

Al/GaAs 表面量子阱界面层的原位光调制 反射光谱研究

袁先漳¹⁾ 缪中林²⁾

¹⁾温州师范学院物理与电子信息学院,温州 325027)

²⁾中国科学院上海技术物理研究所,红外物理国家实验室,上海 200083)

(2003 年 10 月 17 日收到,2004 年 2 月 20 日收到修改稿)

用分子束外延(MBE)方法在 GaAs 表面量子阱上外延生长不同厚度的 Al 层,以超高真空下的原位光调制光谱(PR)作为测量手段,研究 Al 扩散形成的表面势垒层对于 GaAs 表面量子阱中带间跃迁峰位和峰形的影响.根据跃迁峰的变化,采用有效质量近似理论计算出了 Al 和 GaAs 的互扩散长度为 0.5nm,这是半导体工艺中的一个重要常数.

关键词:Al, GaAs, 原位光调制反射光谱(PR), 分子束外延(MBE)

PACC: 7320, 7360, 7840, 7865

1. 引 言

由于半导体工业的要求,半导体的合金化研究是半导体物理的一个重要分支.近年来,随着纳米器件的发展,在纳米尺度上,甚至几个原子层的数量级上,研究电极、导线等与半导体材料之间形成的肖特基结,以及金属与半导体之间的互扩散成为新的研究方向^[1-6].

本文提出了一种新的实验方法在原子层数量级上研究金属和半导体之间的互扩散.用 MBE 方法生长不同厚度的 GaAs 表面量子阱,再在表面量子阱上外延不同厚度的 Al 层. Al 和 GaAs 之间的互扩散将会在表面量子阱表面形成一层很薄的 $Al_xGa_{1-x}As$ 表面势垒,同时表面量子阱的厚度也发生变化,从而导致表面量子阱中带间跃迁峰的峰位和峰形发生变化,并最终反馈为 Al 和 GaAs 之间的互扩散的程度.为了准确测得跃迁峰变化,必须有效地避免外界氧化沾污等引起的扰动,为此我们采用的是 MBE 超高真空腔体中($> 133 \times 10^{-9}$ Pa)的原位光调制反射光谱技术.同时,由于是在原子层数量级上研究 Al 和 GaAs 之间的互扩散,生长的 GaAs 表面量子阱的阱宽必须足够窄,这样互扩散导致的 $Al_xGa_{1-x}As$ 势垒才能有效地引起跃迁峰位的移动.

2. 实 验

选用 GaAs(001)高纯衬底片,用 MBE 的方法在 610°C 生长 500 nm 的缓冲层,然后在 100 nm $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ 的势垒层上生长 2nm GaAs 表面量子阱, GaAs, AlGaAs 的生长速度和 Al 组分由 RHEED 振荡监控, Al 的生长速度为 0.28ML/s. 生长结束后,样品传到 MBE 预处理室进行原位光调制光谱的测量,预处理室的真空度保持在 133×10^{-9} Pa 以上.在 600°C 分别生长 6s, 10s 和 20s 的 Al 层,并在生长完成后传到预处理室进行光调制光谱测量.光调制光谱的探测光源为溴钨灯,调制光为 He-Ne 激光器的 632.8nm 线,通过单色仪分光后由硅光二极管探测器探测.探测信号由锁相放大器放大后经过 A/D 转换由计算机记录.测量范围为 650—900nm,扫描步长为 1nm.

同样,分别在 5.0 和 7.0nm 的表面量子阱上外延 6s, 10s 和 20s 的 Al 层,测量不同厚度 Al 层对于表面量子阱中跃迁峰的影响.样品能带结构如图 1 所示.

3. 结果与讨论

图 2 为外延 Al 层之前的表面量子阱的光调制

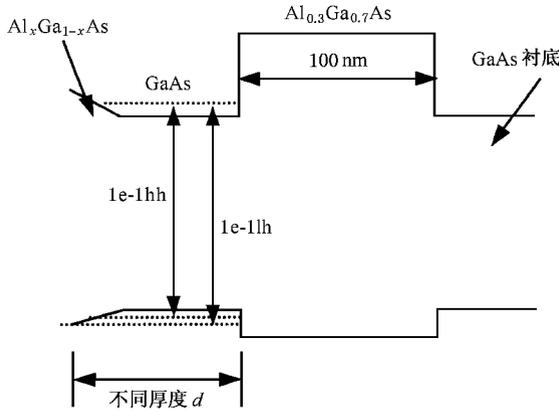


图 1 样品能带示意图

反射谱,从图中看出,量子阱中跃迁峰随着量子阱宽度的增加向低能方向移动并且伴随着展宽因子减小,这与我们以前的观察结果符合^[7].

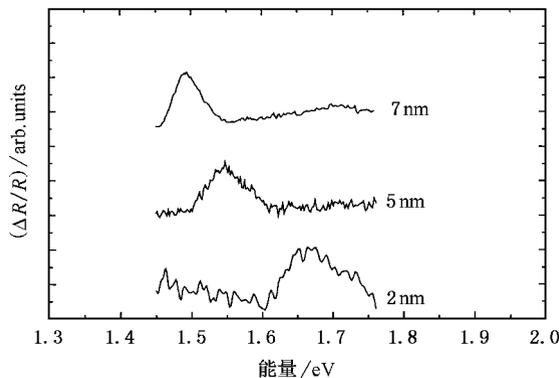
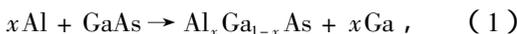


图 2 外延 Al 之前的表面量子阱光调制反射光谱

图 3,4,5 分别为 2,5,7 nm 表面量子阱外延不同时间 Al 层的光调制反射光谱.在图 3 的调制光谱中,跃迁峰明显向高能方向移动,而在 5 和 7 nm 表面量子阱的光谱中,跃迁峰的移动量很小.

金属与半导体形成的肖特基结通常可以用三层模型来研究,分为金属层,接触层和半导体层.实验表明^[2,3],在 GaAs 上外延 Al 的同时,在 GaAs-Al 界面层中部分 Al 原子代替了从 GaAs 中分离出的 Ga 原子,形成了 $Al_xGa_{1-x}As$ ^[8,9],Lindau 等的实验中看到了游离的 Ga 原子的存在^[8],



Al 原子替换 Ga 原子的同时,也引入了缺陷.从以上的化学方程式可以看到,在 GaAs-Al 界面层生成了 $Al_xGa_{1-x}As$ 势垒.

当在 2 nm 表面量子阱上外延 6 s Al 时,基态跃

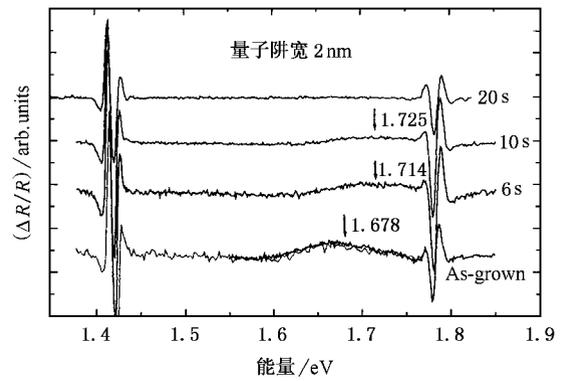


图 3 2nm 表面量子阱外延不同时间 Al 层的光调制反射光谱

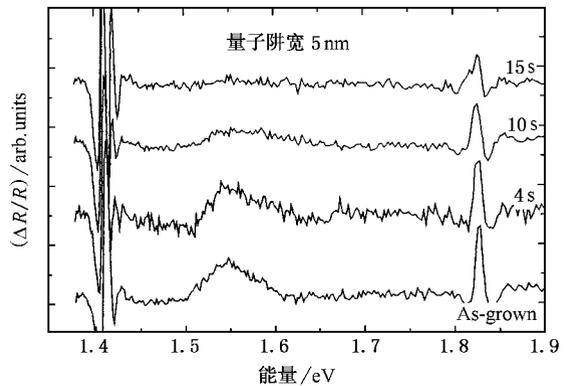


图 4 5nm 表面量子阱外延不同时间 Al 层的光调制反射光谱

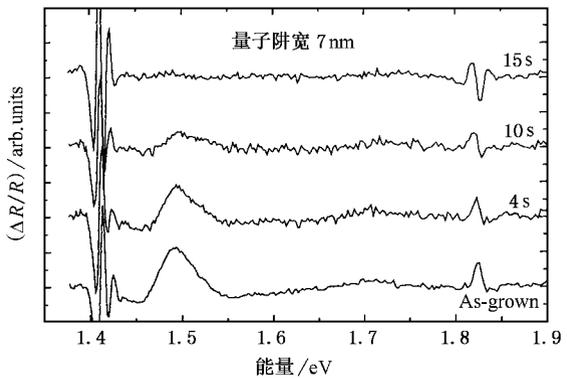


图 5 7nm 表面量子阱外延不同时间 Al 层的光调制反射光谱

迁峰向高能方向移动.外延 10s Al 时,基态跃迁峰继续向高能移动,这说明随着外延 Al 层的增厚,GaAs-Al 界面层也随之增厚,同时 GaAs 量子阱宽度减小,量子阱中电子子能级位置向上移动,导致跃迁峰向高能移动.外延 20s Al 时,跃迁峰淬灭,这可能由两方面原因导致的,一方面 Al 组分扩散形成了不对称量子阱,当满足下面条件时,量子阱中不存在受限电

子态.

$$d \frac{\sqrt{2mV_1}}{\hbar} < \frac{\pi}{2} - \arcsin \sqrt{\frac{V_1}{V_2}}, \quad (2)$$

其中 d 为量子阱宽度, V_1 和 V_2 为两边势垒高度, m 为电子有效质量.

另一方面随着 Al 层厚度的增加,金属表面电场对于表面量子阱的电场影响越来越大,即金属表面电场对于量子阱的屏蔽作用越来越强,表面量子阱的调制峰位趋向平坦.

对于 5 和 7 nm 的表面量子阱,由于量子阱相对较宽,GaAs-Al 界面势垒层对于量子阱的作用已经减弱了,所以表面量子阱中跃迁峰的移动已经不明显.

采用图 6 所示的模型:Al-GaAs 界面层中 Al 组分从外延 Al 层到 GaAs 量子阱之间呈高斯分布,来研究 Al 组分扩散与外延时间的关系,以及对量子阱中受限电子态的影响.

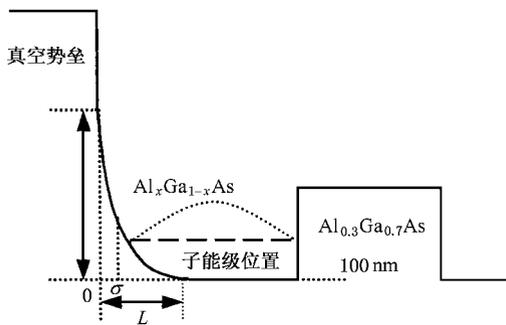


图 6 Al 组分高斯线性变化的势垒模型

在 2 nm 表面量子阱的 PR 谱中(根据 PR 谱,算出 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 势垒的 Al 组分为 0.29),得到基态跃迁峰的位置分别为 1.678, 1.714 和 1.725 eV. z 位置处 Al 组分为

$$X(z) = X(t) \cdot e^{-\left(\frac{z}{\sigma}\right)^2}, \quad (3)$$

$X(t)$ 为跟时间相关的最外层 Al 组分,并且满足下面积分条件, C_{Al} 为外延 Al 层的厚度

$$C_{\text{Al}} = \int_0^L X(z) dz, \quad (4)$$

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($0 < x < 0.45$) 禁带宽度取以下公式:

$$E_g = 1.424 + 1.247x. \quad (5)$$

以 GaAs 导带底能量为 0,扩散层的势为

$$V(z) = 0.6 \cdot 1.247 \cdot X(z). \quad (6)$$

取带阶为 0.6,真空势取 GaAs 材料的电子亲和势

5.0 eV.

在有效质量近似下,利用传输矩阵计算方法,可求得量子阱中电子与空穴受限能态的能量位置与相应的波函数.并利用推测的 Al 组分扩散长度 L ,可以计算出各种结构的基态跃迁峰位置.表 1 列出了 2nm 量子阱中的结果.

表 1 2nm 量子阱中基态跃迁峰实验值与理论值比较

外延 Al 层时间/s	0	6	10
Al 扩散长度 L/nm	0	0.5	0.5
基态跃迁峰实验值/eV	1.678	1.714	1.725
基态跃迁峰理论值/eV	1.711	1.715	1.728

计算结果发现,Al 向 GaAs 中扩散了 0.5nm,量子阱中基态跃迁峰的理论值与实验结果相符合.应用 0.5nm 的扩散长度这个结果计算在 5 nm 和 7 nm 量子阱上外延 10s Al 层时,基态跃迁峰的能量,根据扩散长度算得的子带跃迁峰的位置与实验值符合,如表 2 所示.为此我们认为在 GaAs 表面上的 Al 在 600℃ 时会形成约 0.5 nm 扩散长度.

表 2 5nm 和 7nm 量子阱中基态跃迁峰实验值与理论值比较

		外延 Al 层时间 0s	外延 Al 层时间 10s
5 nm 量子阱	实验值/eV	1.546	1.570
	理论值/eV	1.538	1.581
7 nm 量子阱	实验值/eV	1.492	1.505
	理论值/eV	1.494	1.511

从图 3 4 5 可以看到,随着 Al 层的增厚,量子阱中跃迁峰的展宽因子随之增大.这反映了 Al 原子向 GaAs 中扩散的过程中带来了缺陷,随着 Al 层厚度的增加,缺陷增多,对于束缚电子的散射变大,所以跃迁峰形变宽.

4. 结 论

本文提出了一种新的实验方法来研究金属和半导体之间的互扩散.在超高真空的条件下,用非接触原位光调制反射光谱的方法,研究了 Al 和 GaAs 之间的互扩散引起的表面量子阱中带间跃迁峰的变化,从而计算出 Al 在 GaAs 中的扩散长度.该实验方法以及计算出的扩散长度对于研究其他金属和半导体之间的互扩散具有一定的借鉴意义.

- [1] Sloboshanin S *et al* 1996 *Surf. Sci.* **369** 209
- [2] Ling C C *et al* 1995 *Applied Surface Sciences* **85** 305
- [3] Ling C C *et al* 1994 *J. Phys. Condensed Matter* **6** 1133
- [4] Lioubtchenko D V *et al* 2002 *Appl. Surf. Sci.* **195** 42
- [5] Tsay J S *et al* 2002 *Surf. Sci.* **507** 498
- [6] Schmidt G *et al* 1999 *J. Mag. Mag. Mat.* **198** 134
- [7] Miao Z L *et al* 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 231(in Chinese) 繆中林等 2001 *物理学报* **50** 231]
- [8] Lindau I *et al* 1980 *Surface Science* **99** 192
- [9] Burnham J S *et al* 1996 *Phys. Rev. B* **53** 9901

In-situ photo-modulated reflectance study on the interface of Al and GaAs surface quantum well

Yuan Xian-Zhang¹⁾ Miao Zhong-Lin²⁾

¹⁾*School of Physics and Electronic Information, Wenzhou Normal College, Wenzhou 325027, China*

²⁾*National Laboratory for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China*

(Received 17 October 2003 ; revised manuscript received 20 February 2004)

Abstract

We have studied the optical properties of the interface of Al and GaAs surface quantum well by *in-situ* photoreflectance (PR) spectroscopy in a molecular beam epitaxy (MBE) system. The intermixing of Al and GaAs surface quantum wells forms an $Al_xGa_{1-x}As$ barrier layer on GaAs, which would shift the inter-band transition peaks of the GaAs quantum well. Based on the calculation using effective mass approximate method, we find that the intermixing length is 0.5nm, which is an important parameter in semiconductor technology.

Keywords : Al, GaAs, *in-situ* photoreflectance (PR), molecular beam epitaxy (MBE)

PACC : 7320, 7360, 7840, 7865