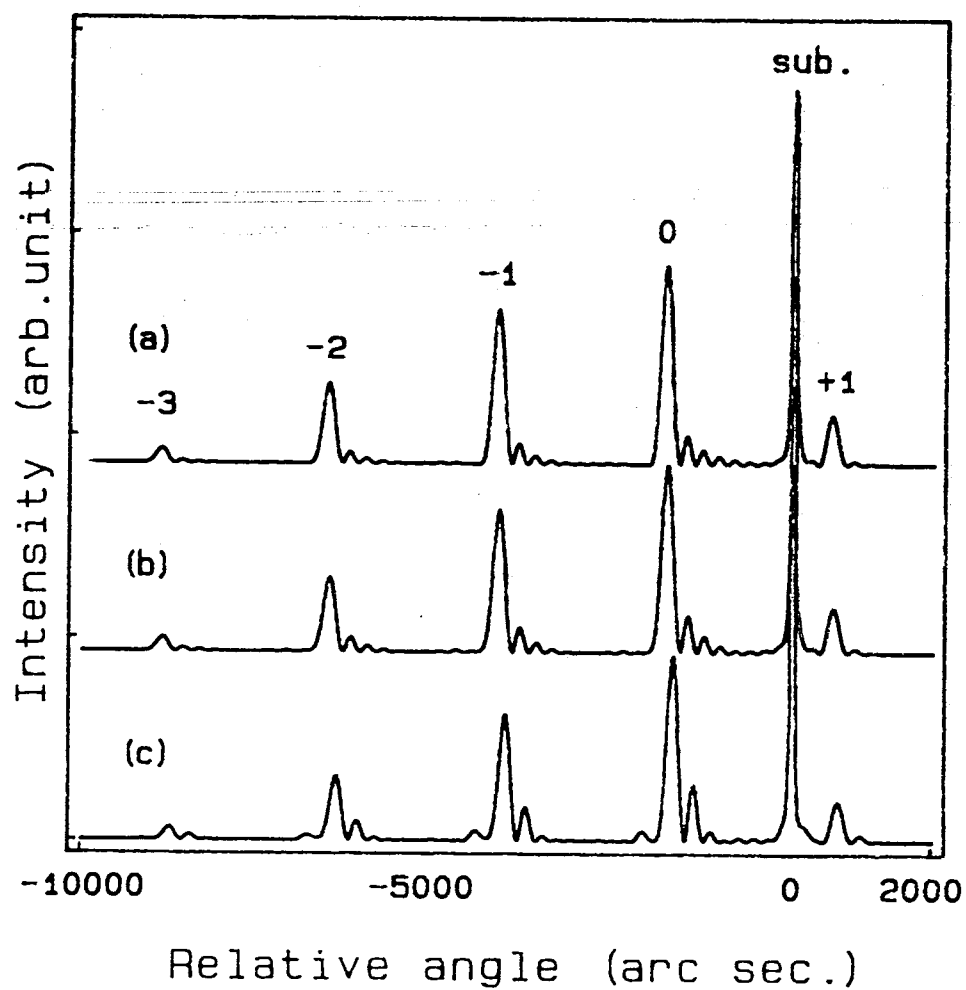


图 5.9 B 区平均失配大于 A 区时的模拟摇摆曲线，模拟参数见表 5.7。(113)衍射

表 5.7 图 5.9 中各曲线的模拟参数

A: 50Å $Gc_{0.4}Si_{0.6}/80\text{\AA}$ Si	
B: 46Å $Gc_{0.37}Si_{0.63}/85\text{\AA}$ Si	
曲线	结构
a	2B - 8A - 2B
b	2B - 7A - 3B
c	4B - 4A - 4B

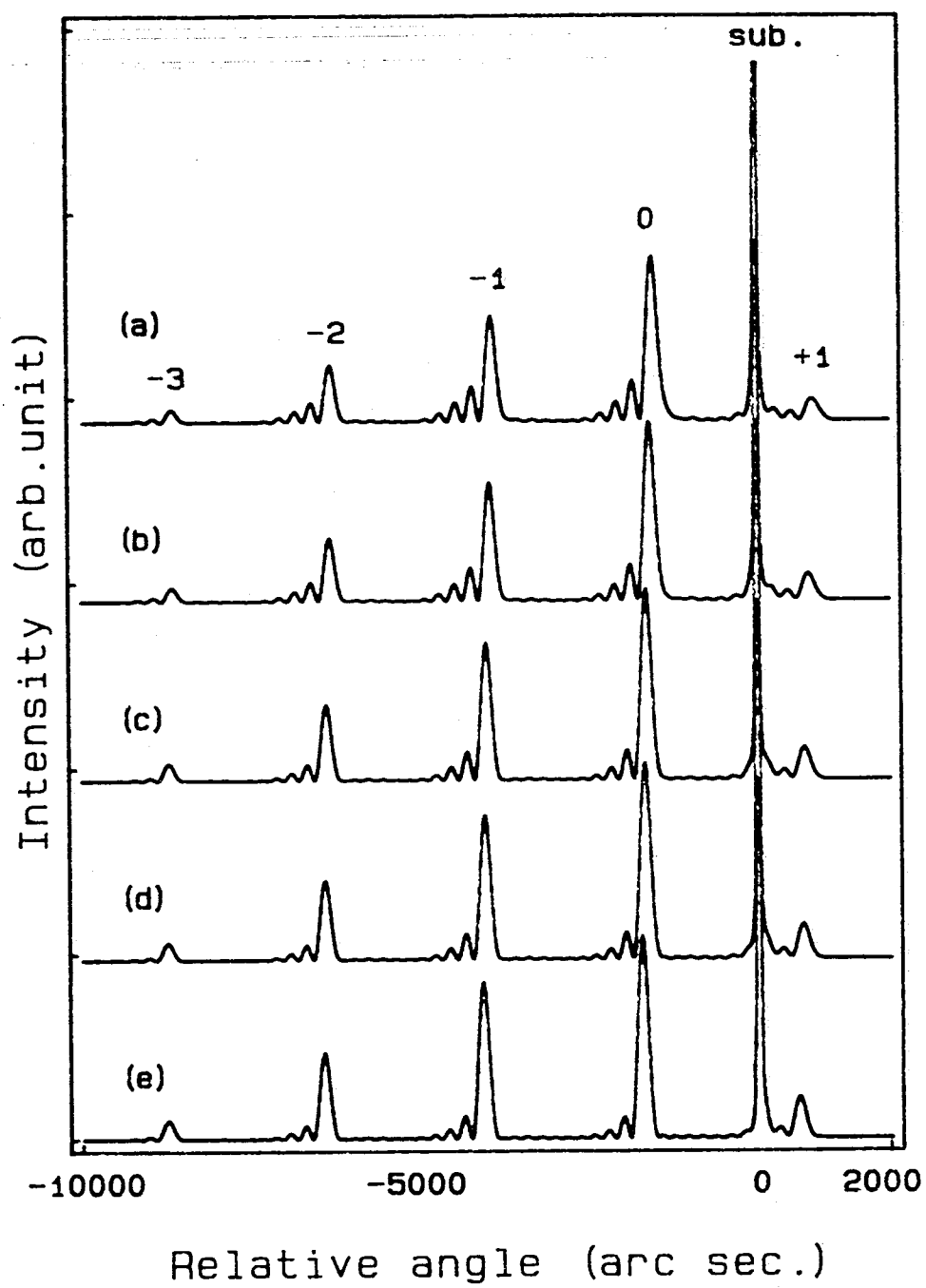


图 5.10 A 区与 B 区平均失配变化时的摇摆曲线。模拟参数见表 5.8。(113)衍射

表 5.8 图 5.10 中各曲线的模拟参数。其中, A 固定为 $50\text{\AA}$ $\text{G}_{0.4}\text{S}_{0.6}/80\text{\AA}$ Si。B 变化。结构为 $2\text{A}-7\text{B}-3\text{A}$ 。

曲线	B	Δf
a	$45\text{\AA}$ $\text{Gc}_{0.35}\text{Si}_{0.65}$ / $85\text{\AA}$ Si	0.146
b	$46\text{\AA}$ $\text{Gc}_{0.36}\text{Si}_{0.64}$ / $85\text{\AA}$ Si	0.164
c	$46\text{\AA}$ $\text{Gc}_{0.38}\text{Si}_{0.62}$ / $85\text{\AA}$ Si	0.225
d	$47\text{\AA}$ $\text{Gc}_{0.38}\text{Si}_{0.62}$ / $84\text{\AA}$ Si	0.282
e	$48\text{\AA}$ $\text{Gc}_{0.39}\text{Si}_{0.61}$ / $84\text{\AA}$ Si	0.329

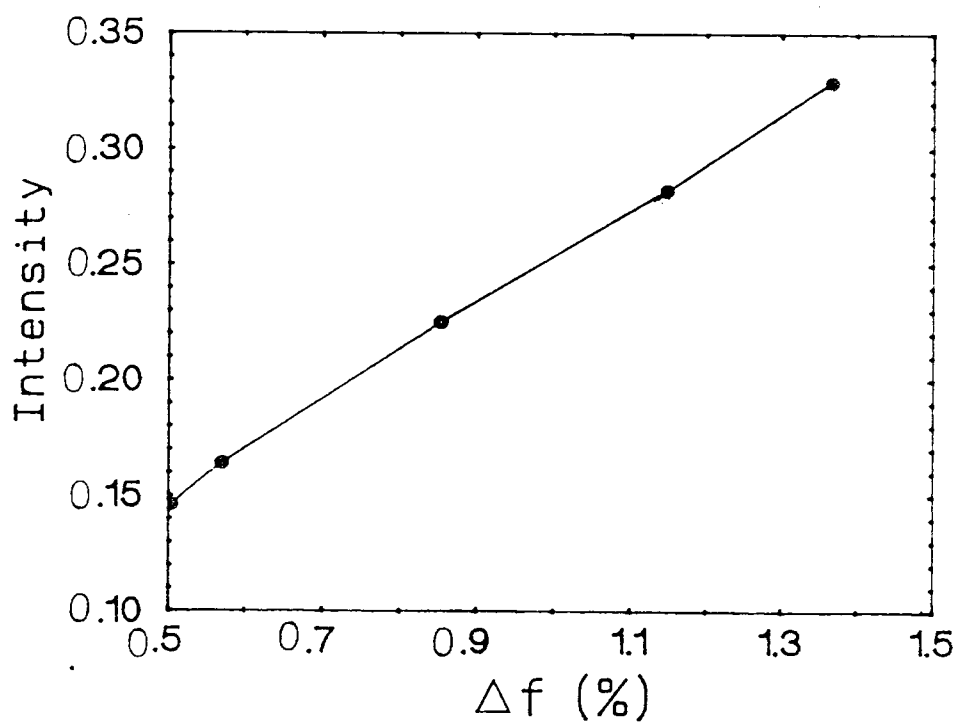


图 5.11 图 5.10 中零级峰最近邻振荡条纹相对零级峰的强度与 Δf 的关系

是条纹的强度起了变化, 而其间距几乎没有发生变化。这是因为条纹间距反映的是超晶格的平均周期厚度, 即(5.1)式中的 t_p 应为所有周期的平均厚度。由于A、B两区的周期厚度相差极小, 因而B区周期数量的多少对于平均周期厚度的影响也极小。但图中卫星峰的峰位却由于B区周期数的增加引起平均失配下降, 逐渐向高角区移动。

振荡条纹的分布也受到B区两侧A的影响。图5.7和图5.8分别给出了用表5.5和表5.6中的参数模拟得到的摇摆曲线。可以看到, 当B区的周期数较多时, 两侧A区周期数的分布是否对称对摇摆曲线的影响甚微, 各曲线仅存在一些细小的差别(图5.7), 但当B区的周期数变得较小时, 这种影响却是非常明显的(图5.8), 显然当两侧A区的周期数分布不对称时, 在卫星峰主峰两侧的振荡条纹强度发生了相应的变化。

在上面的讨论中, B区相对衬底的失配均小于A区。如果B区的平均失配大于A区, 则振荡条纹的组态和分布会有所变化。图5.9给出了表5.7中所示结构参数模拟计算得到的一组摇摆曲线。与前面讨论的摇摆曲线相比, 最大的差异就是振荡条纹从卫星峰的低角度一侧转移到了高角度一侧。这样, 根据振荡条纹所在的位置, 就可以直接判断B区相对A区平均失配的变化情况。

振荡条纹的强度则与A区和B区相对衬底的平均失配之差 Δf 有关。图5.10给出了用表5.8中参数模拟得到的一组摇摆曲线。这里, 各曲线的差异仅来自B区平均失配的变化。可以看到, 振荡条纹相对其依附的卫星峰主峰的相对强度有比较明显的变化。图5.11给出了上图中零级峰左侧最近邻振荡条纹相对零级峰主峰的强度随 Δf 的变化情况, Δf 越大, 振荡条纹强度越大。这是显而易见的, 因为当 Δf 越小时, A区与B区的结构就越接近, 超晶格越趋于完美, 从而这些条纹的强度就越弱。

§5.4 结论

X射线双晶衍射摇摆曲线结合X射线衍射动力学理论模拟是研

究超晶格结构不完美性的一种有效手段。对摇摆曲线精细结构的分析可获得样品许多细结构的信息。在超晶格中,出现较多的一类不完美性就是层厚与成份的变化。这种变化一般由生长条件的波动所造成,在实际中时有发生,因而弄清结构的变化情况对于指导生长,获得高质量的样品有重要意义。

在本章中,我们对 GeSi/Si 超晶格双晶衍射摇摆曲线中出现的两类现象——卫星峰的分裂和卫星峰伴有强烈的振荡条纹的现象及其所对应的结构不完美性进行了研究。得到卫星峰的分裂是由于超晶格的结构参数在生长过程中发生了一次突变所致,而卫星峰一侧的振荡条纹是由于样品结构参数的变化形成 A_1BA_2 型结构所致。在第一种情形下,如果结构参数的变化很小时,并不会引起卫星峰的分裂,而仅使得卫星峰出现不对称的宽化^[102]。随着变化的增大,由于结构参数的变化形成的两部分的衍射波之间产生较强的干涉作用,使衍射峰严重变形。当结构参数的变化达到一定程度时,则能使卫星峰分裂。在第二种情形下,振荡条纹与 B 区的周期数,相对 A 区的平均失配变化有很大关系,而与 A_1 、 A_2 两区中周期数的分布是否对称关系不大,只有在 B 区周期数很小时,这种分布的影响才比较明显。当 B 区相对衬底的平均失配小于 A 区时,振荡条纹主要出现在卫星峰的低角度一侧,而当 B 区相对衬底的平均失配大于 A 区时,振荡条纹出现在卫星峰的高角度一侧。研究表明,观察到的振荡条纹实际上是由于干涉而得到加强的 Pendelösung 条纹,其间距决定于超晶格的平均周期厚度。当 A、B 两区的相对变化减小时,摇摆曲线趋于接近完美超晶格的摇摆曲线,振荡条纹逐渐减弱。振荡条纹越强,表明 A 区和 B 区结构差别越大。从振荡条纹出现的位置,条纹之间的距离以及其强度分布等,我们可以得到样品结构参数的变化趋势和变化大小等重要结果。

第六章 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}/\text{GaAs}$ 台阶型多量子阱的研究

§ 6.1 引言

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 多量子阱 (MQW) 材料在红外光电器件的研究中越来越受到人们的重视。最近的一些研究表明,当 MQW 的结构对称性被打破后,其子带光跃迁的二阶非线性光学效应,可能比体材料高约 3 个数量级^[109],而且由于某些禁戒跃迁被打破,使得 MQW 具有成为新的中远红外激光光源的可能^[110, 111]。这种材料的光电性能强烈地依赖于它们的结构及结构的完美性,如势阱及势垒的宽度、成份及它们的均匀性等,因而分析材料的真实结构参数及完美性,并以此为依据来优化生长条件,获得理想的结构具有重要意义。

使 MQW 具有非对称结构的方法之一是构成台阶型的量子阱结构。图 6.1 是这种结构的能带示意图。本章中,我们对设计用于产生二阶非线性光学效应的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}/\text{GaAs}$ 台阶型多量子阱结构进行 X 射线双晶衍射研究。把样品结构参数的变化与生长参数的变化联系起来考虑,分析了二个三元化保合物层的成份对摇摆曲线的影响,成功地获得了对实验曲线的拟合,并得到了样品真实结构参数偏离设计结构的原因这一结果。通过对一个简单结构的分析,证明了这一方法的有效性。

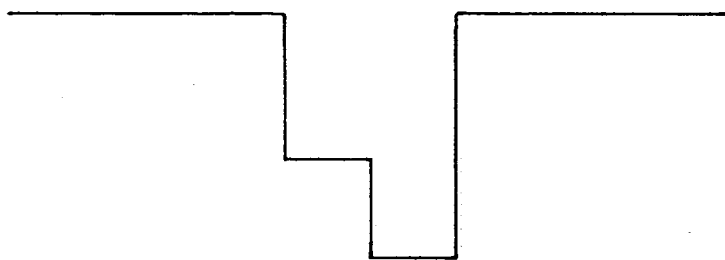


图 6.1 台阶型 MQW 的能带结构示意图

§ 6.2 衍射运动学理论分析

对一个具有三层重复结构的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}/\text{GaAs}$ 多量子阱,若周期数为 N ,则总层数为 $3N$ 。用 t_a, t_b 和 t_c 分别表示三个组元层的厚度,那么按照 Speriosu 的衍射运动学理论,由 (1.1) 式,总的衍射振幅 E 可表示为:

$$E = i \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} \sum_{j=1}^{3N} a_j \exp[-i(A_j Y_j + \phi_j)] \frac{\sin A_j Y_j}{Y_j} \quad (6.1)$$

式中各参数的意义及表达与 (1.1) 式中相同。对点阵近乎匹配的 $\text{AlGaAs}/\text{GaAs}$ 系统,一般有 $\varepsilon'' = 0$, 于是 (1.4) 式变为:

$$\Delta\omega = \theta - \theta_B + \varepsilon^+ (\cos^2 \varphi \tan \theta_B + \sin \varphi \cos \varphi) \quad (6.2)$$

忽略吸收,则由 (6.1) 式,有:

$$E = i \sqrt{\frac{\gamma_0}{|\gamma_h|}} e^{-i\beta} F_s \frac{\sin N(A_a Y_a + A_b Y_b + A_c Y_c)}{\sin(A_a Y_a + A_b Y_b + A_c Y_c)} \quad (6.3)$$

其中:

$$\beta = (N-1)(A_a Y_a + A_b Y_b + A_c Y_c) + A_a Y_a \quad (6.4)$$

$$F_s = \frac{\sin A_a Y_a}{Y_a} + e^{-i(A_a Y_a + A_b Y_b)} \frac{\sin A_b Y_b}{Y_b} + e^{-i(A_a Y_a + A_b Y_b + A_c Y_c)} \frac{\sin A_c Y_c}{Y_c} \quad (6.5)$$

(6.3) 式中, $e^{-i\beta}$ 是一个位相函数,而式中的正弦函数项是一个振荡函数, F_s 可以看作是一个周期的结构因子。因此,当

$$A_a Y_a + A_b Y_b + A_c Y_c = i\pi (i=0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (6.6)$$

时, E 有极大值。该极大值对应摇摆曲线中的第 i 级衍射卫星峰。由相邻两级卫星峰的角距离 $\Delta\theta_p$, 可求得 MQW 的周期厚度 t_p 为:

$$t_p = t_a + t_b + t_c = \frac{\lambda |\gamma_h|}{\Delta\theta_p \sin 2\theta_B} \quad (6.7)$$

在形式上该式与由二元超晶格得到的表达式(1.9)完全一致。

衍射峰的强度 $I = |E|^2$, 因而由(6.3)式, I 正比于 $|F_s|^2$,

$$I \propto |F_s|^2 = F_s \cdot F_s^* = T_a^2 + T_b^2 + T_c^2 + 2T_a T_b \cos(A_a Y_a + A_b Y_b) + 2T_b T_c (\cos(A_b Y_b + A_c Y_c) + 2T_a T_c \cos(A_a Y_a + A_c Y_c)) \quad (6.8)$$

式中, $T_k = \sin A_k Y_k / Y_k$ ($k=a, b, c$)。在衍射极大值处, (6.5)式成立, 因而上式变为:

$$F_s = T_a^2 + T_b^2 + T_c^2 + 2(-1)^i [T_a T_b \cos(A_c Y_c) + T_a T_c \cos(A_b Y_b) + T_b T_c \cos(A_a Y_a)] \quad (6.9)$$

其中 i 为衍射级数。上式中, 前三项分别为三个组元层独自对衍射强度的贡献, 后三项为两两之间的交叉项, 反映层之间的干涉。从中我们看到, 三个组元层对衍射强度的贡献由于交叉项的存在变得很复杂。除了结构的周期 t_p 可由实验曲线直接获得外, 要获得其它结构参数的信息, 必须对实验曲线进行理论模拟。但由于可调结构参数多, 使得理论模拟也变得很难, 关于这一问题的解决, 我们将在下面讨论。如果 MQW 的周期较多, 总厚度较大, 反射率超出衍射运动学适用范围 (6%) 时, 用上述运动学理论模拟将带来较大误差, 这时必须使用动力学理论。

§ 6.3 实验与结果

样品由分子束外延技术生长, 衬底为 GaAs(001), 设计结构为 100 周期。参数如下:



生长时, 采用两个独立的 Al 源分别生长二个三元化合物层。X 射线双晶衍射采用 $\text{CuK}_{\alpha 1}$ 辐射, 反射型 ($m, -n$) 排列, 第一晶体为 Si(111) 单晶, 衍射面为 (111) 面。实验记录了样品的 (002) 衍射摇摆曲线。由于 Si(111) 衍射和 GaAs(002) 衍射的 Bragg 角非常接近 (分别为 14.2° 和 15.8°), 因而由于第一晶体与样品的波长色散排列引起的峰形变化极其

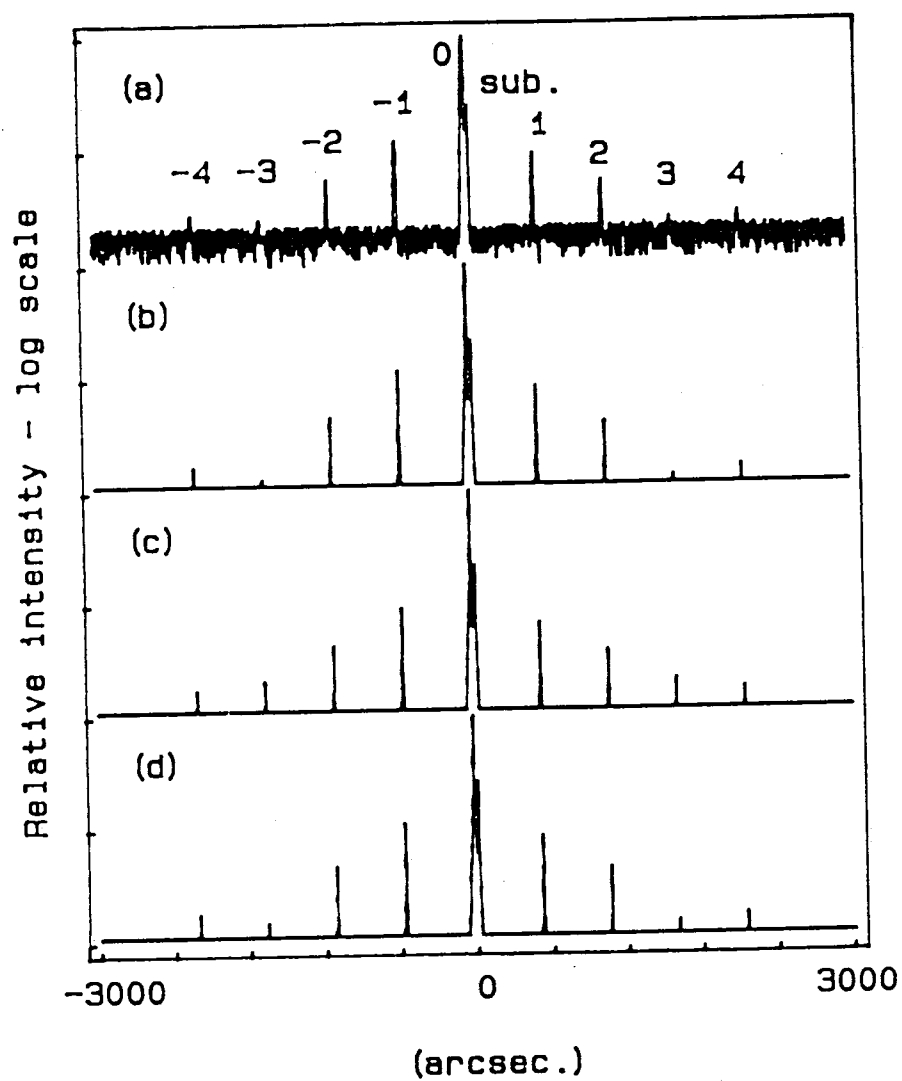


图 6.2 1° 样品的 (002) 衍射摇摆曲线 (a) 实验; (b)、(c)、(d) 理论模拟

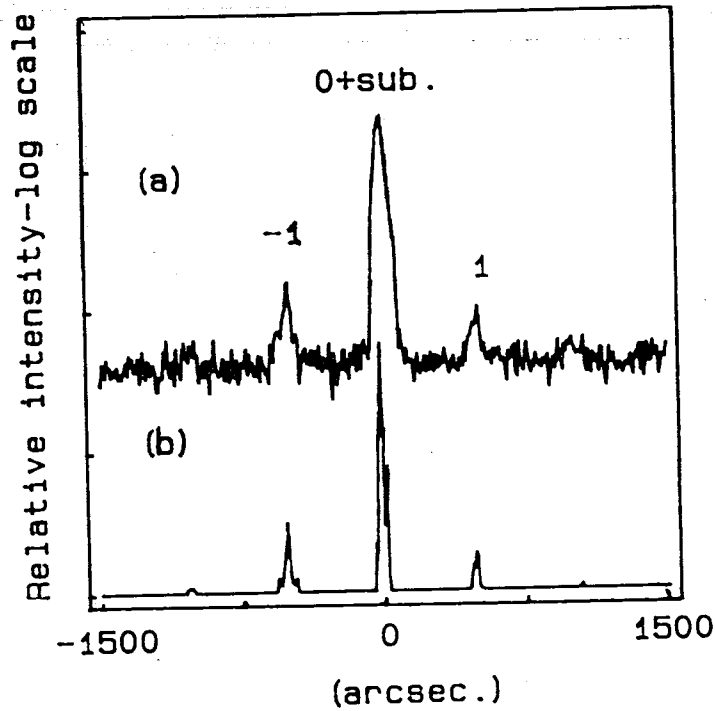


图 6.3 2# 样品的 (002) 衍射摇摆曲线 (a) 实验; (b) 理论模拟

微小, 可以忽略不计。

图 6.2 和图 6.3(a) 分别是 1# 和 2# 样品的实验摇摆曲线。可以看到, 图 6.2(a) 中有 8 个尖锐的卫星峰出现。这表明 1# 样品有很高的结晶质量, 均匀的结构和突变的界面。卫星峰的间距 $\Delta\theta_p$ 测得为 $545''$ 。由 (6,7) 式, 样品的周期 t_p 为 $303\text{\AA}$, 略大于设计结构的周期 $300\text{\AA}$ 。相反, 图 6.3(a) 中仅有两个较宽的 ± 1 级卫星峰出现, 且 -1 级峰的两侧有次极大出现。这与 Lyons^[102] 等人在对层厚与成份随机变化的 GeSi/Si 超晶格研究时观察到的现象非常相象, 从而我们推断 2# 样品可能具有不均匀的膜厚与成份。其 ± 1 级卫星峰极大之间的角距离测得为 $1000''$, 从而卫星峰平均间距 $\Delta\theta_p$ 约为 $500''$, 对应样品的平均周期约为 $330\text{\AA}$, 比设计结构的 $300\text{\AA}$ 大了 10%, 可见偏离设计结构较为严重。

§6.4 动力学模拟分析

对我们这样一个特殊的具有三层重复结构的样品,有 5 个未知的结构参数需要确定,即三个组元层的厚度 t_a, t_b, t_c 和二个三元化合物层的成份 x 和 y 。下面为了易于区别,分别记 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ 和 GaAs 层的厚度为 t_x, t_y 和 t_0 。从实验结果,我们已确定了样品的周期 $t_p = t_x + t_y + t_0$,从而 t_x, t_y 和 t_0 三个变量中只有两个是独立的。如果零级峰的位置可以确定的话,那么由零级峰与衬底峰之间的角距离 $\Delta\theta_0$,我们可以确定一个周期的平均有效失配为^[121] :

$$\langle f^* \rangle = -\text{Ctg}\theta_B \cdot \Delta\theta_0 \quad (6.10)$$

在外延膜完全共格生长的条件下,完全弛豫状态时的平均失配可由下式求出:

$$\langle f \rangle = \frac{1-\nu}{1+\nu} \langle f^* \rangle \quad (6.11)$$

其中 ν 为泊松比。从而一个周期的平均 Al 含量 x 为:

$$x = \frac{xt_x + yt_y}{t_p} = \frac{a_0}{\Delta a} \langle f \rangle = \frac{1-\nu}{1+\nu} \frac{a_0}{\Delta a} \text{Ctg}\theta_B \cdot |\Delta\theta_0| \quad (6.12)$$

式中, a_0 为 GaAs 的点阵参数, Δa 为 AlAs 与 GaAs 的点阵参数之差, θ_B 为衬底 Bragg 角。对 (002) 衍射的情形, $\theta_B = 15.814^\circ$ 。对 GaAs 系统, ν 近似为 0.3, 因而有:

$$x = 0.00685 \Delta\theta_0 \quad (6.13)$$

式中 $\Delta\theta_0$ 的单位为秒。那么,由 (6.12) 式, x, t_x, y, t_y 4 个变量中也只有 3 个是独立的。从 (6.13) 式我们发现,当 x 在 0.2 附近时, $\Delta\theta_0$ 仅为 $20''$ 左右,非常靠近衬底峰。因而对我们的样品,在实验中零级峰的位置不一定能准确确定。这时,所能获得的信息只有周期 t_p ,从而有 4 个变量需要确定。在模拟摇摆曲线时,由于可调参数太多,困难也就很大。为了解决这一问题,必须作另外一些考虑。

正如 Lyons^[102] 和 Barnett^[112] 等人的研究表明,为了获得理论模拟曲线与实验摇摆曲线的最佳拟合,有必要把层厚与成份联系起来考虑。这是因为每一层的结构参数的变化很可能是由分子束外延生长过

程中束流的波动引起的,因而 x 和 t_x , y 和 t_y 也可认为是相关的。这样独立变量的数目就可减少两个,使得问题变得相对简单一些。在下面的讨论中,我们假设层厚的变化正比于束流的变化,那么,在生长一个厚度为 t 的 $\text{Al}_z\text{Ga}_{1-z}\text{As}$ 层时,如果 Al 束流的百分比变化为 m ,它引起的层厚变化 Δt 和成份变化 Δz 分别为:

$$\Delta t = mzt \quad (6.14)$$

$$\Delta z = \frac{(1-z)\Delta t}{t + \Delta t} = \frac{(1-z)mz}{1 + mz} \quad (6.15)$$

如果 Ga 束流变化 m ,则它引起的层厚及成份变化分别为:

$$\Delta t = (1-z)mt \quad (6.16)$$

$$\Delta z = \frac{-z\Delta t}{t + \Delta t} = \frac{-mz(z-1)}{1 + (1-z)m} \quad (6.17)$$

可以看到,两种情形下,成份的变化 Δz 都与层厚 t 无关。图 6.4 和图 6.5 给出了这两种情况下 Δt 和 Δz 随 m 的变化关系。显然, Δt 随 m 的增加始终呈线性增加。在 Al 束流变化时,成份的变化 Δz 随 m 的增加近似线性增加,而在 Ga 束流变化时, Δz 随 m 的增加近似于线性减小。

另外一个需要考虑的问题是三个三元化合物层,即势垒层和台阶阱层的成份是否可以分别确定。为此我们先分别考察一下 x 和 y 对摇摆曲线的影响。我们分别计算了 (002) 衍射情形下, x 和 y 分别独立变化时的摇摆曲线。图 6.6 给出了 x 和 y 独立变化时, ± 1 级和 ± 2 级卫星峰相对零级峰的强度的变化情况。很明显, ± 1 级卫星峰的相对强度对 x 和 y 的变化都非常敏感。而且 x 和 y 的变化对 ± 1 级卫星峰强度的影响正好相反,即随着 x 的增加, ± 1 级卫星峰的强度也增加,而随着 y 的增加,它们的强度反而减弱。相对 ± 1 级峰而言 ± 2 级卫星峰对 x 和 y 的变化不太敏感,但它们的强度随 x 和 y 的变化还是有所不同。这样,我们在模拟时就可以以此为依据来修正模拟参数,从而独立地确定出 x 和 y 。

依据以上的准备工作,我们对实验摇摆曲线图 6.1(a) 和图 6.2(a) 进

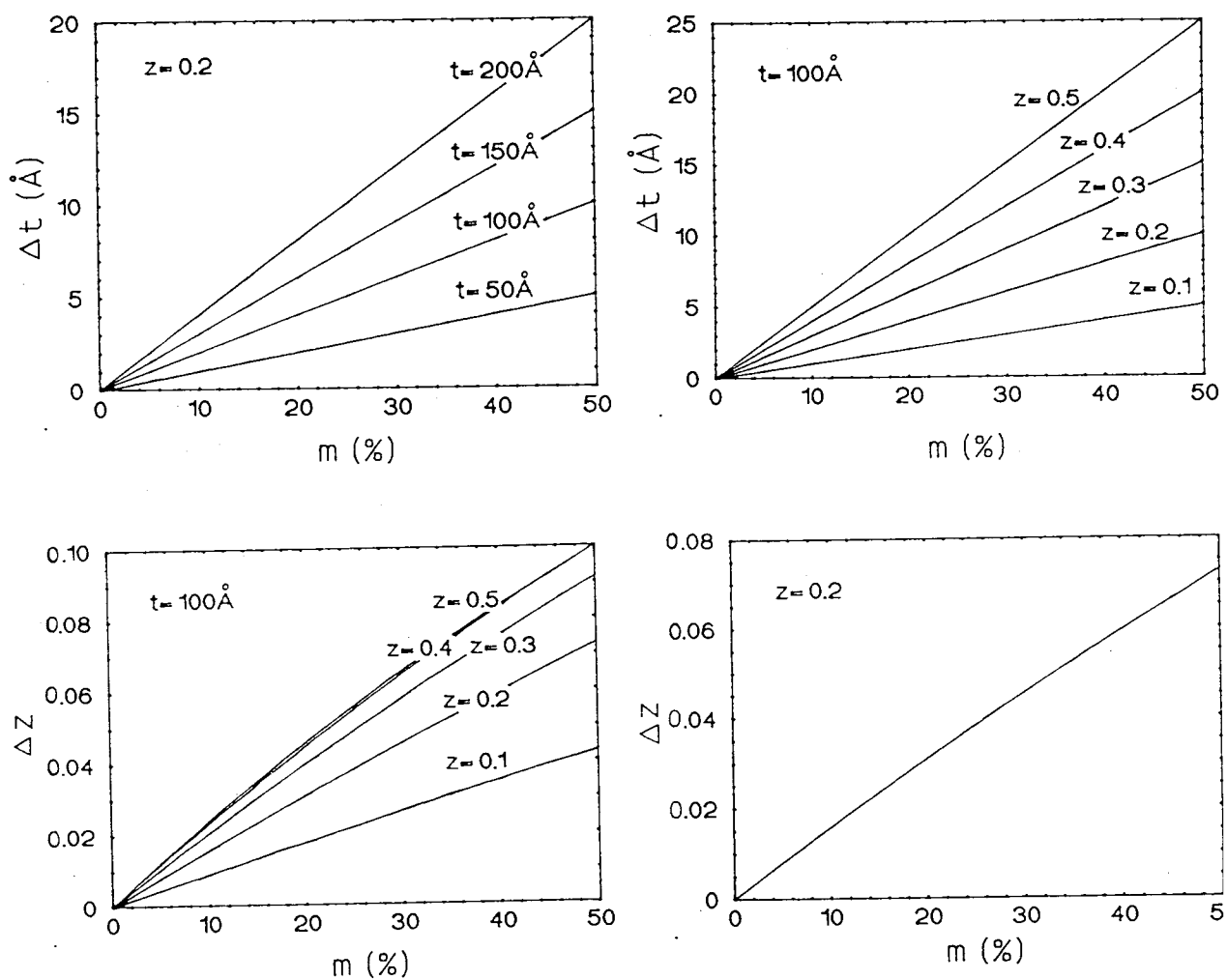


图 6.4 Al 束流变化时，其变化量 m 与 (a)、(b) 层厚变化 Δt 及 (c)、(d) 成份变化 Δz 关系。

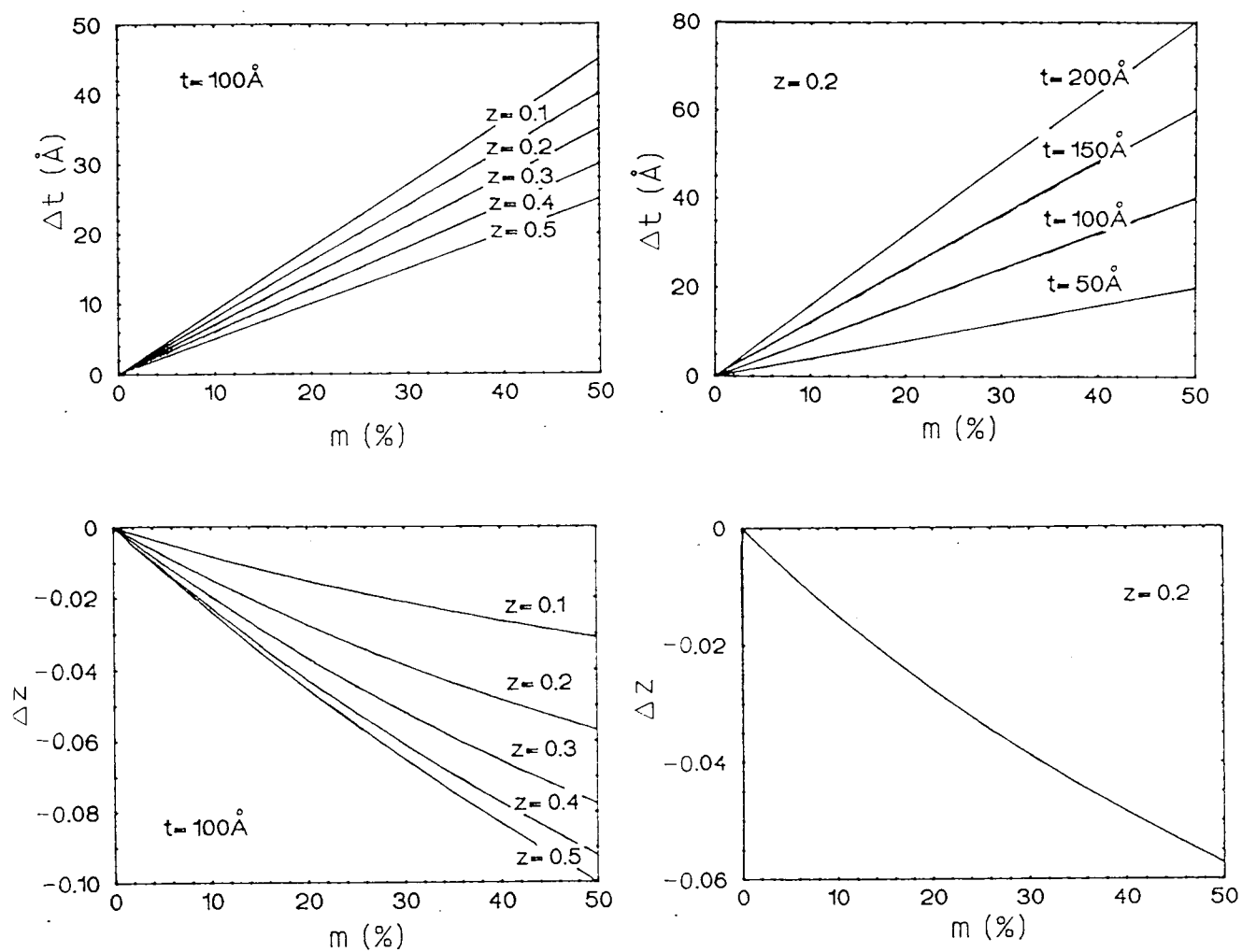


图 6.5 Ga 束流变化时，其变化量 m 与 (a)、(b) 层厚的变化 Δt 及 (c)、(d) 成份的变化 Δz 的关系

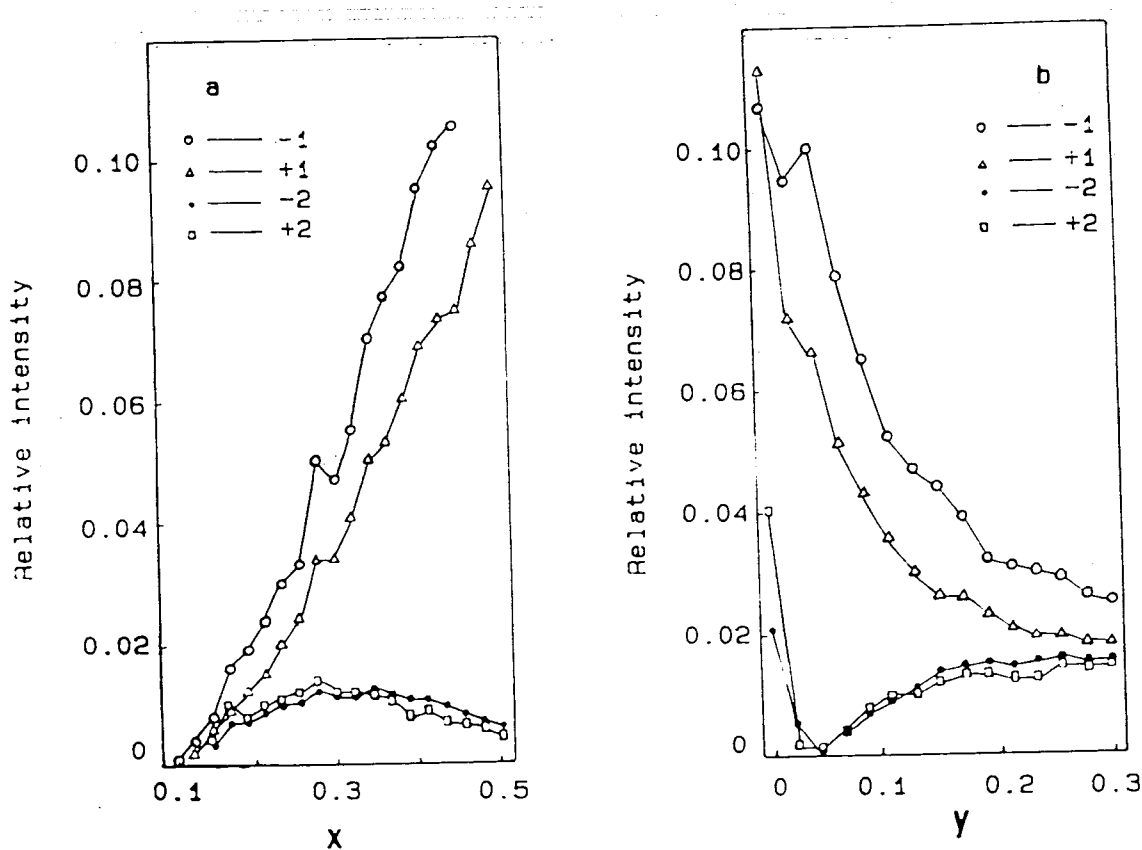


图 6.6 x 和 y 对 (002) 衍射摇摆曲线 ± 1 级卫星峰和 ± 2 级卫星峰强度的影响

行了理论模拟计算。从图 6.1(a) 已知 1[#] 样品的周期比标称值 300Å 大约 1%, 产生这一微小变化的原因可能是样品生长时 Ga 束流或者从二个 Al 源中的某一个发出的 Al 束流略大于其期望值所致。为了判别层厚增大的起因, 我们分别考虑上述三种情形。

根据实验曲线测得的 MQW 周期, 图 6.1(b) 是假设了生长时 Ga 束流比期望值大 1.4%, 即用下列结构参数计算得到的模拟摇摆曲线:

201.9Å Al_{0.297}Ga_{0.703} As/50.5Å Al_{0.148}Ga_{0.852} As/50.7Å GaAs

为了更好的比较模拟曲线与实验曲线的拟合情况, 表 6.1 和表 6.2 分别

给出了实验曲线和模拟曲线中各卫星峰的峰位和相对零级峰的相对强度值。可以看到, 曲线(b)中各级峰的峰位都与实验曲线的拟合的很好, 而在峰强方面, ± 1 级卫星峰的强度大于实验值, 其它各级卫星峰的强度则小于实验值。很显然, 这一情形与实际不符。

表 6.1 图 6.1 中各曲线的峰位值

曲线	卫星峰级数								
	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4
a	-2204	-1160	-1116	-572	-28	516	1060	1608	2152
b	-2206	-1160	-1116	-572	-28	516	1060	1608	2152
c	-2206	-1162	-1116	-572	-28	516	1060	1608	2152
d	-2204	-1160	-1116	-572	-28	518	1060	1608	2152

表 6.2 图 6.1 中各曲线卫星峰相对零级峰的相对强度

	卫星峰级数								
	-4 ($\times 10^{-3}$)	-3 ($\times 10^{-3}$)	-2 ($\times 10^{-2}$)	-1 ($\times 10^{-2}$)	0 (x1)	1 ($\times 10^{-2}$)	2 ($\times 10^{-2}$)	3 ($\times 10^{-3}$)	4 ($\times 10^{-3}$)
a	3.34	2.54	1.34	4.47	1	3.08	1.17	2.47	3.12
b	3.03	2.07	1.26	4.77	1	2.99	1.06	2.20	2.86
c	3.22	4.16	1.14	3.34	1	2.15	0.96	4.09	3.17
d	3.36	2.56	1.34	4.48	1	3.06	1.19	2.50	3.10

如果周期的微小增加是由生长台阶阱时 Al 束流的增加所造成的,那么这一 Al 束流应当比期望值大 41.3%。图 6.1(c) 给出了用对应这一变化的结构参数计算得到的模拟摇摆曲线,即用如下参数:

$$200\text{\AA} \text{ Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/53.1\text{\AA} \text{ Al}_{0.212}\text{Ga}_{0.788}\text{As}/50\text{\AA} \text{ GaAs}$$

从表 6.2 可以看到,该曲线中 ± 3 级卫星峰和 ± 4 级卫星峰的相对强度大于实验值,而其它各级卫星峰的峰强都小于实验值。显然,这种情形也与实验曲线不符合。

图 6.1(d) 所示是用下述一组结构参数计算得到的模拟摇摆曲线,即:

$$203\text{\AA} \text{ Al}_{0.311}\text{Ga}_{0.689}\text{As}/50\text{\AA} \text{ Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}/50\text{\AA} \text{ GaAs}$$

这一结构假设在生长势垒层时,Al 束流比期望值大 5.2%。可以看到,这一曲线与实验曲线图 6.1(a) 在峰位和峰强上都拟合的很好(见表 6.1 和表 6.2),因而可以认为上述参数反映了样品的真实情况。从而,我们可以判定,层厚的增大是由于生长势垒层时,Al 束流变化所致。

对 2[#] 样品,实验曲线图 6.2(a) 中高级卫星峰的消失和 -1 级卫星峰两侧次极大的出现都表明该样品的层厚和化学成份可能有随机的波动^[102]。根据 ± 1 级卫星峰的间距得知其平均周期比设计值增大约 10%,即 30 $\text{\AA}$ 。由 (6.14) - (6.17) 的表达式,可以知道,周期 1 $\text{\AA}$ 的变化对应生长台阶阱时 Al 束流 13.3% 的变化,或者生长势垒时 Al 束流 1.67% 的变化,若为 Ga 束流变化,则其变化量仅需 0.43%。从而对 30 $\text{\AA}$ 这样一个大的变化,合理的推测应当是主要由 Ga 束流的变化所致。图 6.2(b) 是在这种假设的基础上,用下述增均结构参数计算得到的摇摆曲线。其平均结构参数为:

$$218\text{\AA} \text{ Al}_{0.275}\text{Ga}_{0.725}\text{As}/55.5\text{\AA} \text{ Al}_{0.135}\text{Ga}_{0.865}\text{As}/56.5\text{\AA} \text{ GaAs}$$

同时,我们还假设了层厚与成份的随机变化是由 Ga 束流在其平均值附近存在 $\pm 5\%$ 的随机变化造成的。从上述平均结构参数,平均 Ga 束流比期望值大 13%,而 Ga 束流在其平均值附近 $\pm 5\%$ 这一变化范围的选择则是由对实验曲线的最佳拟合结果确定的。可以看到,图 6.2(b) 与

图 6.2(a) 在峰位, 峰形及相对强度诸方面都拟合的非常接近, 从而表明上述假设接近样品的真实情况。同时, 也判明了 2[#] 样品平均层厚增大是由于生长过程中 Ga 束流比期生值大 13% 所致, 层厚与成份的随机变化则是由于 Ga 束流在其平均值附近 +5% 的变化所致。

§ 6.5 讨论

如上所述要获得层厚和成份均匀, 且接近设计参数结构的样品, 需要对生长条件精确控制, 但要做到这一点实际上是不容易的。因而就有必要根据实验结果判断生长参数的实际情况, 为优化和控制生长参数提供必要的信息。上述结果说明 X 射线双晶衍射技术是目前可以给出束流变化定量描述的实验技术之一。下面我们通过一个简单结构的样品来证明其有效性。

样品设计结构如下:

2000Å $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ /150Å $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ /2000Å $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$

衬底为 GaAs(001)。其中 InGaAs 层由于与 GaAs 有较大的点阵失配, 因而 In 含量的微小变化就足以对其应变产生比较明显的影响, 而影响其成份与厚度的可能因素就是生长时 Ga 束流或 In 束流的大小。双晶衍射摇摆曲线对上述结构 InGaAs 层的层厚与成份十分敏感^[105,107], 因而非常适合用来研究结构参数的微小变化。

双晶衍射采用 (n, -n) 无色散排列, 第一晶体为 GaAs(001), (004) 反射。采用 $\text{CuK}\alpha_1$ 辐射, 入射光斑由一组狭缝限制在 $0.05\text{mm} \times 0.8\text{mm}$, 这样可以消除样品弯曲和不均匀对摇摆曲线的影响。

表 6.3 No.1 和 No.2 样品 (004) 衍射摇摆曲线的模拟参数。

曲线	结构
图 6.7(b)	2100Å $\text{Al}_{0.204}\text{Ga}_{0.796}\text{As}$ /155Å $\text{In}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{As}$ /2100Å $\text{Al}_{0.204}\text{Ga}_{0.796}\text{As}$
图 6.8(b)	2000Å $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ /151Å $\text{In}_{0.155}\text{Ga}_{0.845}\text{As}$ /2000Å $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$

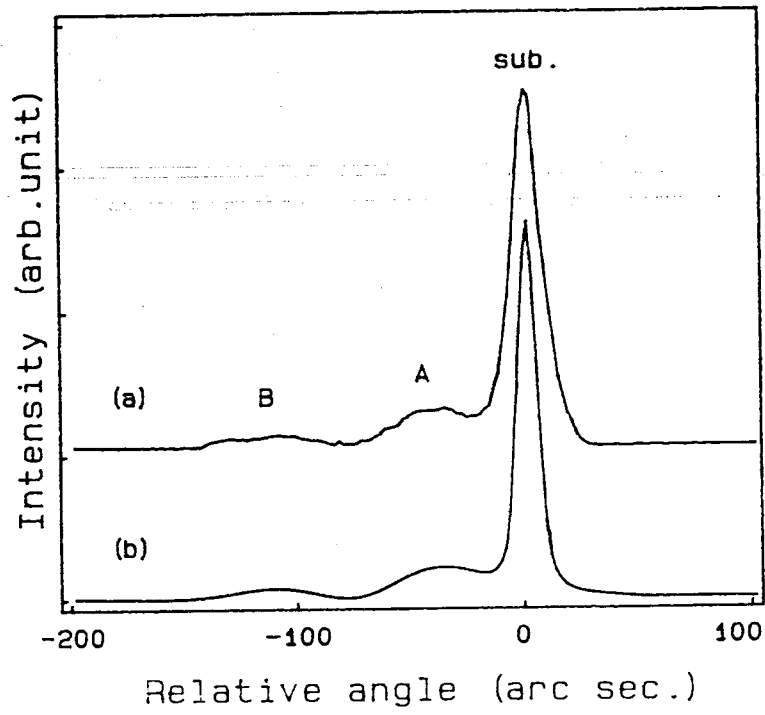


图 6.7 No.1 为样品的 (004) 衍射摇摆曲线 (a) 实验, (b) 动力学模拟

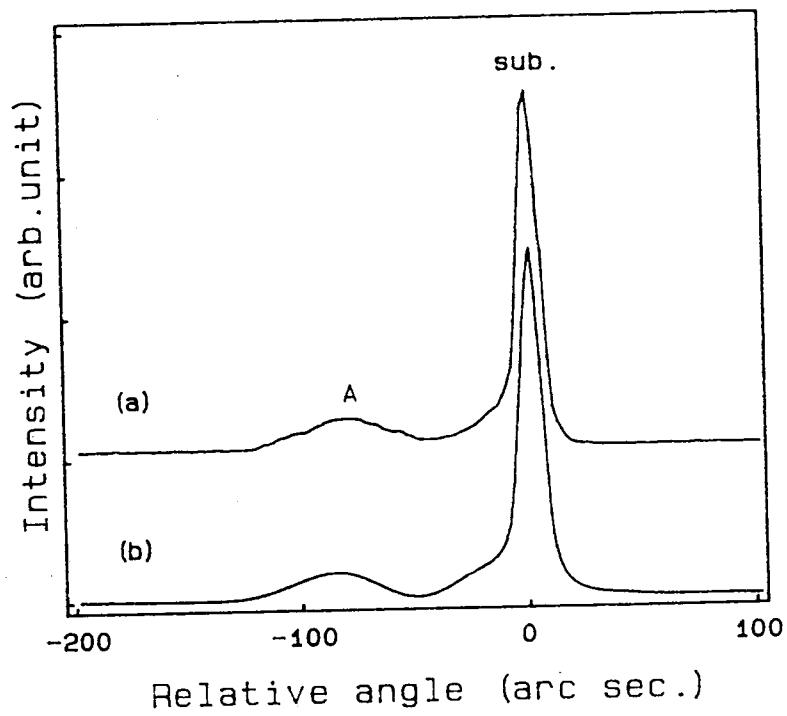


图 6.8 No.2 样品的 (004) 衍射摇摆曲线。(a) 实验, (b) 动力学模拟

首先按照设想生长了一块样品,记为 No.1,图 6.7(a) 给出了该样品的 (004) 衍射摇摆曲线。可以看到,共有 3 个衍射峰出现,其中 sub. 峰为衬底峰,A 和 B 峰为外延膜的衍射峰。由于 InGaAs 与 GaAs 存在较大的点阵失配;且其厚度极薄;显然这两个峰不是对应 InGaAs 层与 AlGaAs 层各自的衍射峰,而只能是由于 InGaAs 薄层的存在,使得底层与顶层 AlGaAs 层的衍射波存在一个位相差,两束波产生干涉的结果。图 6.7(b) 是它的动力学模拟曲线,模拟参数见表 6.3。两条曲线在峰位,峰宽及峰强诸方面都拟合的很好。如果将模拟参数作微小的变动,则可能只有一个外延膜峰出现。继续改变参数,又可能会出现双峰,但各峰在强度及位置上与实验曲线的拟合都不如图 6.7(b) 好,因而可以认为图 6.7(b) 的模拟参数反映了样品的真实情况。从这一结果,我们发现 InGaAs 层的厚度与 In 含量都大于设计值。根据上一节中的分析,与样品的生长联系起来考虑,造成这种结果的可能原因是生长时 In 束流大于期望值约 24%。据此,为获得设计结构,应对 In 束流作相应的修正。修正后,生长了样品 No.2,其 (004) 衍射摇摆曲线见图 6.8(a)。该曲线仅有一个外延膜峰出现,即该样品不满足干涉产生双峰的条件。图 6.8(b) 是它的动力学模拟曲线,模拟参数见表 6.3。该曲线与图 6.8(a) 拟合的非常好。因而所用的模拟参数反映了样品的真实结构。同时可以看到,该样品非常接近设计结构。这表明,通过模拟摇摆曲线对生长参数变化的估测结果是正确的,可以用来指导优化生长参数,以获得满意的结果。

§ 6.6 结论

本章我们对台阶型的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}/\text{GaAs}$ 多量子阱结构的 X 射线双晶摇摆曲线进行了衍射运动学理论分析和衍射动力学模拟计算。结果表明这种结构的衍射卫星峰间距与周期的关系与二元超晶格时的情形相似,满足 (6.6) 式。卫星峰的强度则由于三个组元层衍射波的交互作用变得很复杂。为此在衍射动力学理论模拟实验摇摆曲线时,考虑了生长过程中来自不同束源束流的变化对层厚及成份的

不同影响,并对 x 和 y 值变化对摇摆曲线的影响作了认真的分析。从而获得了对实验曲线的最佳拟合。从模拟结果,我们还得到了引起样品真实结构偏离设计结构的原因。通过跟踪一个简单 AlGaAs/InGaAs/AlGaAs 结构样品的生长条件与结构分析,证实了这一方法可以用来跟踪材料生长工艺,以缩短材料设计周期。值得指出的是,在对外延膜进行结构分析的方法中,X 射线双晶衍射技术是目前可对生长参数的变化作出定量描述的方法,因而有着重要的实际意义。

第七章 Si 上外延 GaAs 薄膜的点阵畸变研究

§ 7.1 引言

Si 和 GaAs 分别是最重要的一类元素和化合物半导体材料。Si 器件和集成电路已十分成熟,得到了广泛的应用。GaAs 则具有 Si 材料所不及的一些光、电性能,尤其在高频和高速器件方面。但是 GaAs 在制备集成光、电器件工艺上还存在较多的困难。把 GaAs 的优异光电性能与 Si 的成熟的工艺结合起来是一个非常有应用前景的热门课题。经过许多研究工作者多年的努力,现在已可以在 Si 上生长出具有较高完美性的 GaAs 单晶^[113, 115],所采用的方法有金属有机化合物气相淀积(MOCVD),分子束外延(MBE),气相外延(VPE)等。但不管用什么办法,由于 GaAs 和 Si 结构参数及性能上的差异,在生长时都存在一些必须克服的困难。

Si 和 GaAs 同属立方结构,但两者的点阵常数差别较大。Si 的点阵常数为 $5.4305\text{\AA}$, GaAs 为 $5.6535\text{\AA}$, 两者失配达 4.1%。因而,生长时会出现大量的失配位错。此外, GaAs 与 Si 的热膨胀系数相差也很大,分别为 $6.80 \times 10^{-6}/\text{K}$ 和 $2.3 \times 10^{-6}/\text{K}$, 因而在高温外延生长后,冷却到室温时,会造成较大的应力。再者, Si 为非极性材料而 GaAs 为极性材料,因而在 Si 上外延生长 GaAs 时很容易出现所谓的反相畴结构。所有这些都是获得高质量的 GaAs 外延膜的不利因素。人们已尝试了许多办法来解决这些困难,并取得了较大的成绩,并且已用 GaAs/Si 材料做出了一些非常有用的器件,如调制掺杂场效应晶体管(MODFETs),光发射二极管(LED)等。这些器件的性能和质量都与生长的 GaAs 薄膜的完美性及应变状态有关。准确地了解并对它们加以控制,对于改进和提高器件性能就显得非常重要。

在以前的工作中^[116, 117],我们用 X 射线形貌及衍射技术对不同生长条件下的 GaAs/Si 材料作了研究,发现晶片存在不均匀弯曲,且与

热应力有关。在 GaAs 膜中还观察到大量的滑移位错。点阵参数的测量表明在平行和垂直于生长面方向上, GaAs 的点阵参数常常小于体材料的值。这表明 GaAs 点阵发生了严重的畸变, 而且不能用四方畸变模型来解释。本章中, 我们通过对一组 GaAs/Si 材料进行详细的 X 射线双晶衍射分析, 提出了一个新的畸变模型, 成功地解释了这一实验现象。

§ 7.2 实验与结果

样品全部采用分子束外延技术生长, 衬底为偏〔110〕方向 4° 角的 Si (001) 单晶。各样品结构如图 7.1 所示。每一样品的生长工艺和结构都不同, 因而 GaAs 薄膜的性能也有所差异。X 射线双晶衍射采用 (m, -n) 排列, 第一晶体为 Si(111) 单晶, (111) 反射。所用光源为 $\text{CuK}_{\alpha 1}$ 辐射, 光斑尺寸为 $0.8\text{mm} \times 0.05\text{mm}$ 。实验测量了各样品的 (004) 和 (224) 衍射摇摆曲线。对非对称的 (224) 衍射, 采用掠入射几何。典型的摇摆曲线见图 7.2 所示。为了确定外延膜与衬底之间可能存在的倾角, 以消除它对实验结果的影响, 这里采用了第四章中的办法, 每一条摇摆曲线都分别在取向角 $\omega = 0^\circ$ 和 180° 测量两次。由两条曲线中测得的外延膜峰 L 与衬底峰 S 的角距离 $\Delta\omega_1$ 和 $\Delta\omega_2$, 确定出由于点阵参数差异及形变造成的外延膜峰与衬底峰的分离 $\Delta\theta$ 及外延膜与衬底的倾角 Ω 分别为:

$$\Delta\theta = \frac{\Delta\omega_1 + \Delta\omega_2}{2} \quad (7.1)$$

$$\Omega = \frac{|\Delta\omega_1 - \Delta\omega_2|}{2} \quad (7.2)$$

对每一个样品, 由一组 (004) 和一组 (224) 衍射, 可分别确定一个 $\Delta\theta_{004}$ 和 $\Delta\theta_{224}$, 由此求得 GaAs 外延膜与衬底 Si 沿生长面方向和垂直生长面方向上的平均失配 $\varepsilon^{\parallel}$ 和 $\varepsilon^{\perp}$ 。它们满足方程^[50]:

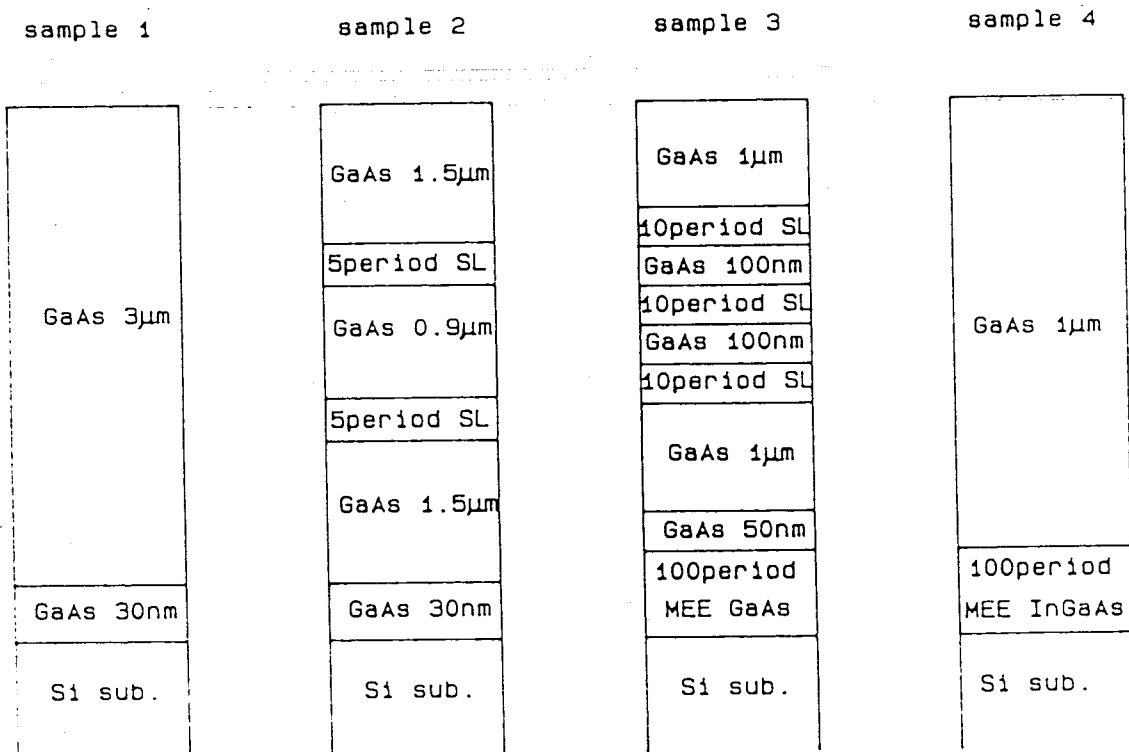


图 7.1 各样品的结构示意图

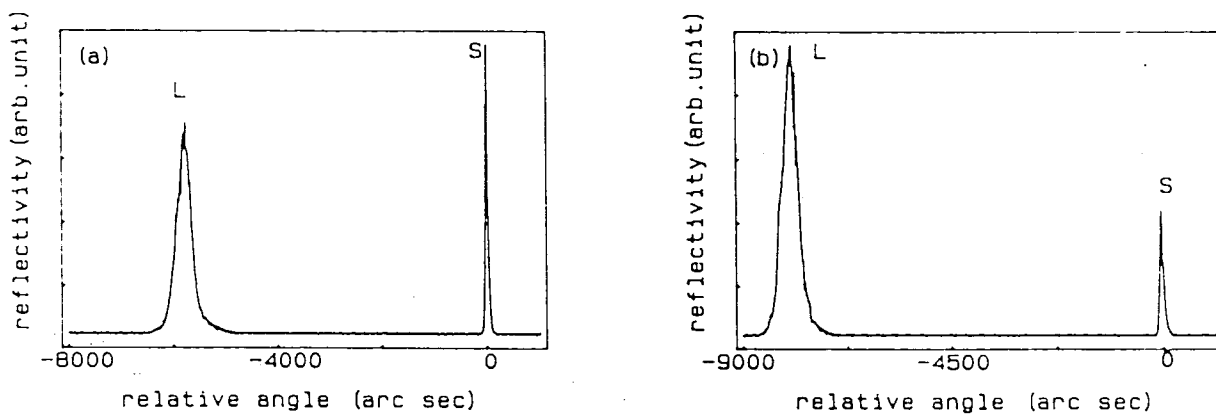


图 7.2 典型的双晶衍射摇摆曲线。S—衬底峰 L—外延膜峰。

(a) 004 衍射, (b) 224 衍射。

$$-\Delta\theta = k_1\varepsilon^\perp + k_2\varepsilon^\parallel \quad (7.3)$$

$$k_1 = \cos^2\varphi \operatorname{tg}\theta_B + \sin\varphi \cos\varphi \quad (7.3a)$$

$$k_2 = \sin^2\varphi \operatorname{tg}\theta_B - \sin\varphi \cos\varphi \quad (7.3b)$$

其中 θ_B 是衬底 Si 的 Bragg 角, φ 是衍射面与样品 (001) 面之间的夹角。对 (004) 衍射, $k_2 = 0$, 于是:

$$\varepsilon^\perp = \frac{-\Delta\theta_{004}}{k_1^{004}} \quad (7.4)$$

再由 $\Delta\theta_{224}$ 可以解得

$$\varepsilon^\parallel = \frac{-\Delta\theta_{224} - k_1^{224}\varepsilon^\perp}{k_2^{224}} \quad (7.5)$$

式中 k_1^{004} 及 k_2^{224} 和 k_{2004} 分别代表 (004) 及 (224) 衍射几何下由 (7.3a) 和 (7.3b) 式得到的 k_1 和 k_2 值。

表 7.1 给出了各样品的 $\varepsilon^\perp$ 和 $\varepsilon^\parallel$ 值。为了便于比较, 在表的最后一列给出了 GaAs 与 Si 体材料的失配 $\varepsilon_v = (a_{\text{GaAs}}/a_{\text{Si}} - 1)$ 。由于 Si 衬底的厚度比 GaAs 膜的厚度大几百倍, 所以我们可以认为样品 Si 衬底的点阵没有发生形变。

表 7.1 实验结果

样品	$\varepsilon^\perp(\%)$	$\varepsilon^\parallel(\%)$	$\varepsilon_v(\%)$
1	4.047	4.068	4.105
2	4.024	4.027	
3	4.101	4.110	
4	3.862	3.897	

§7.3 讨论

从表 7.1 可以看到,样品 3 的 $\varepsilon^{\perp}$ 和 $\varepsilon^{\parallel}$ 都非常接近 ε_v , 这表明该样品中的 GaAs 点阵处于完全应变弛豫的状态,没有残余应力存在,在水平方向和垂直方向都是按照自己固有的点阵常数来生长的。与此不同的是,样品 1, 2 和 4 的 $\varepsilon^{\perp}$ 和 $\varepsilon^{\parallel}$ 值都小于 ε_v 。这表明,这些样品中 GaAs 外延膜的点阵面间距在平行和垂直(001)方向上都变得比体材料的 GaAs 相应的点阵面间距要小。也就是说,这些样品中 GaAs 外延膜的点阵都发生了畸变。这显然不能用四方畸变^[118]来描述,因为在四方畸变模型中,点阵在水平方向压缩(或扩张)后,在其垂直方向必然是扩张(或压缩)。而现在的结果是水平和垂直方向的点阵面间距都受到了压缩。在对类似样品 X 射线形貌研究中,我们发现晶片存在非均匀的弯曲,外延膜中有大量的滑移位错^[116,117]。这两种作用都会使外延膜中产生平行于(001)面的切应力。图 7.3 是样品弯曲部分与切应力的示意图。滑移位错的形成也直接与切应力有关,只有在切应力大于滑移所需要的临界切应力 τ_p 是,才能引起滑移, τ_p 即为 Peierls - Nabarro 力^[119]:

$$\tau_p = \frac{2G}{1-\nu} \exp\left[-\frac{2\pi a}{(1-\nu)b}\right] = \frac{2G}{1-\nu} \exp\left(-\frac{2\pi\omega}{b}\right) \quad (7.6)$$

其中 ν 为泊松比, a 为点阵常数, b 为 Burgers 矢量的大小, G 为切变模量。由此我们推断在 GaAs 外延层膜中,切应力起了重要作用。

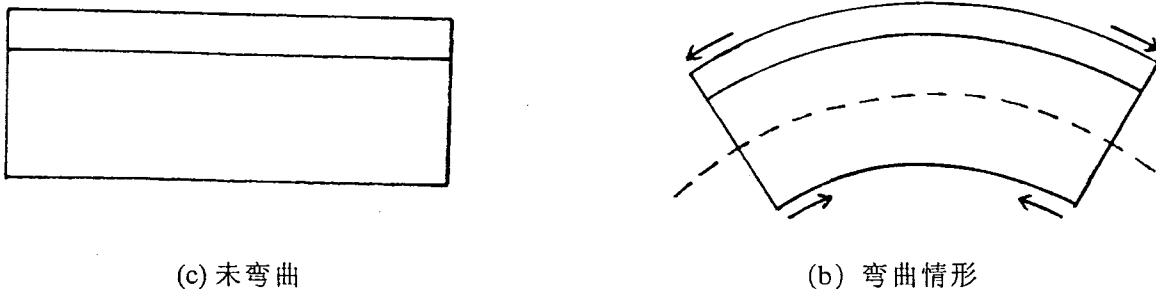


图 7.3 弯曲引起切应力的示意图

GaAs 属立方晶系,其滑移面为 $\{111\}$ 面簇,滑移方向为 $\langle 110 \rangle$ 方向。根据表 7.1 所列结果,同一样品的 $\varepsilon^{\parallel}$ 和 $\varepsilon^{\perp}$ 相差不甚大,为便于分析,我们假设 GaAs 薄膜中无张应力存在,而只有切应力。这时对应的点阵畸变如图 7.4 所示。

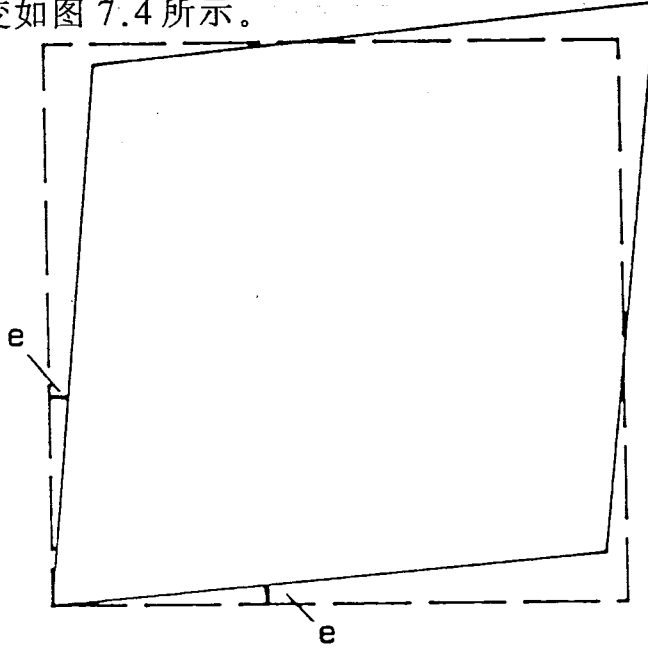


图 7.4 GaAs 点阵的切应变模型

根据晶体弹性理论,这时 GaAs 膜的应变张量可表达为:

$$(e_{ij}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & e \\ 0 & 0 & e \\ e & e & 0 \end{pmatrix} \quad (7.7)$$

其中 e 为切应变。利用图 7.4 所示的应变模型,近似取 $\varepsilon^{\parallel} = \varepsilon^{\perp}$, 则有:

$$\varepsilon = \varepsilon^{\parallel} = \varepsilon^{\perp} = (a_d - a_{\text{Si}})/a_{\text{Si}} \quad (7.8)$$

其中 $a_d = a_{\text{GaAs}} \cos 2e$ 是变形后 GaAs 单胞的点阵面间距。代入上式,则:

$$\varepsilon = \frac{a_{\text{GaAs}}}{a_{\text{Si}}} \cos 2e - 1 \quad (7.9)$$

由于 $\cos 2e \leq 1$, 显然有 $\varepsilon \leq \varepsilon_v$, 即 GaAs 外延层与衬底 Si 之间的失配只可能是小于或等于 GaAs 和 Si 体材料之间的失配。

对我们的样品,取近似值 $\varepsilon = (\varepsilon^{\parallel} + \varepsilon^{\perp})/2$, 则可求得各样品的切应变分

别约为 1.62, 1.89, 0 和 3.42%。图 7.5 给出了 ε 与 e 之间的关系曲线, 可以看到, 当切应变 e 小于 0.7% 时, 测量得到的外延层的平均点阵失配非常接近 ε_v , 即 GaAs 点阵形变很小 (如样品 3), 但随着切应变增大至大于 0.7% 以后, 外延 GaAs 膜与衬底的失配程度将逐渐降低。这是因为当 e 足够小时, 外延 GaAs 膜的形变也很小, 相应点阵面间距也几乎没有变化, 此时 GaAs 膜与 Si 衬底的点阵失配基本接近两者体材料之间的失配。随着 e 的增加, 外延膜点阵的畸变增大, 点阵面间距逐渐变小, 此时 GaAs 膜与 Si 衬底之间的点阵失配将小于两者体材料之间的失配。样品 3 中无切应变存在, 所以失配等于 ε_v 。相反, 样品 4 具有最大切应变, 因而测量得到的失配最小。

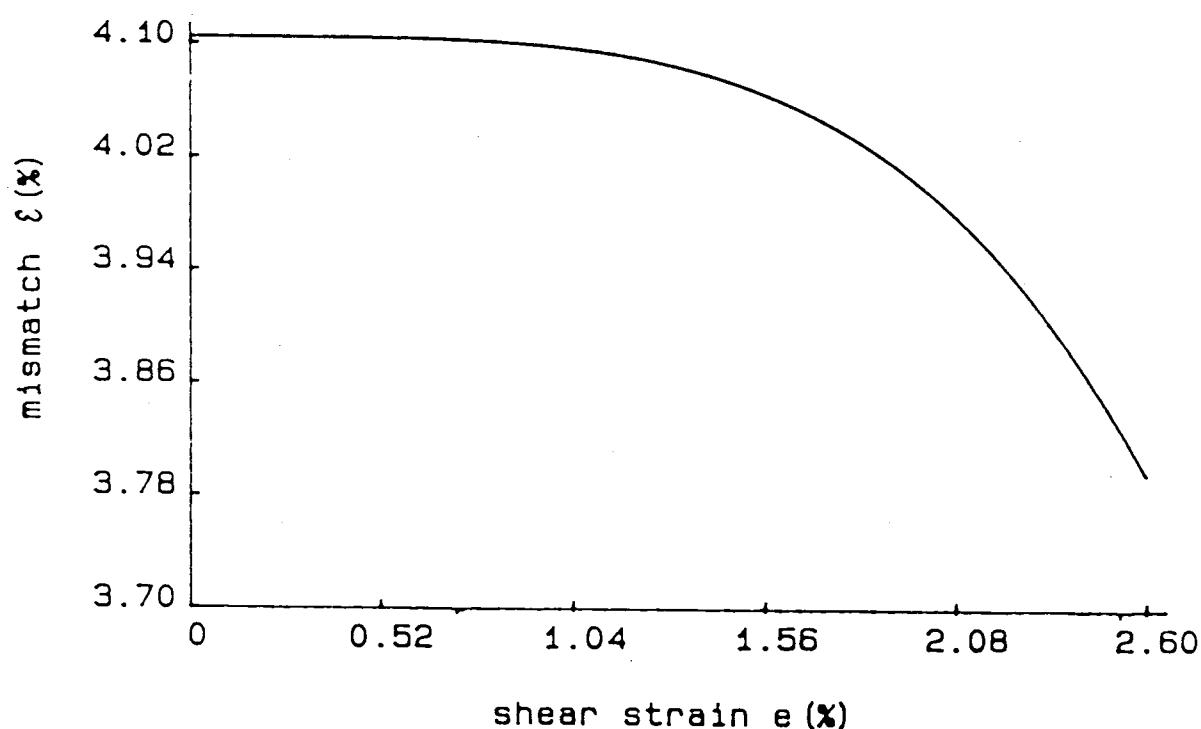


图 7.5 有效点阵失配 ε 与切应变 e 的关系

§7.4 结论

本章我们通过对几个不同结构的 GaAs/Si 样品进行 X 射线双晶衍

射分析,提出了一个外延膜点阵的切应变模型,成功地解释了 GaAs 外延膜的点阵参数的测量值小于体材料的 GaAs 晶体这一现象,并对切应变与点阵失配之间的关系作了讨论。我们发现,在切应变小于 0.7% 时, GaAs 外延膜与 Si 衬底之间的点阵失配接近体材料的 GaAs 与 Si 之间的失配,即 GaAs 点阵畸变很小。但当切应变大于 0.7% 以后,随着切应变的增加, GaAs 点阵的畸变迅速增大,使得点阵面间距减小,因而测量得到的 GaAs 外延膜与 Si 衬底之间的失配减小。值得指出的是,外延膜的物理性能与其内部应变状态有关,因而准确地了解,进而控制 GaAs 外延膜中的应变将有助于改善和提高相应器件的性能。