

1MeV Si⁺ 衬底加温注入 Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs 超晶格和 GaAs 的晶格损伤研究*

李岱青 官宝安 万 亚

(烟台师范学院物理系,烟台 264025)

朱沛然 周俊思 徐天冰

(中国科学院物理研究所离子束实验室,北京 100080)

穆 善 明

(中国科学院半导体研究所,北京 100083)

赵清太 王忠烈

(北京大学微电子研究所,北京 100871)

(1993 年 10 月 14 日收到)

用卢瑟福背散射/沟道技术研究了 1MeVSi⁺ 在衬底加温和室温下以不同剂量注入 Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs 超晶格和 GaAs 后的晶格损伤.在衬底加温下,观察到 Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs 超晶格和 GaAs 都存在一个动态退火速率与缺陷产生速率相平衡的剂量范围,以及两种速率失去平衡的临界剂量.超晶格比 GaAs 更难以损伤,并且它的两种速率失去平衡的临界剂量也大于 GaAs 中的相应临界剂量.用热尖峰与碰撞模型解释了晶格损伤积累与注入剂量和衬底温度的关系.用 CNDO/2 量子化学方法计算了 GaAs 和 Al_{0.3}Ga_{0.7}As 中化学键的相对强度,并根据计算结果解释了注入过程中 Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs 超晶格和 GaAs 中晶格损伤程度的差别.

PACC: 6180; 6170T; 7870

1 引 言

杂质扩散或离子注入后进行热退火技术能够产生超晶格的组份无序.这一技术可以用来制做光波导和高效率的量子阱激光器^[1-3].通常进行的热退火是一个高温处理过程.对 Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs 超晶格,相应的退火温度为 800—1000℃^[4-6].高温退火处理不仅使得器件制做工艺复杂化,而且导致超晶格的组分分解和表面金属覆盖膜与衬底之间的反应.这一切都对器件制做产生不利的影响.为了克服上述矛盾,可以用离子注入的方法在衬底加温的情况下通过离子束混合直接造成超晶格相邻层间的组份混合^[7,8].对于微电子

* 山东省教育委员会科研处及北京中关村地区联合分析测试基金资助的课题.

器件的制作,很有必要了解离子注入过程中晶格的损伤程度和损伤的空间分布。但超晶格中的离子注入损伤尤其是 MeV 能区离子注入损伤的研究工作还比较缺乏。在本工作中,我们研究了 1MeV Si^+ 在衬底加热条件下以不同的剂量注入 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ 超晶格后的晶格损伤,并与在完全相同的实验条件下对晶体 GaAs 的注入损伤进行了比较。还对某一确定剂量下,两者在衬底加热和不加热的情况下作了进一步的研究。为理解实验结果,对 GaAs 和超晶格中 Al—As 和 Ga—As 化学键的相对强度进行了量子化学计算,并按照计算结果对这两种材料中离子注入损伤的差异进行了讨论。

2 实 验

用分子束外延的方法(MBE)在(100)GaAs 衬底上生长了 50 个周期的 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ 超晶格。其中 GaAs 层的厚度为 10nm, $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 层的厚度为 30nm。注入离子为 1MeV 的硅离子,且注入剂量范围为 $5 \times 10^{14} - 5 \times 10^{16}$ 离子/ cm^2 。在 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ 超晶格和 GaAs 的注入过程中,衬底温度保持为 350℃ 或室温,注入剂量率为 500nA/ cm^2 。注入离子束偏离样品表面法线 7°以避免离子注入过程中的沟道效应。用卢瑟福背散射/沟道技术测量离子注入后晶格的损伤程度。分析束为能量 4.2MeV 的 Li^{+2} 离子束。测量沟道方向为[100]晶轴方向。分析束的背散射角度为 165°。

3 结果与讨论

图 1 是 1MeV Si^+ 在室温下以 2×10^{15} 离子/ cm^2 的剂量注入 GaAs 和 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ 超晶格以后所测得的背散射/沟道谱。显然二者呈现出完全不同的损伤特性。由注入离子所造成的损伤积累已经在 GaAs 中形成了一个靠近晶体表面的非晶层,但在 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ 超晶格中损伤程度却要小得多。需要更高的注入剂量才可能在超晶格中形成非晶层。

图 2 是 1MeV Si^+ 在 350℃ 衬底温度下注入 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ 超晶格后所测得的背散射/沟道谱。图中的谱线所对应的注入剂量分别为 5×10^{15} , 7×10^{15} , 1×10^{16} 和 5×10^{16} 离子/ cm^2 。由于在 5×10^{14} 和 2×10^{15} 离子/ cm^2 注入剂量下,相应的沟道谱的退道产额只比 5×10^{15} 离子/ cm^2 注入剂量下相应沟道谱的退道产额略小,为了使谱线更加简明,这两种剂量所对应的沟道谱就没有在图 2 中画出。实验表明在离子注入过程中,晶格损伤的积累并不随注入剂量的增加而线性增加。在低于 5×10^{15} 离子/ cm^2 注入剂量下,相应沟道谱的退道产额比没注入样品沟道谱的退道产额几乎没有多大变化,晶格损伤积累一直保持在非常低的程度上。但在高于这一剂量时,晶格损伤程度随注入剂量的增加而很快地增加。在 7×10^{15} 离子/ cm^2 注入剂量下,退道产额有了明显的增加。随着注入剂量的进一步增加,退道产额的增加则更加显著。在 1×10^{16} 离子/ cm^2 注入剂量下,在无损伤的表面下已经形成了损伤程度很大的损伤埋层。我们还可注意到, 5×10^{16} 离子/ cm^2 这样高的注入剂量并没有在超晶格中形成非晶层。尽管其注入剂量是 1×10^{16} 离子/ cm^2 的 5 倍,但前者的损伤程度只比后者稍大一些。显然在衬底加热条件下进行注入比

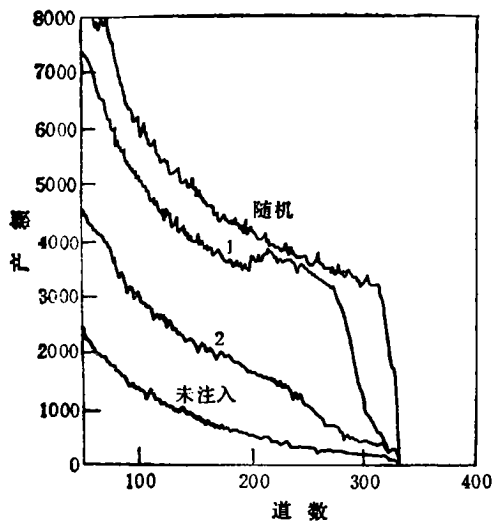


图1 1MeV Si⁺ 在室温下以 2×10^{15} Si⁺/cm² 剂量注入 GaAs 和 Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs 超晶格后所测得的背散射/沟道谱 1 为 GaAs; 2 为 Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs

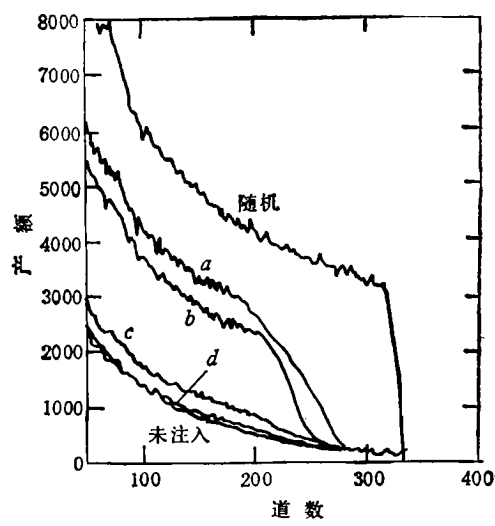


图2 1MeV Si⁺ 在 350°C 衬底温度下以 5×10^{15} , 7×10^{15} , 1×10^{16} 和 5×10^{16} 离子/cm² 的剂量注入 Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs 超晶格后所测得的背散射/沟道谱 谱线 a 为 5×10^{16} 离子/cm²; 谱线 b 为 1×10^{16} 离子/cm²; 谱线 c 为 7×10^{15} 离子/cm²; 谱线 d 为 5×10^{15} 离子/cm²

起室温注入来更难以在晶体中形成非晶层, 损伤程度的积累更加缓慢。

图 3 是 GaAs 所对应的背散射/沟道谱。图中的谱线所对应的实验条件与图 2 中谱线所相应的完全相同。可以看出 GaAs 中损伤积累随离子注入剂量的变化趋势类似于 Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs 超晶格内的情形。在 2×10^{15} 离子/cm² 注入剂量以下, GaAs 中的损伤程度很低。但高于这一剂量时, 损伤程度随入射离子剂量的增加而迅速增加。在 5×10^{15} 和 7×10^{15} 离子/cm² 注入剂量下, 在无损伤的表面下已经形成了损伤埋层。不同于室温下注入的情况是即使在 5×10^{16} 离子/cm² 的高注入剂量下在 GaAs 中也只能形成一个程度很大的损伤埋层, 而不能形成非晶层。类似于超晶格, 5×10^{16} 离子/cm² 注入剂量下的晶格损伤程度也只比 1×10^{15} 离子/cm² 注入剂量下的晶格损伤程度略大一些。通过图 1, 图 2, 图 3 的比

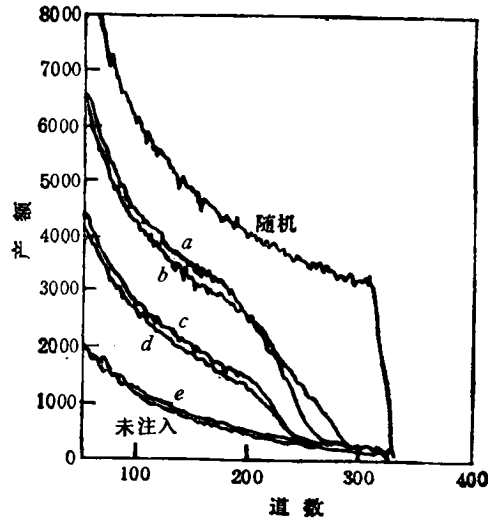


图3 1MeV Si⁺ 在 350°C 衬底温度下以 (a) 5×10^{16} , (b) 1×10^{16} , (c) 7×10^{15} , (d) 5×10^{15} , (e) 2×10^{15} 离子/cm² 的剂量注入 GaAs 后所测得的背散射/沟道谱

较可以看出, 在室温注入下 GaAs 比 Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs 超晶格更容易损伤。在 350°C 衬底加温注入下, 在 5×10^{15} 到 1×10^{16} 离子/cm² 注入剂量范围内, Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs 超

晶格的损伤程度总是小于相同剂量下 GaAs 的损伤程度。

离子注入过程中所观察到的晶格损伤实际上是缺陷产生过程与动态退火过程相互竞争的结果。王忠烈等曾提出热尖峰与碰撞模型^[9]，用以解释离子注入时硅中的结晶/非晶过程。这一模型能够很好地解释我们的实验结果，按照热尖峰与碰撞模型，碰撞原子级联能以如下两种方式产生动态退火：一种是热尖峰方式，另一种是碰撞移位原子重新结合到晶格位置的方式。碰撞移位过程除了产生动态退火以外，还可以产生晶格损伤。晶格中缺陷的存在将降低动态退火速率。为了对损伤程度与温度、注入剂量和动态退火之间的关系有一个比较定量的描述，引入相对退道产额：

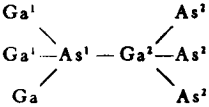
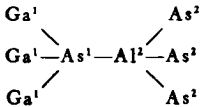
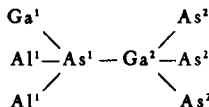
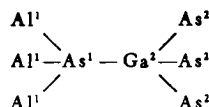
$$\chi' = \frac{Y_D - Y_V}{Y_R - Y_V}$$

上式中 Y_D 是背散射/沟道谱中损伤峰处的背散射产额， Y_R 和 Y_V 是同样道数或深度下随机谱和无损伤晶体沟道谱的背散射产额。 $\chi' = 0$ 和 1 则分别对应无损伤积累和完全非晶化两种极端的情形。 χ' 的有关计算结果如表 1 所示。从表中 χ' 随剂量和注入温度的关系可以看出，在 350℃ 注入温度下，当注入剂量不是很高时晶体中累积损伤密度就非常小。在这种情况下动态退火速率与缺陷产生速率相平衡。所以对 GaAs 和 $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs$ 超晶格，二者分别在 2×10^{15} 和 5×10^{15} 离子/cm² 的注入剂量以下只有很小的晶格损伤。随着注入剂量的进一步增加，当 GaAs 中的注入剂量大于 2×10^{15} 离子/cm²， $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs$ 超晶格中的注入剂量大于 5×10^{15} 离子/cm² 时， χ' 明显增大。这是由于累积损伤密度的增大使得动态退火速率下降。在这种情况下，动态退火速率小于缺陷产生速率并导致晶格中更大程度的损伤积累。因而在 350℃ 注入条件下存在动态退火速率和缺陷产生速率之间失去平衡的临界注入剂量。由表 1 中相对退道产额 χ' 随注入剂量的变化关系可以估计出 GaAs 和 $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs$ 超晶格所对应的临界注入剂量分别为 2×10^{15} 和 5×10^{15} 离子/cm²。在室温注入下，空位和填隙原子的迁移速率比起衬底加温时明显减慢，碰撞移位原子重新结合到晶格位置的几率下降，因而动态退火速率下降。这使得损伤的积累速率明显大于衬底加温注入下的损伤积累速率。在 350℃ 注入温度下， 2×10^{15} 离子/cm² 的注入剂量在 GaAs 和 $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs$ 超晶格中只造成了极轻微的晶格损伤，但在室温注入下却使得 GaAs 中形成了一非晶埋层， $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/$

表 1 相对退道产额 χ' 与剂量和注入温度的关系

样 品 剂量/(离子/cm ²)	GaAs		$Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs$ 超晶格	
	350℃	室 温	350℃	室 温
5×10^{14}	0.01687	—	0.01284	—
2×10^{15}	0.02931	0.9517	0.02589	0.2576
5×10^{15}	0.2180	—	0.03896	—
7×10^{15}	0.2713	—	0.08676	—
1×10^{16}	0.5502	—	0.4776	—
5×10^{16}	0.5808	—	0.5520	—

表 2 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 中化学键相对强度计算结果比较

x	原子簇体系	T_{ab}	W_{ab}
0.00		$\text{Ga}^1-\text{As}^1: 0.57$ $\text{As}^1-\text{Ga}^2: 0.50$ $\text{Ga}^2-\text{As}^2: 0.51$	$\text{Ga}^1-\text{As}^1: 0.66$ $\text{As}^1-\text{Ga}^2: 0.49$ $\text{Ga}^2-\text{As}^2: 0.51$
0.25		$\text{Ga}^1-\text{As}^1: 0.59$ $\text{As}^1-\text{Al}^2: 0.60$ $\text{Al}^2-\text{As}^2: 0.59$	$\text{Ga}^1-\text{As}^1: 0.67$ $\text{As}^1-\text{Al}^2: 0.69$ $\text{Al}^2-\text{As}^2: 0.66$
0.50		$\text{Ga}^1-\text{As}^1: 0.62$ $\text{As}^1-\text{Ga}^2: 0.53$ $\text{Ga}^2-\text{As}^2: 0.54$ $\text{Al}^1-\text{As}^1: 0.64$	$\text{Ga}^1-\text{As}^1: 0.73$ $\text{As}^1-\text{Ga}^2: 0.55$ $\text{Ga}^2-\text{As}^2: 0.55$ $\text{Al}^1-\text{As}^1: 0.74$
0.75		$\text{Al}^1-\text{As}^1: 0.66$ $\text{As}^1-\text{Ga}^2: 0.59$ $\text{Ga}^2-\text{As}^2: 0.56$	$\text{Al}^1-\text{As}^1: 0.77$ $\text{As}^1-\text{Ga}^2: 0.71$ $\text{Ga}^2-\text{As}^2: 0.58$

GaAs 超晶格中形成了损伤程度很大的损伤埋层。晶格中注入损伤积累随衬底温度的变化,说明通过适当控制注入时的衬底温度能够很好地抑制注入过程中的晶格损伤程度。

在室温和衬底加温注入下的实验结果都表明, $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ 超晶格比 GaAs 更难以损伤。我们认为 GaAs 和 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ 超晶格中化学键强度的不同是造成二者损伤差异的主导因素。为了证实这一点,我们用 CNDO/2 计算方法^[10],对 4 个模拟 GaAs 和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 晶体的原子簇体系进行量子化学计算。主要有关化学键相对强度的计算结果收集在表 2 中。为了简明,表中各原子簇体系中没有画出用于消除边界效应的 18 个氢原子。表中 W_{ab} 是原子 a 和原子 b 之间的维伯格键级, T_{ab} 是原子 a 与原子 b 之间的总的莫立肯重叠集居。 W_{ab} 和 T_{ab} 是两个标记化学键相对强弱的量子化学指标, W_{ab} 或 T_{ab} 越大则化学键的相对强度越大。由表 1 可以看出, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x \approx 0$) 中的 Al—As 和 Ga—As 键的强度总是大于 GaAs 中 Ga—As 键的强度。观察表 1 中化学键强度随 Al 元素含量 x 的变化还可以发现, x 越大则 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 中的化学键强度越大。由于超晶格中 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 层的化学键强度大于 GaAs 层的化学键强度,结果在注入过程中 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 层中就难以产生损伤。这导致了在衬底加温注入下, $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ 超晶格的临界剂量大于 GaAs 中相应的临界剂量,且在相同的注入剂量下 GaAs 中的损伤程度总是大于超晶格中的损伤程度。Ralston 等曾观察到在离子轰击过的 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ 超晶格中, GaAs 层中的缺陷密度明显大于 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 层中的缺陷密度^[11]。这与我们此处的计算结果和实验结果是一致的。由于在我们的实验结果里超晶格中 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 层里 Al 元素的含量保持不变,所以化学键强度随 Al 含量增加而增大

的效果没有显示出来。Jenčič 等曾研究了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的离子注入非晶化过程^[12], 他们发现随着 Al 含量的增加 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 更不容易非晶化。这与我们此处的计算结果也一致。

4 结 论

在室温和衬底加温下,用 1MeV Si^+ 注入了 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ 超晶格和 GaAs, 用卢瑟福背散射/沟道技术测量了离子注入在晶格内所造成的损伤积累。GaAs 和 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ 超晶格中的损伤积累可以成功地运用热尖峰与碰撞模型予以解释。提出了 GaAs 与 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ 超晶格中化学键强度的不同是导致二者晶格损伤差异的主要原因。用 CNDO/2 量子化学方法计算了 GaAs 和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 中化学键的相对强度。化学键相对强度的计算结果与所观察到的实验结果有良好的定性符合。

感谢殷士端研究员和潘礼庆博士在本工作的完成过程中所给予的帮助和提出的建设性意见。

- [1] Fulin Xiong, T. A. Tombrello, H. Wang, T. R. Chen, H. Z. Chen, H. Morkoc and A. Yariv, *Appl. Phys. Lett.*, **54**(1989), 730.
- [2] D. R. Myers, Kyu Lee, T. Hausken, R. J. Simes, H. Ribot, F. Laruelle and L. A. Coldren, *Appl. Phys. Lett.*, **57**(1990), 2051.
- [3] Robert L. Thornton, John E. Epler and Thomas L. Paoli, *Appl. Phys. Lett.*, **51**(1987), 1983.
- [4] S.-Tong Lee, Samuel Chen, G. Rajeswaran, G. Braunstein, P. Fellingner and J. Madathil, *Appl. Phys. Lett.*, **54**(1989), 1145.
- [5] H. Leier, A. Forchel, G. Hörcher, J. Hommel, S. Bayer, H. Rothfritz, G. Weimann and W. Schlapp, *J. Appl. Phys.*, **67**(1990), 1805.
- [6] S.-Tong Lee, Samuel Chen, G. Braunstein, Kei-Yu Ko, Mary L. Ott. and T. Y. Tan, *Appl. Phys. Lett.*, **57**(1990), 389.
- [7] W. Xia, M. Fernandes, C. A. Hewett, S. S. Lau, D. B. Poker and J. P. Biersack, *Nucl. Instr. and Meth. B*, **37/38**(1989), 408.
- [8] W. Xia, S. C. Lin, S. A. Pappert, C. A. Hewett, M. Fernanoles, T. T. Vu, P. K. L. Yu and S. S. Lau, *Appl. Phys. Lett.*, **55**(1989), 2020.
- [9] Zhong-lie Wang, N. Itoh, Qing-tai Zhao and N. Matsunami, *Nucl. Instr. and Meth. B*, in printing.
- [10] J. N. Murrell and A. J. Harget, *Semi-empirical Self-consistent-field Molecular-orbital Theory of Molecules* (Wiley-Intersciences, 1972).
- [11] J. Ralston, G. W. Wicks, L. F. Eastman, B. C. De Cooman and C. B. Carter, *J. Appl. Phys.*, **59**(1986), 120.
- [12] I. Jenčič, M. W. Bench, I. M. Robertson, M. A. Kirk and J. Peterneij, *Nucl. Instr. and Meth. B*, **59/60**(1991), 458.

STUDIES OF LATTICE DAMAGE CAUSED BY 1MeV Si⁺ IMPLANTATION INTO Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs SUPERLATTICES AND GaAs AT ELEVATED SUBSTRATE TEMPERATURE

LI DAI-QING GONG BAO-AN WAN YA

(*Yantai Teachers' College, Yantai 264025*)

ZHU PEI-RAN ZHOU JUN-SI XU TIAN-BING

(*Institute of Physics, Academia Sinica, Beijing 100080*)

MU SHAN-MING

(*Institute of Semiconductors, Academia Sinica, Beijing 100083*)

ZHAO QING-TAI WANG ZHONG-LIE

(*Institute of Microelectronics, Peking University, Beijing 100871*)

(Received 14 October 1994)

ABSTRACT

Rutherford backscattering/channeling technique has been used to investigate the lattice damage caused by 1MeV Si⁺ implantation into Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs superlattices and GaAs at elevated substrate temperature and room temperature for different doses. For elevated substrate temperature irradiation, a dose range for balance between defect production and dynamic annealing, and a critical dose for unbalance between them are observed for both Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs superlattices and GaAs. The superlattices are more difficult to be damaged than GaAs, and the critical dose for the former is also larger than that for the latter. The hot spot and knock-on model is used to interpret the temperature and dose dependence of damage accumulation in the two materials. The relative bond strength in GaAs and Al_xGa_{1-x}As are calculated using CNDO/2 quantum chemistry method to explain the differences of damage accumulation in Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs superlattices and GaAs.

PACC: 6180; 6170T; 7870