

AlGaAs/GaAs 波导薄膜 X 射线 双晶衍射研究*

麦振洪 崔树范 王超英 吴兰生

中国科学院物理研究所, 北京, 100080

1990年9月19日收到

本文应用 X 射线双晶衍射研究 AlGaAs/GaAs 波导结构薄膜。结合实验结果, 应用 X 射线衍射动力学理论, 计算衬底和多层膜的反射强度, 得到样品的真实结构。分析影响薄膜双晶衍射摇摆曲线的若干因素。

PACC: 7360F; 6110F

一、引 言

由于化合物半导体材料的特殊性能以及在光电器件、微波器件等方面的应用, 近年来, 半导体薄膜生长和器件的研究发展非常迅速, 这一领域的进展不仅取决于晶体生长技术和器件工艺的改善, 还取决于简便而准确地鉴别外延层应变状态、成分偏离等结构参数的能力。在众多的分析测试技术中, X 射线双晶衍射作为一种非破坏性的技术, 尤为优越。双晶衍射摇摆曲线以及实验曲线的计算机模拟可以提供以下信息:

1) 外延层点阵参数失配; 2) 外延层的厚度; 3) 外延层和衬底材料的完美性; 4) 晶片的弯曲度; 5) 外延层厚度、应变及成分随位置或深度的变化。

本文应用 X 射线双晶衍射研究 AlGaAs 波导器件薄膜结构, 结合实验结果, 应用 X 射线衍射动力学理论计算衬底和多层膜的反射强度, 模拟双晶衍射摇摆曲线, 分析影响薄膜双晶衍射摇摆曲线的因素。

二、实验与结果

实验样品为日本佳友公司 LPE 方法制备的波导材料, 其名义结构为

$$\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}(1.5\mu\text{m})/\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{As}(2.5\mu\text{m})/\text{GaAs}.$$

双晶衍射实验分别采用英国 Durham 大学物理系的普通 X 射线源和英国 Daresbury 同步辐射实验室的同步辐射 X 射线源, 其波长分别为 1.5418, 1.5 和 1.4 Å。第一晶体分别为 GaAs 和 Si。测量了样品 GaAs 的 004, 044, 224, 113 和 $\bar{1}13$ 衍射强度分布。

* 国家自然科学基金资助的课题。

图1(见图版I)为第一晶体 Si 333 衍射,波长为 $1.4 \text{ \AA}$ 时,样品 GaAs 224 衍射的强度分布图,可以清晰地观察到,在主峰两侧有干涉条纹,在高角度区一边约有 7 条。图 2(a) 和 (b) 分别为第一晶体 Si 111 衍射,波长为 1.4 和 $1.5 \text{ \AA}$ 时样品 GaAs 224 衍射的强度分布图(见图版 I)。可以看到,当第一晶体为 Si 111 衍射时,样品 GaAs 224 衍射只观察到 3 个宽峰,而观察不到干涉条纹。表 1 列出所作实验的条件和结果。

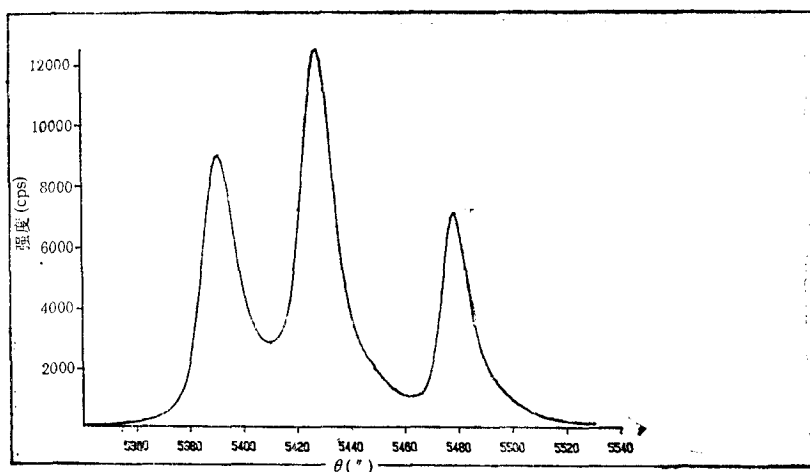
表 1 实验条件和结果

第一晶体	衍射	波长($\text{\AA}$)	样品 GaAs 衍射	结果
Si	333	1.4	224	主峰两侧有干涉条纹
	111	1.4	224	三峰
	111	1.5	224	三峰
	111	1.5	044	三峰
	111	1.5	113	一峰
	111	1.5	$\bar{1}13$	一峰
GaAs	004	1.5418	004	三峰

三、讨 论

1. 样品的真实参数

为了获得样品的真实参数,我们应用 X 射线衍射动力学理论,计算了衬底和多层膜的反射强度,并与实验曲线拟合。图 3 为第一晶体 GaAs 004,波长为 $1.5418 \text{ \AA}$ 时,样品 GaAs 004 衍射的摇摆曲线。经计算机模拟发现,样品的真实参数与其设计参数差别较大。图 4 为相同实验条件,样品参数为 $\text{GaAs}(0.25 \mu\text{m})/\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}(0.25 \mu\text{m})/\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{As}(2.5 \mu\text{m})/\text{GaAs}$ 的计算机模拟曲线,其强度分布与图 3 拟合较好。图 5 为第一晶体 Si 333,波长为 $1.4 \text{ \AA}$,样品为设计参数的 GaAs 224 衍射摇摆曲线,可以见到主峰两侧有干涉条纹,但强度很低。图 6 为相同实验条件,样品结构与图 4 相同 GaAs 224 衍

图 3 样品 GaAs 004 衍射摇摆曲线 第一晶体 GaAs 004, $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$

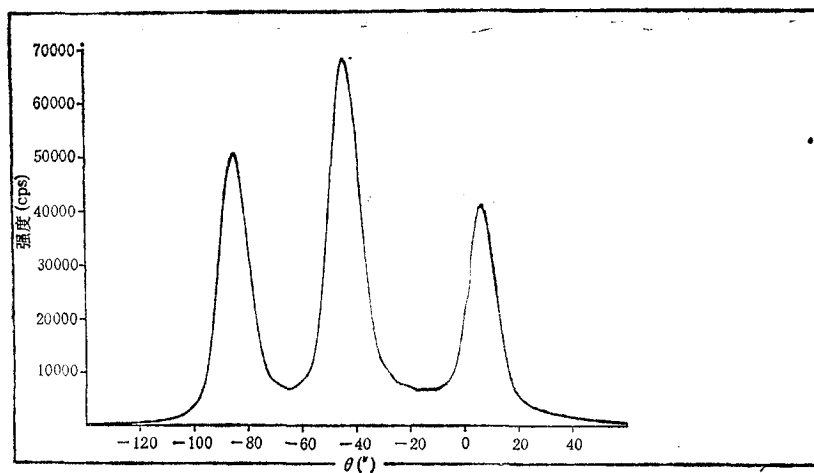


图4 计算机模拟样品 GaAs 004 衍射摇摆曲线 第一晶体 GaAs 004, $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$; 样品结构见正文

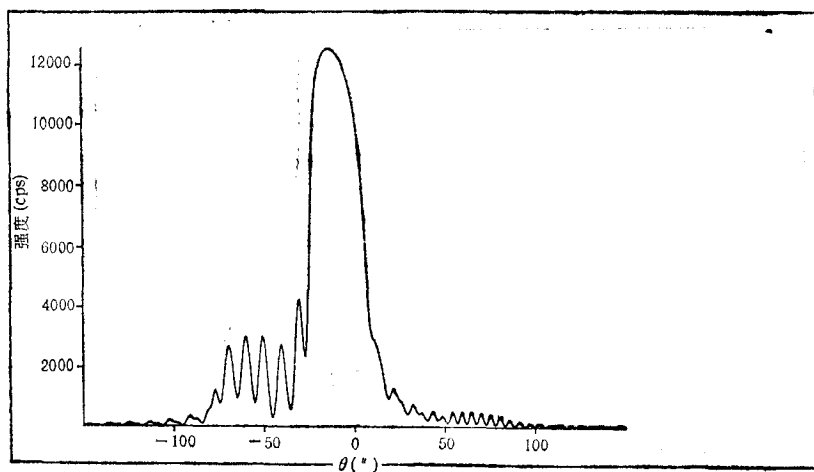


图5 计算机模拟样品 GaAs 224 衍射摇摆曲线 第一晶体 Si 333, $\lambda = 1.4 \text{ \AA}$

射的计算机模拟摇摆曲线。可以看到,在样品表面加了一层 $0.25 \mu\text{m}$ 厚的 GaAs 后,主峰两边的干涉条纹强度提高了。其结果不仅与实验结果符合,也更接近波导器件的实际使用结构。因此,可以认为样品的真实参数为

$$\text{GaAs}(0.25 \mu\text{m})/\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}(2.5 \mu\text{m})/\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{As}(2.5 \mu\text{m})/\text{GaAs}_0$$

2. 影响薄膜双晶衍射摇摆曲线的因素

为了解释所观察到的实验结果,应用计算机模拟,研究了影响薄膜双晶衍射摇摆曲线的因素。在计算中均采用样品真实结构。

1) 样品弯曲度的影响

图7(a),(b)和图6为第一晶体 Si 333, 波长为 $1.4 \text{ \AA}$, GaAs 224 衍射,但样品弯曲曲率半径分别为无穷大、60 m 和 120 m 的理论摇摆曲线。可以看到,随着弯曲度增

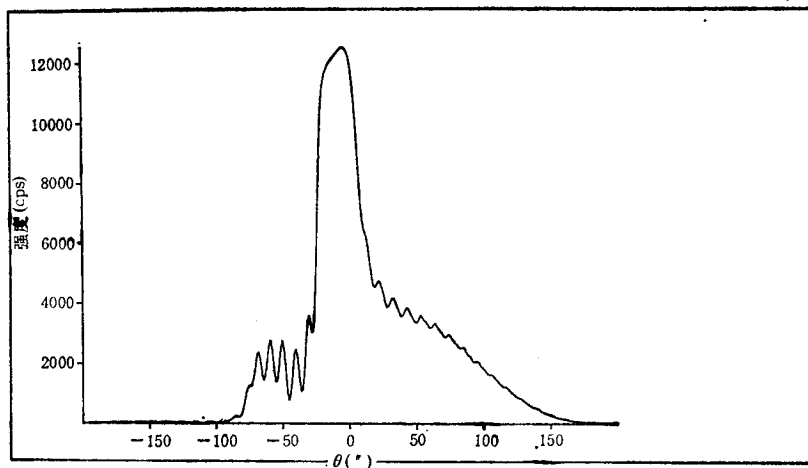


图6 计算机模拟样品 GaAs 224 衍射摇摆曲线 第一晶体 Si 333, $\lambda = 1.4 \text{ \AA}$;
样品结构同图4; 样品弯曲曲率半径为 120 m

大,主峰两侧的干涉条纹强度减弱,当曲率半径为 60 m 时,干涉条纹基本消失。

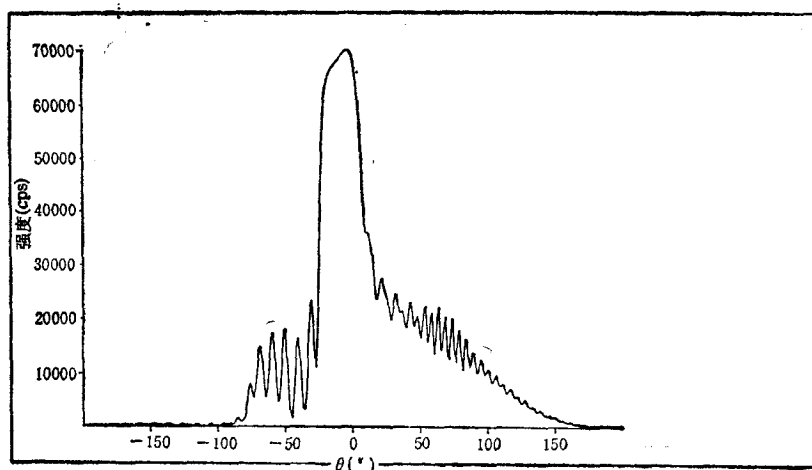
比较图 7(a) 与图 6 可看到样品从不弯曲到曲率半径为 120 m 其摇摆曲线低角度区的干涉峰的数量没变化,只是强度减弱。但是,对高角度区的干涉峰的影响却很大,干涉峰的数目明显减少,强度也相对减弱,通过峰位置的计算,发现样品不弯曲时,高角度区的干涉峰由两组干涉条纹组成,其各自条纹间距均为 $10''$,两组条纹之间的角度差为 $5''$ 。可以认为,它们是来自于样品的第一层与第二层和第二层与衬底之间的干涉。当样品弯曲曲率半径为 120 m 时,其中一组干涉条纹消失,可以认为是第二层与衬底之间的干涉条件已被破坏。只剩下一组干涉条纹,其数目为 7 条,与实验观察到的条纹数一致。故可认为所研究的样品的弯曲曲率半径为 120 m。

图 8(a) 和 (b) 为第一晶体 Si 111, 波长为 $1.4 \text{ \AA}$, 样品 GaAs 224 衍射,其样品弯曲曲率半径分别为无穷大和 120 m 的摇摆曲线,可以清楚看到,当样品不弯曲时,其摇摆曲线应该能观察到类似图 6 的干涉条纹。但是,由于样品弯曲,干涉现象消失。这个结果表明了 Si 111 波长为 $1.5 \text{ \AA}$, 样品 GaAs 044 和 224 衍射时,观察不到干涉峰的原因。

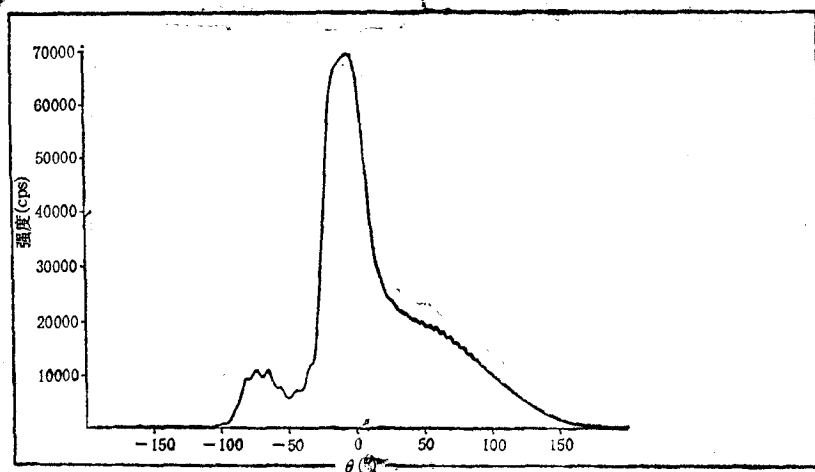
根据 Vegard 定律^[1],可算得对 $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}/\text{GaAs}$ 其点阵常数失配: $\Delta d/d = 187.5 \text{ ppm}$,而对 $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{As}/\text{GaAs}$, 其 $\Delta d/d = 313.1 \text{ ppm}$ 。可见,在外延膜制备过程中,由于点阵常数失配和热应力的作用,会使样品产生弯曲。这样,当 X 射线入射其中时,会使各层反射波场之间的位相关系和传播方向改变。从而使原来的某些干涉条纹消失。有关样品的弯曲度对摇摆曲线的影响将另文详细讨论。

2) 入射束发散度的影响

从表 1 可看到,对波长为 $1.4 \text{ \AA}$, 样品 GaAs 224 衍射的强度分布,当第一晶体为 Si 333 衍射时,可观察到干涉条纹,而 111 衍射时即只有三个强峰,除了样品弯曲度影响以外,显然与入射到样品的 X 射线束的发散度有关。



(a) 曲率半径为无穷大



(b) 曲率半径为 60 m

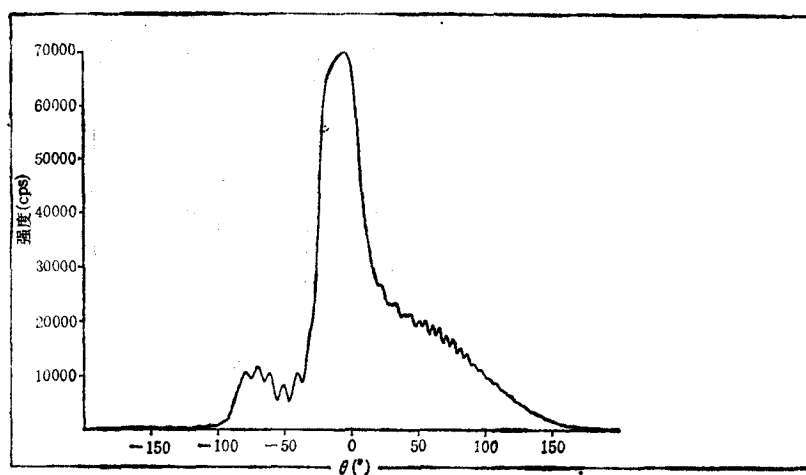
图 7 计算机模拟样品 GaAs 224 衍射摇摆曲线 第一晶体 Si 333, $\lambda = 1.4 \text{ \AA}$

图 9 为 Si 111 和 333 反射的理论强度曲线,从 9 图中可算出 Si 111 反射的理论半峰宽为 $7''$,而 Si 333 反射的理论半峰宽只有 $2''$ 。从 X 射线衍射动力学理论^[2]可知,具有更小发散度的 Si 333 反射作为入射束,其样品各层之间的反射波场的发散度也小,从而产生相互干涉。

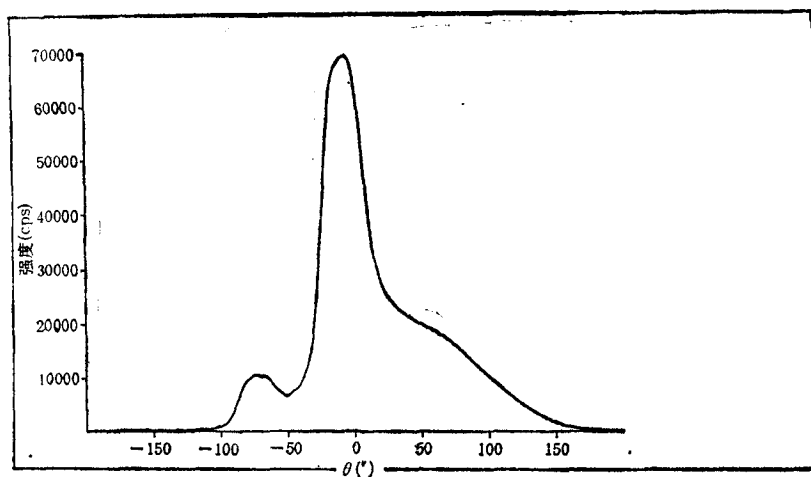
3) 入射束偏振度的影响

X 射线是电磁波,具有两种不同的偏振度,对常规 X 射线源发出的 X 射线,具有两种偏振,而同步辐射源发出的 X 射线只具有一种偏振,因此,两者所得的双晶衍射摇摆曲线略有不同。

图 10 (a)、(b) 和 (c) 分别为第一晶体 Si 333、波长为 $1.4 \text{ \AA}$, 样品 GaAs 224 衍射,入射束的偏振为 σ , π 和 $\sigma + \pi$ 的理论摇摆曲线。比较图 10 (a) 与 (c) 可见,同步



(a) 曲率半径为无穷大



(b) 曲率半径为 120 m

图 8 计算机模拟样品 GaAs 224 衍射摇摆曲线 第一晶体 Si 111, $\lambda = 1.4$

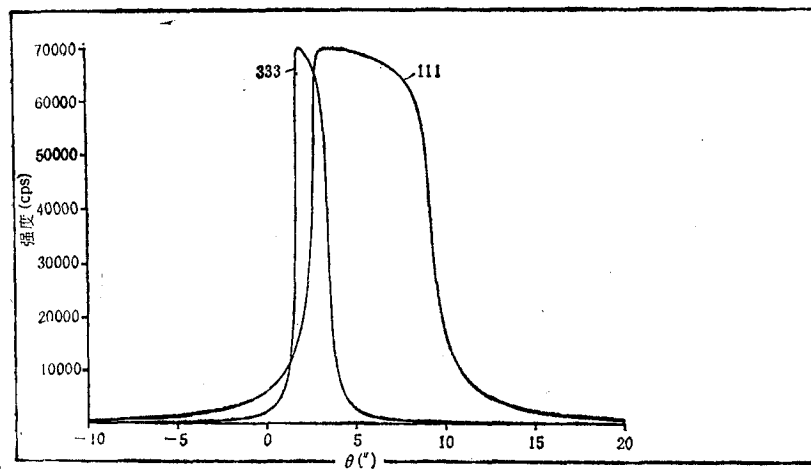
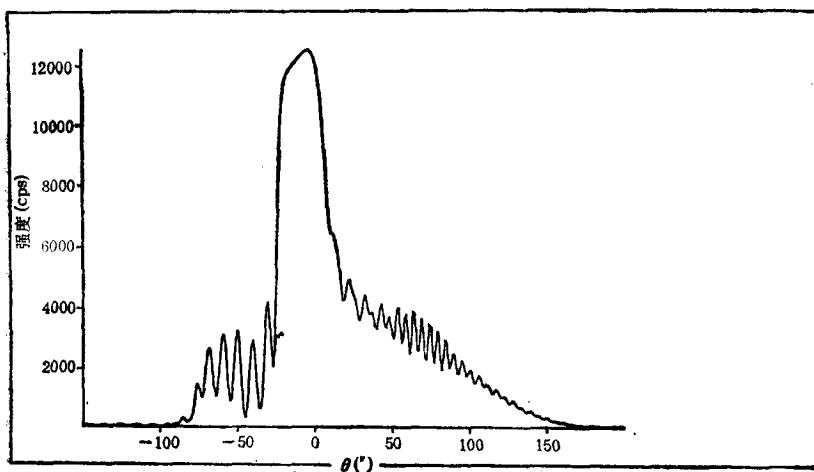
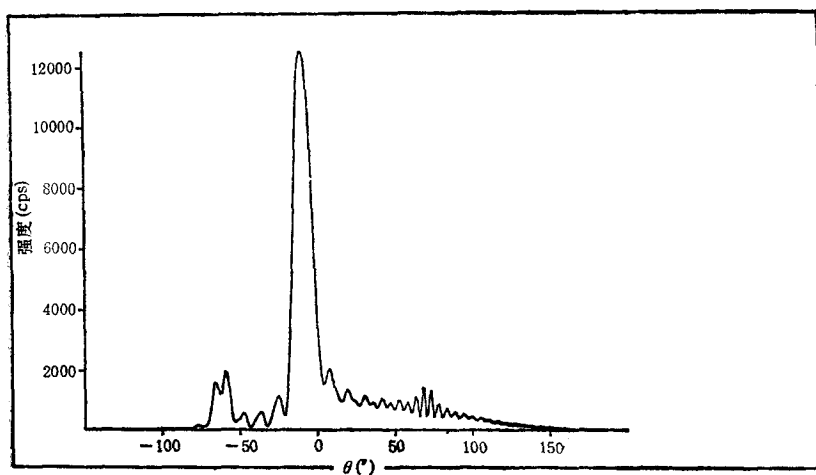


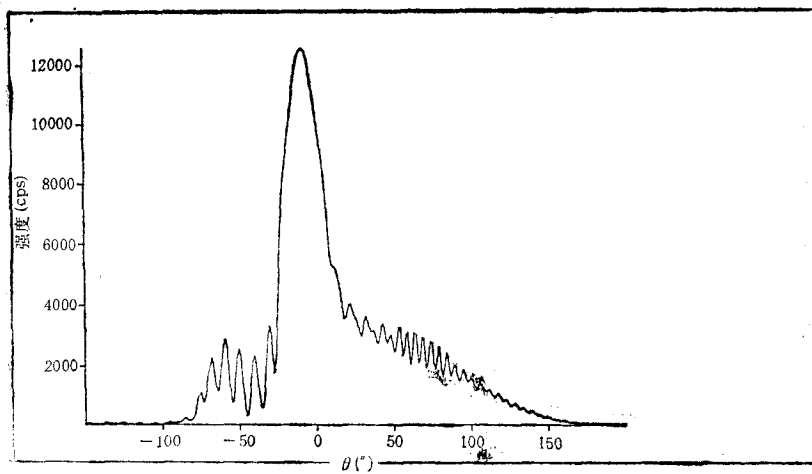
图 9 Si 111 和 333 反射的理论强度曲线



(a) σ 偏振



(b) π 偏振



(c) $\sigma + \pi$ 偏振

图 10 计算机模拟样品 GaAs 224 衍射摇摆曲线 第一晶体 Si 333, $\lambda = 1.4 \text{ \AA}$

辐射源具有强度高、偏振性好等优点,十分适用于薄膜双晶衍射高精度测量。

4) 不同衍射面的影响

采用不同的衍射面,也就是说X射线入射角改变,从而X射线在样品内的穿透深度也不同。根据X射线衍射运动学理论^[3],穿透深度可表示为

$$t_a = \left[\mu_0 \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_g} \right) \right]^{-1},$$

其中 μ_0 为样品对X射线的线吸收系数, γ_0 和 γ_g 分别为波矢与样品表面法线的方向余弦。我们的样品表面为(001),可算出,对波长为 $1.5 \text{ \AA}$ 样品 GaAs 113 衍射, X射线的穿透深度只有 $0.39 \mu\text{m}$, 也就是说,刚刚进入第一层,故只观察到一个峰。理论计算结果还表明,对 GaAs 113 衍射,三个反射峰的间距很小,而叠加在一起成一个峰。图 11 为计算机模拟的摇摆曲线,其结果与实验结果相符。

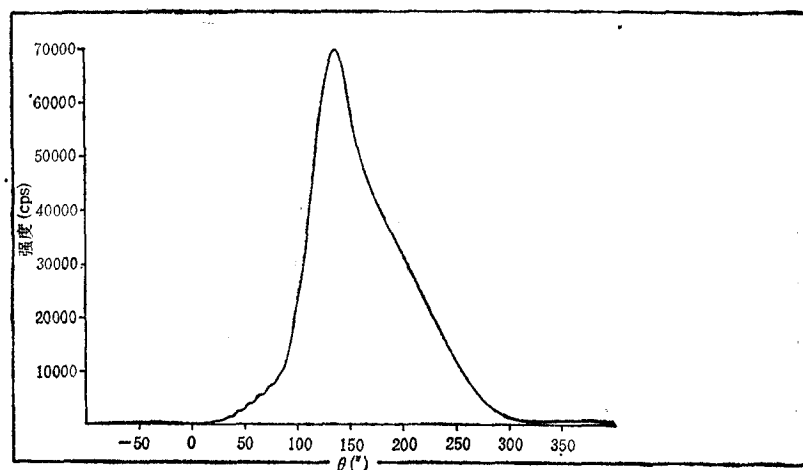


图 11 计算机模拟样品 GaAs 113 衍射摇摆曲线 第一晶体 Si 111, $\lambda = 1.5 \text{ \AA}$, 样品弯曲 $5''$

综上所述,我们应用X射线衍射动力学理论,计算衬底和多层膜的反射强度,模拟各种实验条件的双晶衍射摇摆曲线,解释实验观察到的全部结果,得到样品的真实结构。证实X射线双晶衍射技术和实验曲线的计算机模拟是研究多层膜结构样品的一种高精度、非破坏性的非常有用的技术。文中讨论的影响薄膜双晶衍射摇摆曲线的若干因素,是双晶衍射摇摆曲线分析中值得注意的问题。

作者之一感谢中国科学院和英国皇家学会提供到英国 Durham 大学合作研究的机会。感谢 B. K. Tanner 教授和 G. S. Green 博士有益的讨论。

- [1] 徐祖耀,金属学原理,上海科学技术出版社出版,(1965).
- [2] Z. G. Pinsker, Dynamical Scattering of X-ray in Crystal, Springer-verlag, Berlin, Heidelberg, (1978).
- [3] U. Pietsch and W. Borchard, *J. Appl. Cryst.*, **20**(1987), 8.

STUDY OF AlGaAs/GaAs WAVEGUIDE STRUCTURE BY X-RAY DOUBLE CRYSTAL DIFFRACTION

MAI ZHEN-HONG CUI SHU-FAN WANG CHAO-YING WU LAN-SHENG

Institute of Physics, Academia Sinica, Beijing, 100080

(Received 19 September 1990)

ABSTRACT

An AlGaAs/GaAs waveguide structure sample was investigated by X-ray double crystal diffraction technique. Based on the X-ray dynamical diffraction theory the reflection intensities of the substrate and the films were calculated. Comparing the calculated results with the experimental ones, the real structure of the sample was obtained. The factors affecting the double crystal diffraction rocking curves are discussed.

PACC: 7360F; 6110F