

InGaAs/GaAs 应变异质结中的 反常离子沟道效应

吴春武 殷士端 张敬平 肖光明

(中国科学院半导体研究所)

刘家瑞 朱沛然

(中国科学院物理研究所)

1988年4月22日收到

用 5.8, 3.0 和 1.2 MeV 的 Li 离子对用 MBE 制备的 $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{As}/\text{GaAs}$ (100) 异质结在 (100) 面中沿 [100] 及 [110] 轴进行角扫描。5.8 MeV 时, [110] 轴外延层与衬底沟道对准角的差值为 0.90° , 从而计算出其晶格失配度为 1.62%。3.0 MeV 时, 背散射角扫描谱出现了严重的不对称现象。若离子以 1.2 MeV 入射, 沟道对准角的差值及衬底沟道的半角宽大大地偏离实际值。本文对以上反常现象从物理机理上进行了分析, 给出了这些反常离子沟道效应产生的原因和条件。

一、引言

近年来, 离子背散射沟道效应已成功地用于分析应变外延层和超晶格的晶格失配^[1,2]。但用 Picraux 等人提出的非垂直轴扫描法测量分析薄层应变异质结或超晶格时, 出现一些反常现象, 如沟道对准角的差值偏小^[3], 衬底角分布谱的半角宽偏大且不对称等等^[4,5]。对这些反常现象目前尚无系统的物理分析。本文着重对不同情况下沟道离子在应变异质结中的运动进行讨论, 并在此基础上解释 $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{As}/\text{GaAs}$ 应变异质结在实验中出现的反常现象。

二、离子在应变异质结沟道中运动的分析

离子在沟道中的运动, 是一种复杂的聚焦、发散的周期振荡。这种振荡随粒子进入样品的深度而急剧衰减, 如对于能量为 MeV 级的粒子, 衰减长度约为 $1000-2000 \text{ \AA}$ ^[4], 因此一般分析沟道粒子的运动都假设粒子是统计平衡的^[6]。在平衡状态下, 沟道角扫描谱对于正、负入射角是对称的。如外延层与衬底的晶轴有扭折角 $\Delta\theta$, 其沟道对准角的差值便直接与之对应, 从而得以测出晶格的应变量^[4,6]。以下称这种情况为正常情况。

然而对于薄层异质结或超晶格, 由于外延层的厚度往往远小于振荡的衰减长度, 统计平衡的假设不能成立。为了对粒子在应变异质结中的运动给出一个明确的物理图象, 从

机制上解释实验中出现的反常效应,下面就各种不同情况分别进行讨论。

讨论之前,首先分析粒子在沟道中运动的波长 λ 。假设一粒子于沟道中心,以临界角

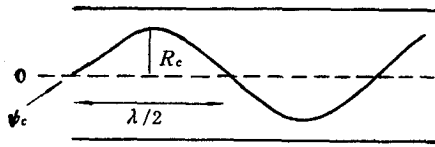


图 1 从沟道中心以临界角 ϕ_c 入射的粒子在沟道中运动轨迹示意图

ϕ_c 入射,其运动轨迹如图 1 所示。图 1 中粒子距沟道中心的最大垂直距离 $R_c = d/2 - u$, 其中 d 为沟道的原子列间距, u 为德拜振幅。由于从入射点到 R_c 的距离为 $\lambda/4$, ϕ_c 为一个很小的角度以及 $d/2 \gg u$, 因此

$$R_c = \frac{\lambda}{4} \operatorname{tg} \phi_c \approx \lambda \phi_c / 4,$$

即

$$\lambda \approx 4R_c / \phi_c \approx 2d / \phi_c. \quad (1)$$

利用这个简单的关系可以估算粒子在沟道中运动的波长。其次,为了讨论方便,先将各变量表述如下: $\Delta\theta$ 为外延层与衬底间的实际扭折角, $\Delta\theta'$ 为外延层与衬底的沟道对准角的测量差值。 ϕ_2 为外延层的 [110] 晶轴方向。设 $\phi_2 = 0$, 则衬底的晶轴方向 $\phi_1 = \Delta\theta$ 。 ϕ_{c1} , ϕ_{c2} 分别为衬底及外延层的沟道临界角。对 $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{As}/\text{GaAs}$ 以及大多数的其他情况, $\phi_{c1} \approx \phi_{c2}$ 。 $\phi_{\frac{1}{2}1}$, $\phi_{\frac{1}{2}2}$ 分别为衬底及外延层的半角宽测量值。 t 为外延层的厚度, L 为外延层的沟道长度, $L = t / \cos\theta$, 其中 θ 为外延层垂直晶轴与非垂直晶轴之间的夹角。

下面将看到,在沟道中作周期运动的粒子的相位,异质结的晶格扭折角与沟道临界角之间的关系是产生反常效应的主要因素。以下就这些因素的不同情况分别进行讨论:

1. $\Delta\theta < \phi_{c1}$

其中又分运动粒子的相位不反过来和反过来两种情况:

$$(1) n\lambda \leq L < n\lambda + \lambda/2$$

n 为正整数时,到达界面的粒子因经过了整数倍波长的距离,其相位与初入射时一致。如从正角度向负角度进行扫描(图 2),则在 $\phi_1 + \phi_{c1}$ 处粒子进入衬底沟道,背散射产额下降。继续往负方向扫描,由于 $\Delta\theta$ 为正,且 $\Delta\theta < \phi_{c1}$, 所以一直到零度,粒子仍在衬底沟道内。下面讨论粒子在负方向如何退出沟道。设一粒子的能量为 E , 从沟道中心以 $-\Phi$ 角度入射。在外延层中,粒子入射能的垂直分量为 $E_{\perp} = E\Phi^2$ 。当 $|\Phi| < \phi_{c1}$ 时,粒子进入外延层沟道。如果该粒子到达界面的角度为 $-\Phi'$, 则其动能的垂直分量为 $E\Phi'^2$, 势能为 $V = E\Phi^2 - E\Phi'^2$ 。粒子进入衬底后的垂直动能为 $E(\Phi' + \Delta\theta)^2$, 若假设势能不变,则该粒子的总垂直能为

$$E_{\perp 1} = E(\Phi' + \Delta\theta)^2 + E\Phi^2 - E\Phi'^2.$$

由于粒子进入衬底沟道的要求是 $E_{\perp 1} < E\phi_{c1}^2$, 即

$$E(\Phi' + \Delta\theta)^2 + E\Phi^2 - E\Phi'^2 < E\phi_{c1}^2. \quad (2)$$

于是可以从该式定出负方向的临界角 $-\Phi_c$ 。

由于 $E\Phi^2 = E\Phi'^2 + V$, 因此 $0 \leq \Phi' \leq \Phi$ 。当 $\Phi' = 0$ 时, (3) 式化为 $E\Delta\theta^2 + E\Phi^2 < E\phi_{c1}^2$, 亦即: $\Phi_c = \sqrt{\phi_{c1}^2 - \Delta\theta^2}$ 。当 $\Phi' = \Phi$ 时, (3) 式化为 $E(\Phi + \Delta\theta)^2 <$

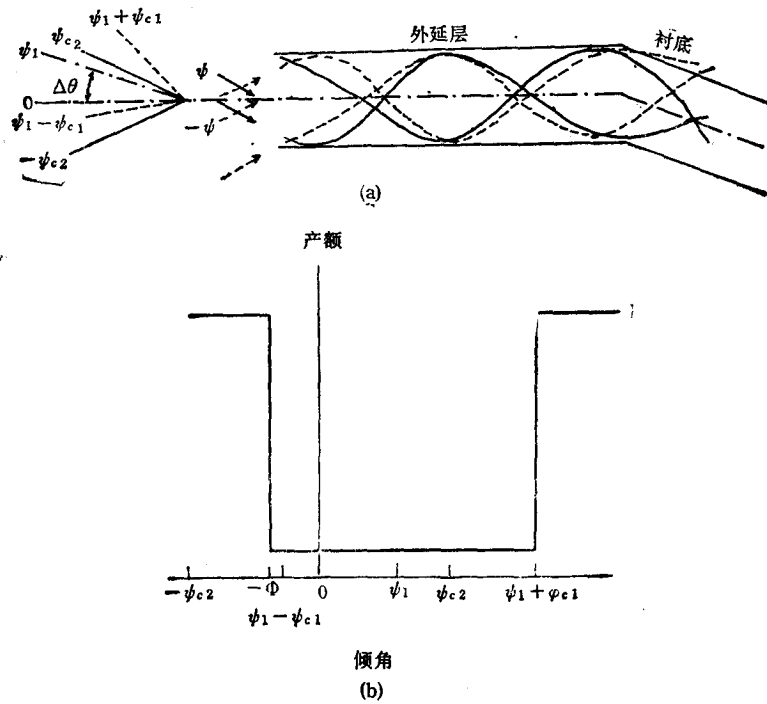


图 2 当 $\Delta\theta < \psi_{c1}$, $n\lambda \leq L < n\lambda + \lambda/2$ 时, 沟道粒子进入衬底沟道 (a) 及归一化背散射产额与入射角关系 (b) 示意图

$E\psi_{c1}^2$, 亦即: $\Phi_c = \psi_{c1} - \psi_1$. 于是负角度方向的临界角为

$$\psi_1 - \psi_{c1} \geq -\Phi_c \geq -\sqrt{\psi_{c1}^2 - \Delta\theta'}. \quad (3)$$

从图 2 (b) 中的角度关系不难得出衬底沟道的半角宽

$$\psi_{\frac{1}{2},1} = \frac{\Phi_c + \Delta\theta + \psi_{c1}}{2}, \quad (4)$$

以及外延层与衬底的沟道对准角的差值

$$\Delta\theta' = \frac{\Delta\theta + \psi_{c1} - \Phi_c}{2}. \quad (5)$$

将 (3) 式代入 (4) 式及 (5) 式, 得到 $\psi_{\frac{1}{2},1} \geq \psi_{c1}$ 及 $\Delta\theta' \leq \Delta\theta$. 因此除非 $L = n\lambda$ (这时 $\Phi' = \Phi$), 否则测得的半角宽便大于衬底的临界角, 测得的沟道对准角差值便小于晶格的扭折角, 这便是实验上通常观察到的反常现象.

(2) $n\lambda + \lambda/2 \leq L < (n+1)\lambda$

n 为正整数时, 到达界面的粒子, 经过了 $n\lambda + \lambda/2$ 的距离后相位要反过来 (图 3 (a)), 界面的人射角与初始入射角相反, 运动的轨迹也相反. 若粒子与 1·(1) 节一样, 从 $\psi_1 + \psi_{c1}$ 角度开始扫描, 这时粒子未进入外延层沟道而直接进入衬底沟道, 于是衬底的背散射产额下降 (图 3 (b)). 扫描至 ψ_{c1} 时, 粒子虽进入外延层沟道, 但到达 $n\lambda + \lambda/2$ 面时的人射角为 $-\psi_{c1}$. 根据 1·(1) 节的分析, 这时粒子不能进入衬底沟道, 于是背散射产额上升. 继续扫描到 Φ_c 时, 对 $n\lambda + \lambda/2$ 面相当于以 $-\Phi_c$ 角入射, 这正好是进入衬底沟道

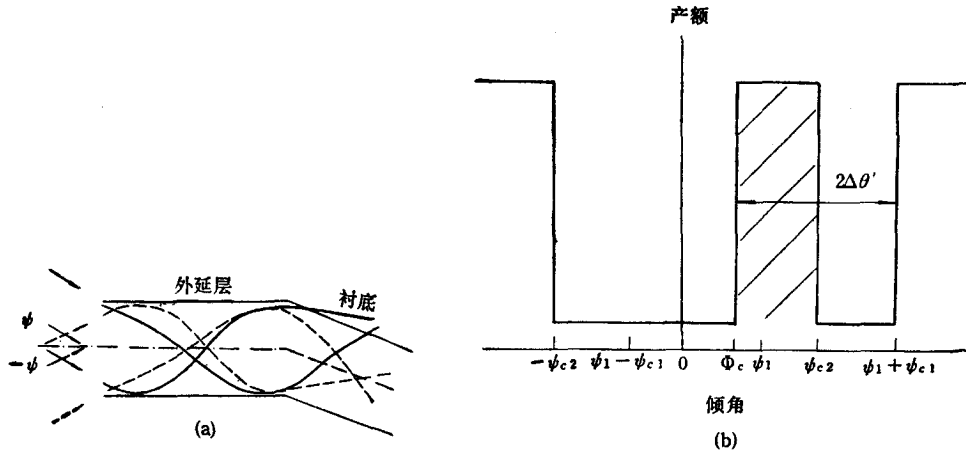


图3 当 $\Delta\theta < \psi_{c_1}$, $n\lambda + \lambda/2 \leq L < (n+1)\lambda$ 时, 沟道粒子进入衬底沟道 (a) 及归一化背散射产额与入射角关系 (b) 示意图

的临界角, 于是背散射产额再次下降。再往负方向扫描, 直到 $-\psi_{c_1}$ 才退出沟道。粒子在扫描过程中这样不止一次地进入衬底沟道便使得角扫描谱出现不对称的反常现象。

比较图 3 (b) 与图 2 (b), 可以看出, 反相使图 3 (b) 相当于将图 2 (b) 中从 $-\psi_{c_2}$ 到 ψ_{c_2} 一段对零度轴作 180° 的变换。正是这个变换使粒子在扫描过程中两次进入衬底沟道, 因此反相是产生角分布谱不对称的根本原因。

当粒子聚焦在界面时, 从 ψ_{c_2} 到 Φ_c 一段 (即图 3 (b) 中的阴影部分, 以下简称反常区) 的背散射产额将大大增加甚至超过随机产额, 这时非对称性更加明显。

2. $\psi_{c_1} \leq \Delta\theta < \psi_{c_1} + \psi_{c_2}$

同样分两种情况进行讨论

(1) $n\lambda \leq L < n\lambda + \lambda/2$

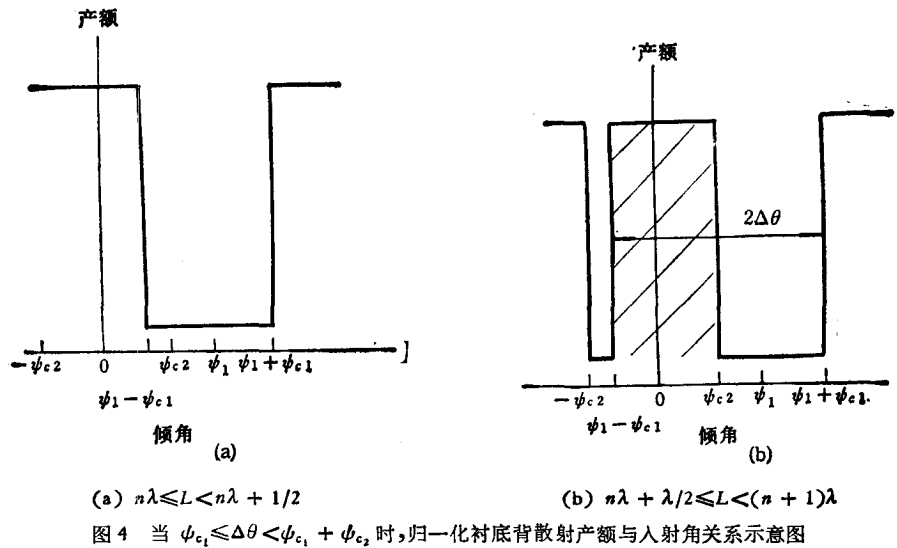
在这种条件下, 粒子到达界面时没有发生反相, 加上 $\psi_{c_1} \leq \Delta\theta$, 因此 (3) 式只能是一 $\Phi_c = \psi_1 - \psi_{c_1}$ 。这说明沟道出现在 $\psi_1 + \psi_{c_1}$ 到 $\psi_1 - \psi_{c_1}$ 一段, 这便是正常沟道粒子运动的情况。

(2) $n\lambda + \lambda/2 \leq L < (n+1)\lambda$

这是相位反过来的情况。根据 1·(2) 节的分析, 只需将图 4 (a) 中从 $-\psi_{c_2}$ 到 $+\psi_{c_2}$ 一段相对零点轴作 180° 变换 (见图 4 (b))。在这种情况下, 不对称很明显, 反常区相当宽。由于右边沟道区加反常区的宽度正好为 $2\Delta\theta$, 因此在反常沟道角扫描的情况下, 也能准确地测量晶格的扭折角 $\Delta\theta$ 。

3. $\psi_{c_1} + \psi_{c_2} \leq \Delta\theta$

在这种情况下, 由于外延层的沟道和衬底的沟道完全分开, 外延层中的沟道粒子不能进入衬底沟道, 因此不会产生反常效应。不管 L 与 λ 的关系如何, 都属于正常沟道粒子运动的情况。



以上分析的角扫描都是在 (100) 面内进行的, 角度关系均在这个面内, 因此这些分析完全适合面沟道的情况而带有普遍性, 只需将 ψ_{c1} , ψ_{c2} 及 λ 等换成面沟道相应的量即可。面沟道的临界角更小, 振荡更明显, 且衰减长度更大, 因此反常效应更为常见。

三、实验结果与讨论

实验用的样品为用 MBE 制备的 $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{As}/\text{GaAs}(100)$ 异质结, 外延层的厚度为 500 \AA 。背散射沟道分析采用 $2 \times 1.7 \text{ MV}$ 串到加速器提供的 Li 离子束, 能量为 5.8, 3.0 及 1.2 MeV。测量时的散射角为 165° 。角扫描是在 (100) 面内沿 [100] 及 [110] 轴进行的。

图 5 表示能量为 5.8 MeV 的粒子对准样品 [100] 和 [110] 轴时的背散射沟道谱。图 5 和图 6 均为 $\text{InGaAs}/\text{GaAs}(100)$ 异质结的实验结果。从图 5 可以看出, 衬底与外延层沿 [100] 轴方向的沟道是一致的, 都出现在 $\theta = 0^\circ$, 其归一化背散射产额的极小值 $\chi_1 = \chi_2 = 0.26$ 。但沿 [110] 方向则不然, 衬底背散射产额在 $\theta = 45^\circ$ 时最小, $\chi_1 =$

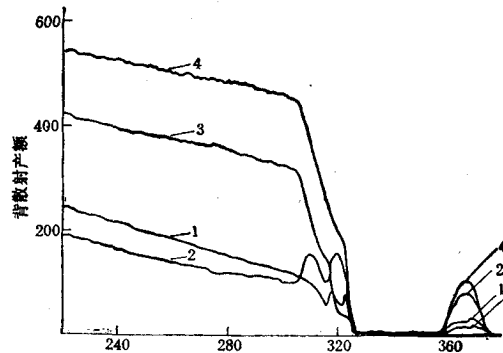


图 5 5.8 MeV 时的背散射谱
1——沿 [100]; 2——沿衬底的 [110]; 3——沿外延层的 [110]; 4——随机谱

0.22, 这时外延层的归一化产额为 0.74。而外延层归一化产额的极小值则出现在 $\theta = 44.1^\circ$, $\chi_2 = 0.14$, 这时衬底的归一化产额为 0.70。由衬底和外延层产额极小值对应的角差, 也就是沟道对准角的差值 $\Delta\theta' = 45 - 44.1 = 0.90^\circ$ 可以算出晶格的失配度为 $1.62\%^{[7]}$, 比实际值 1.75% 偏小。这是因为外延层的厚度 (500 \AA) 超过了应变结构形成的

临界厚度 $t_D (t_D \approx 300 \text{ \AA})$ ^[8], 于是失配位错引起应力的释放, 使扭折角变小。

如前所述, 反常沟道效应显然要影响测量值, 但在 5.8 MeV 的情况下, 从图 6 (a) 可以得到衬底和外延层角分布谱的半角宽 $\phi_{1/2,1} = 0.50^\circ$, $\phi_{1/2,2} = 0.45^\circ$ 以及两者沟道的对准角差值 $\Delta\theta' = 0.90^\circ$ 。从这些参量可以看出, 5.8 MeV 时满足 $\phi_{1/2,1} + \phi_{1/2,2} < \Delta\theta'$ 的条件, 属于第 3 节中讨论的情况, 无反常沟道效应。由此可以认为在 5.8 MeV 下的测量值即是实际值, 即 $\phi_{1/2,1} = \phi_c$, $\phi_{1/2,2} = \phi_c$, 以及 $\Delta\theta' = \Delta\theta$ 。关于利用正常沟道粒子测量异质结的应变和晶体质量已有另文讨论^[9]。下面将集中讨论反常的情况。

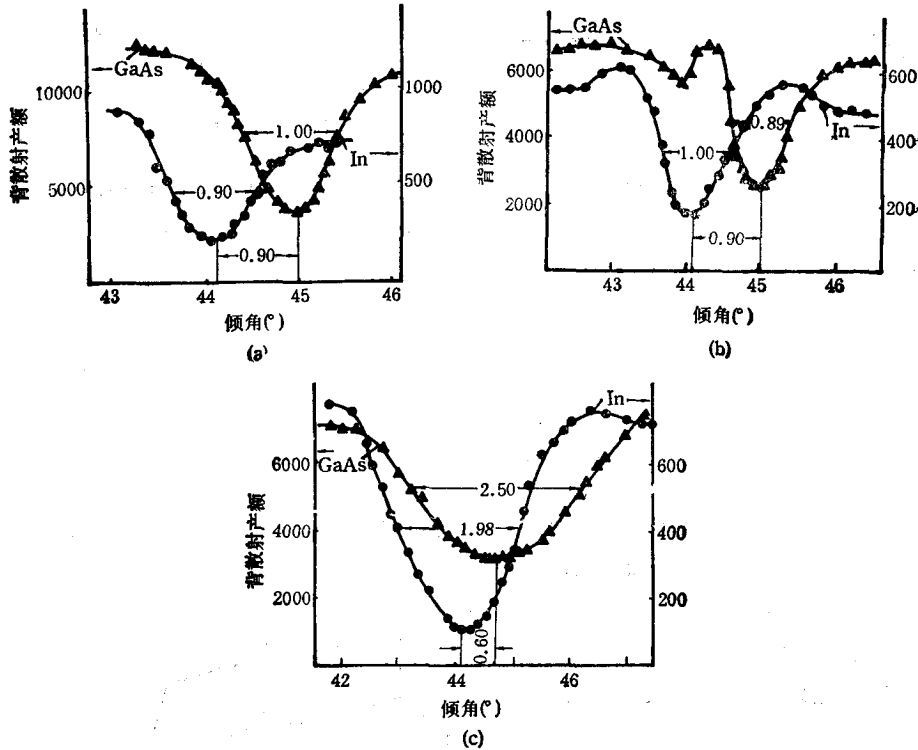


图 6 沿 [110] 轴扫描时衬底(▲)和外延层(●)的角分布谱 粒子能量:
(a)——5.8MeV; (b)——3.0MeV; (c)——1.2MeV

图 6 (b) 及图 6 (c) 分别表示能量为 3.0 MeV 及 1.2 MeV 时对 [110] 轴扫描的背散射角分布谱, 可以看出, 它们与图 6 (a) 有明显的差别。图 6 (b) 的不对称性非常严重, 衬底角扫描谱出现两个沟道坑。图 6 (c) 中衬底与外延层的沟道对准角差值减小为 0.50° , 而半角宽都相当大, 分别为 $\phi_{1/2,1} = 1.25^\circ$ 及 $\phi_{1/2,2} = 0.95^\circ$, 且两者相差也较大。下面将结合上一节的分析解释这些反常现象。

表 1 列出图 6 中的沟道临界角 ϕ_c 及沟道粒子的波长 λ 。根据上面的讨论, 5.8 MeV 时为正常情况, 因此测量的临界角可以认为是实际值。其他能量下的临界角可根据 ϕ_c^*/E , 将 5.8 MeV 下的值代入 $\phi_c^*(E)/\phi_c(5.8) = \sqrt{5.8/E}$ 推算得出, ϕ_c^* 称推算值。表 1 中 λ 和 λ^* 是根据 (1) 式用 $\phi_{1/2}$ 和 ϕ_c^* 代入得出的, 其中 $L = 500 \times \sqrt{2} = 700 \text{ \AA}$,

表 1 衬底及外延层的临界角及粒子的波长

$E(\text{MeV})$	5.8	3.0	1.2
$\psi_{1/2,1}(\circ)$	0.50	/	1.25
$\psi_{c_1}^*(\circ)$	/	0.70	1.10
$\psi_{1/2,2}(\circ)$	0.45	0.50	0.95
$\psi_{c_2}^*(\circ)$	/	0.63	0.99
$\lambda(\text{\AA})$	1040	930	490
$\lambda^*(\text{\AA})$	/	740	470

$$d = \frac{\sqrt{2}}{2} a = 4.069 \text{ \AA} (a \text{ 取 } 5.755 \text{ \AA}).$$

由表 1 可以看出, 3 MeV 时, 满足 $\psi_{c_1} < \Delta\theta < \psi_{c_1} + \psi_{c_2}$ 及 $\lambda/2 < L < \lambda$ 的关系, 属于 2.(2) 节讨论的情况, 因此角扫描谱不对称. 1.2 MeV 时, 符合 $\Delta\theta < \psi_{c_1}$ 及 $\lambda < L < 3\lambda/2$ 的条件, 属于 1.(1) 节讨论的情况, 这时由于粒子在外延层中的振荡运动, 使不同状态进入衬底沟道的粒子有不同的临界角. 将 $\Delta\theta = 0.90^\circ$ 及 $\psi_{c_1}^* = 1.10^\circ$ 代入 (3) 式得出 $0.20 \leq \phi_c \leq 0.63$, 再代入 (4) 式和 (5) 式给出 $\psi_{1/2,1}$ 应介于 $1.10-1.32^\circ$, $\Delta\theta'$ 应介于 $0.68-0.90^\circ$. 前者与实验值 $\psi_{1/2,1} = 1.25^\circ$ 是一致的. 对于沟道角差值、实验值则稍偏小, 为 0.60° , 这可认为是外延层沟道的导向效应引起的, 它使衬底沟道等效地向外延层沟道移动^[3].

四、结 论

由上述讨论结合 $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.75}\text{Ga}/\text{GaAs}$ 异质结的实验结果, 得到以下结论:

1. 粒子在异质结界面的反相是产生沟道不对称角扫描的根本原因. 当 $\Delta\theta < \psi_{c_1}$ 或 $\psi_{c_1} \leq \Delta\theta < \psi_{c_1} + \psi_{c_2}$, 且 $n\lambda + \lambda/2 \leq L < (n+1)\lambda$ 时, 出现这种不对称.
2. 当 $\Delta\theta < \psi_{c_1}$, 且 $n\lambda \leq L < n\lambda + \lambda/2$ 时, 衬底沟道角扫描谱是失真的, 其半角宽偏大, 沟道对准角偏小.

感谢陈漪萍、任孟眉、杨锋等在工作上的合作和 J. A. Davies 以及 D. A. Thompson 等教授的有益讨论.

- [1] W. K. Chu, J. A. Ellision, S. T. Picraux, R. M. Biefeld and G. C. Osbourn, *Phys. Rev. Lett.*, 52(1984), 125.
- [2] S. T. Picraux, L. R. Dawson, G. C. Osbourn, R. M. Biefeld and W. K. Chu, *Appl. Phys. Lett.*, 43(1983), 1020.
- [3] Shin Hashimoto, Y-Q. Feng, W. M. Gibson, L. J. Schowalter and B. D. Hunt, *Nucl. Instr. and Meth.*, B13(1986), 45.
- [4] B. A. Davidson, L. C. Feldman, J. Bevk and J. P. Mannaerts, *Appl. Phys. Lett.*, 50(1987), 135.
- [5] J. Bevk, A. Ourmazd, L. C. Feldman, T. P. Pearsall, J. M. Bonar, B. A. Davidson and J. P. Mannaerts, *Appl. Phys. Lett.*, 50(1987), 760.
- [6] L. C. Feldman, J. W. Mayer and S. T. Picraux, *Materials analysis by ion channeling*, Academic Press, New York, (1982).
- [7] S. T. Picraux, R. M. Biefeld, G. C. Osbourn and W. K. Chu, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, 25(1984), 477.

- [8] S. T. Picraux, G. W. Arnold, D. R. Myers, L. R. Dawson, R. M. Biefeld, I. J. Fritz and T. E. Zipperian, *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res.*, **B7/8**(1985), 453.
- [9] Yin Shiduan, Wu Chunwu, Zhang Jiagping, Liu Jiarui and Zhu Peiran, *Solid State Commun.*, **65**(1988), 1181.

ANOMALOUS ION CHANNELING EFFECTS IN InGaAs/GaAs STRAINED HETEROJUNCTIONS

WU CHUN-WU YIN SHI-DUAN ZHANG JING-PING XIAO GUANG-MING

(*Institute of Semiconductors, Academia Sinica*)

LIU JIA-RUI ZHU PEI-RAN

(*Institute of Physics, Academia Sinica*)

ABSTRACT

The 5.8, 3.0 and 1.2 MeV Li ions were used to study the MBE In_{0.75}Ga_{0.75}As/GaAs (100) sample. Ion channeling angular scans about [100] and [110] axes were carried out in the (100) plane.

It is found that in the case of 5.8 MeV, the critical angle of the epilayer is almost the same as that of the substrate and the angle misalignment between them is 0.90° for axis [110], corresponding to the misfit of sample being 1.62%, in good agreement with theoretical calculation. In the 3.0 MeV case, serious asymmetry have been observed in RBS/Channeling angular scan; in the 1.2 MeV case, the angular misalignment is reduced to 0.50° and the critical channeling angle of substrate is increased significantly. We have studied and discussed the physical mechanism of these anomalous phenomena in detail, and present a good interpretation of the experimental results.