

双势垒超晶格结构的同步辐射及 X 射线双晶衍射研究

王玉田 庄 岩 江德生 杨小平

(中国科学院半导体研究所, 国家光电子工艺中心, 北京 100083)

姜晓明 武家杨 修立松 郑文莉

(中国科学院高能物理研究所, 北京 100039)

(1995 年 9 月 12 日收到; 1995 年 9 月 27 日收到修改稿)

利用高精度的 X 射线双晶衍射和同步辐射散射对可用于半导体红外探测器的双势垒超晶格材料进行了研究, 并运用 X 射线衍射动力学理论进行模拟计算, 得到了与实验结果符合得很好的理论曲线. 同时发现包络函数节点处的卫星峰对结构参数的变化极为灵敏. 以此进行模拟计算, 可准确地确定出样品的结构参数, 厚度误差范围为 $\pm 0.1 \text{ nm}$. 并利用 X 射线衍射运动学理论对实验中观测到的卫星峰调制现象给予了解释.

PACC: 6110; 6855

1 引 言

X 射线衍射以其无损伤、准确、制样简单等优点已成为半导体材料和半导体器件工艺检测的不可缺少的有力工具之一. 目前世界上普遍采用 X 射线双晶衍射仪测量样品, 然后运用 X 射线衍射动力学理论模拟计算, 来确定出样品的结构参数^[1-5]. 尤其对超晶格来讲, 主要兴趣一般集中在一个周期只含两层的简单超晶格结构, 所采用的仪器基本为光源强度小的普通衍射仪. 而对一个周期包含三到四层的复杂超晶格结构方面的工作极少. 随着半导体材料科学、半导体器件工艺的不断发展和人们对器件性能的要求越来越高. 结构复杂但器件性能更为优越的超晶格材料越来越引起人们广泛的注意. 复杂结构的 X 射线测量工作, 由于卫星峰的调制现象复杂, 使理论计算变得较为困难. 为了得到准确的结构参数, 需要测量远离衬底峰的、强度很弱的卫星峰, 因此仅用普通的 X 射线双晶衍射是不够的.

本文研究的样品是用分子束外延(MBE)方法生长的、可用于做近红外探测器(波长为 $3-5 \mu\text{m}$)的双势垒超晶格材料, 它在一个周期内包含四层. 我们用光源强度大的同步辐射来探测远离衬底峰的卫星峰, 用精度高的 X 射线双晶衍射仪测量衬底峰附近的卫星峰. 然后对上述结果进行动力学模拟计算, 得到了准确的结构参数, 并运用 X 射线运动学理论对卫星峰的调制现象给予了解释.

2 理论模型

对于一个具有 N 层的多层膜材料, 根据 X 射线衍射动力学理论, 其 $(00h)$ 衍射的 X 射线反射振幅 $R_{h,N}$ 为^[4]

$$R_{h,N} = [R_{h,1} \pm R_{h,N-1}(T_{h,1}T_{h,1} - R_{h,1}R_{h,1})]/(1 - R_{h,N-1}R_{h,1}), \quad (1)$$

其中

$$R_h = \xi_1 \xi_2 (C_1 - C_2)/(C_2 \xi_2 - C_1 \xi_1), \quad (2)$$

$$T_h = C_1 C_2 (\xi_1 - \xi_2)/(C_2 \xi_2 - C_1 \xi_1), \quad (3)$$

R_h , T_h 分别为某一层 $(00h)$ 衍射的反射波振幅和透射波振幅. 并且^[6]

$$\xi_{1,2} = (-z \pm \sqrt{q + z^2})/\chi_h, \quad (4)$$

$$C_{1,2} = (\chi_0 - z \pm \sqrt{q + z^2}) \exp\left(-i \frac{\pi t}{\lambda \gamma_0}\right), \quad (5)$$

$$q = b\chi_h \chi_{\bar{h}}, \quad (6)$$

式中, χ_0 和 χ_h 分别为 0 级和 h 级的极化矢量的傅里叶系数, $\chi_{\bar{h}}$ 为 χ_h 的复共轭, λ 为 X 射线波长, $b = \gamma_0/\gamma_h$, γ_0 和 γ_h 分别为入射束和衍射束的方向余弦. 在对称衍射条件下

$$z = \sin(2\theta_B) \cdot \Delta\omega, \quad (7)$$

$$\Delta\omega = \theta - \theta_B + (\epsilon_{\perp} \cos^2 \alpha + \epsilon_{\parallel} \sin^2 \alpha) \tan \theta_B \pm (\epsilon_{\perp} - \epsilon_{\parallel}) \sin \alpha \cos \alpha, \quad (8)$$

其中, θ_B 为衬底的 Bragg 衍射角, α 为晶体表面与衍射晶面的夹角, $\epsilon_{\perp}$, $\epsilon_{\parallel}$ 分别为外延层生长方向和水平方向的应变.

3 实验条件

图 1 为实验中所采用的同步辐射光路图(国家同步辐射实验室散射站), M_2 为 Si(220)弯晶单色器, 选择波长为 0.1546 nm. M_1 为镀 Pt 曲面反射镜. 样品放在 M_3 处.

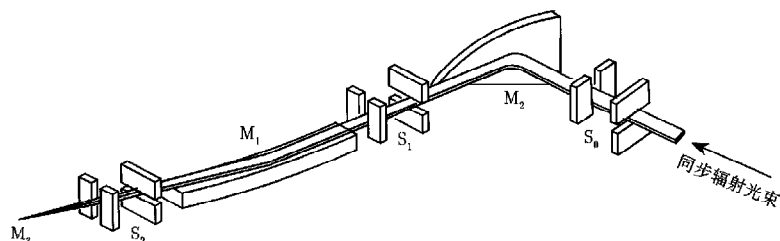


图 1 同步辐射光路图 S_0, S_1, S_2 为光束限制狭缝; M_1 为镀 Pt 的曲面反射镜;
 M_2 为 Si(220) 弯晶单色器; M_3 为样品台

实验所用的 X 射线双晶衍射仪是日本理学 SLX-1A 型超晶格测定装置, X 射线发生器为 RU-200BH, 12 kW 转靶, 电压 50 kV, 电流 150 mA. 取 $\text{CuK}\alpha_1$ 辐射, $\lambda =$

0.154051 nm. 第一晶体为 Ge(004)非对称衍射. 测量方法是 $\theta/2$ 联动扫描. 为了提高实验精度, 采用累加计数方法. ω 扫描步进 0.001° .

本文所用样品为在 GaAs 衬底上, 用 MBE 方法生长的, 用于作红外探测器的 AlAs/GaAs/AlAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 双势垒超晶格, 总共 50 个周期. 能带示意图如图 2. 其工作原理如下: 当一定波长的

光照射到样品上, 阱层 GaAs 中的载流子从基态跳到激发态, 在电场作用下样品中形成电流. 而阱层 GaAs 的量子化能级的位置取决于势垒对阱中的电子态的量子化限制, 主要与阱层宽度有关. 此外垒层 AlAs 的厚度直接影响着由于隧道效应而形成的暗电流的大小. 因此, 准确地测量各层厚度, 对器件性能和工艺有重要的意义.

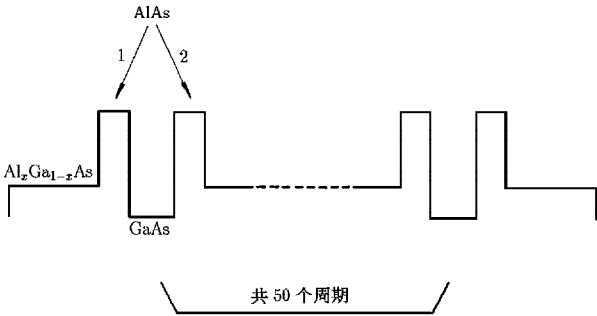


图 2 样品的能带示意图

4 实验结果和讨论

图 3 中 a 是样品(002)X 射线双晶衍射曲线. 从图上总共可看到 27 个卫星峰. 并且发现卫星峰强度明显地受到几个包络的调制, $\pm 1, \pm 10, \pm 11, \pm 12, \pm 13$ 级卫星峰强度很弱. ± 6 级卫星峰接近消光. 为了能更清楚地看到包络的调制现象, 我们用同步辐射测量同一样品 (如图 3 中 c 所示). 比较图 3 中 a, c 可以看到, 由于同步辐射源的功率大, 在远

离衬底峰的区域, 它比双晶衍射曲线在衬底峰两侧都多观测到一个包络, 总共 42 个卫星峰. 同时还清楚地检测到了双晶衍射曲线所难以测到的 $\pm 10, \pm 11, \pm 12, \pm 13$ 级卫星峰, 这些数据对准确地计算各层厚度提供了有力的依据. 从图 3 的 c 中还可以看到, 由于同步辐射采用的单色器是 Si (220), 测量 GaAs/AlAs 样品会产生一定的色散. 并且其发散度也是比较大的, 导致衬底峰明显加

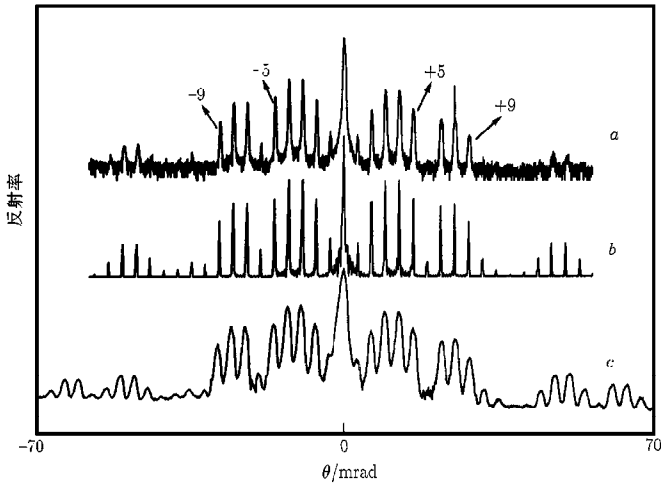


图 3 a 为样品(002)X 射线双晶衍射曲线, b 为动力学模拟计算曲线, c 为样品(002)同步辐射衍射曲线

宽, 已难以分辨出 ± 1 级卫星峰. 为此我们将双晶衍射曲线与同步辐射的结果结合起来: 在衬底峰附近以精度高的双晶衍射曲线为准, 而在远离衬底峰处则以强度大的同步辐射结果为依据.

图 3 的 b 为 X 射线动力学模拟曲线, 与图 3 的 a, c 相比可见理论曲线与实验曲线符合得很好. 在图 3 的 a 中, $\pm 10, \pm 11, \pm 12, \pm 13$ 级卫星峰强度很弱, 因此我们参照图 3 中 c 的同步辐射结果, 模拟参数为 $d_{\text{Al}_2\text{Ga}_{1-x}\text{As}} = 17.0 \text{ nm}$, $d_{\text{AlAs}} = 2.20 \text{ nm}$, $d_{\text{GaAs}} = 4.40 \text{ nm}$, $d_{\text{AlAs}} = 2.00 \text{ nm}$, $x = 0.364$, 周期 $\Lambda = 25.65 \text{ nm}$.

为了说明卫星峰包络调制机制, 我们采用物理图像清晰的 X 射线衍射运动学理论加以解释.

对于一个周期内包含 A, B, C, D 四层并具有 N 个周期的超晶格, 其衍射强度^[1,2] (假设入射波的振幅强度为 1) 为

$$I = (\gamma_0 / |\gamma_h|) \frac{\sin^2(N \sum_j \Phi_j)}{\sin^2(\sum_j \Phi_j)} \times I', \quad (9)$$

其中

$$\Phi_j = A_j Y_j \quad (j = A, B, C, D), \quad (10)$$

$$A_j = \frac{r_e \lambda |F_j| t_j}{V_j \sqrt{|\gamma_0 \gamma_h|}}, \quad (11)$$

$$Y_j = -(\gamma_0 / |\gamma_h|)^{1/2} \frac{\pi V_j \sin(2\theta_B) \Delta\omega}{r_e \lambda^2 |F_j|}, \quad (12)$$

$$\Delta\omega = \theta - \theta_B + (\epsilon_{\perp} \cos^2 \alpha + \epsilon_{\parallel} \sin^2 \alpha) \tan \theta_B \pm (\epsilon_{\perp} - \epsilon_{\parallel}) \sin \alpha \cos \alpha, \quad (13)$$

式中, F_j 为第 j 层的结构因子, λ 为 X 射线波长, r_e 为电子经典半径, θ_B 为衬底的 Bragg 角, V_j 为第 j 层的晶胞体积, γ_0, γ_h 分别为入射束和反射束的方向余弦, $\epsilon_{\perp j}, \epsilon_{\parallel j}$ 分别为第 j 层的生长方向和水平方向相对于衬底的失配应变, t_j 为第 j 层的厚度, α 为衍射晶面与晶体表面之间的夹角.

$$I' = I_1 + I_2 + I_3, \quad (14)$$

其中

$$I_1 = \Psi_A^2 + \Psi_B^2 + \Psi_C^2 + \Psi_D^2, \quad (15)$$

$$I_2 = 2 \Psi_A \Psi_B \cos(\Phi_A + \Phi_B) + 2 \Psi_B \Psi_C \cos(\Phi_B + \Phi_C) + 2 \Psi_A \Psi_D (\Phi_C + \Phi_D), \quad (16)$$

$$I_3 = 2 \Psi_A \Psi_C \cos(\Phi_A + 2\Phi_B + \Phi_C) + 2 \Psi_B \Psi_D \cos(\Phi_B + 2\Phi_C + \Phi_D) + 2 \Psi_A \Psi_D \cos(\Phi_A + 2\Phi_B + 2\Phi_C + \Phi_D), \quad (17)$$

而 $\Psi_j = \frac{\sin \Phi_j}{Y_j}$ 为各层的包络函数. 它相当于单层异质外延所形成的衍射强度分布函数. 当 $\Phi_j = \pi/2$ 时出现极大值, 即对应这一层的衍射峰. 而当 $\Phi_j = m\pi$ 时, 出现一系列的极小值, 于是在衍射峰两侧出现一系列的干涉条纹, 条纹周期与层厚 t_j 有关. 这就是 X 射线衍射 pendellösung 现象.

对于由 A, B, C 和 D 四层组成的超晶格结构, 当 $\sum_j \Phi_j = n\pi$ 时, 衍射强度有极大值,

这就是超晶格的卫星峰,但它的强度受到了一个周期中各层包络函数的调制,形成了卫星峰的包络调制现象.

对应于 $\sum_j \Phi_j = n\pi$, 有

$$\frac{\sin^2\left(N\sum_j \Phi_j\right)}{\sin^2\left(\sum_j \Phi_j\right)} = N^2. \quad (18)$$

当 $\Phi_j = n\pi$ 时, $\Psi_j = 0$, 即为 j 层包络函数的节点. 在节点附近, Ψ_j 随 $\Delta\omega$ 的变化非常灵敏. 以 A 层为例, 当 $\Phi_A \rightarrow n\pi$ 时, I' 的变化主要来自于 Ψ_A 的变化. 而其余各层的包络函数 Ψ_j ($j = B, C, D$) 的变化则较为平缓. 因此对 Φ_A 节点附近的卫星峰强度的模拟计算, 可基本排除其余各层的影响, 准确得出样品中 A 层的结构参数. 用同样方法, 可得到样品中其余各层准确的结构参数.

在图 4 中, 曲线 a, b, c 分别是厚度为 2.20, 4.40, 17.00 nm 的单层 AlAs, GaAs, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 所产生的包络曲线. 为使曲线 a, b, c 对应起来, 我们将所有曲线强度归一化.

P, Q, R 分别为曲线 a, b, c 的节点. 对于 c 曲线来讲, 在节点

R 附近, 入射角 θ 微小的改变就会引起曲线 c 较大的变化. 而远离包络节点处, 曲线 c 的变化则较为平缓. 利用包络函数的这一特点, 对超晶格的处于包络函数节点附近的卫星峰进行模拟计算分析, 可得到有关超晶格的准确结构参数. 同时可以看到, 由于包络函数在远离节点处的变化较为平缓, 因而它对超晶格结构参数变化的反应就不是很敏感, 依据处在这些位置附近的卫星峰进行模拟计算, 相应的误差也就较大.

图 5 为用上述动力学理论模型得到的理论计算曲线. 在模拟计算中, 我们只是改变 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 层和 GaAs 层的厚度, 但保持周期值的恒定, 模拟参数列于表 1. 从图 5 中可以看到, 在 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, GaAs 层厚度发生 0.1 nm 的变化时, 处于 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, GaAs 层包络曲线节点附近的 ± 1 , ± 6 级卫星峰的强度发生了明显变化, ± 1 级卫星峰随 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 层厚度的减少而增强. ± 6 级卫星峰则随 GaAs 层厚度的增加而降低. 与图 3 实验曲线相比较, 曲线 c 与实验曲线符合得最为接近, 曲线 a, b 则相对偏差较大. 由此可以定出 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 层的厚度范围为 $d = 17.00 \pm 0.10$ nm. GaAs 层的厚度范围为 $d = 4.40 \pm 0.10$ nm.

同理, 在图 6 的模拟计算中, 我们改变 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 层和 AlAs 层的厚度, 同时保持周

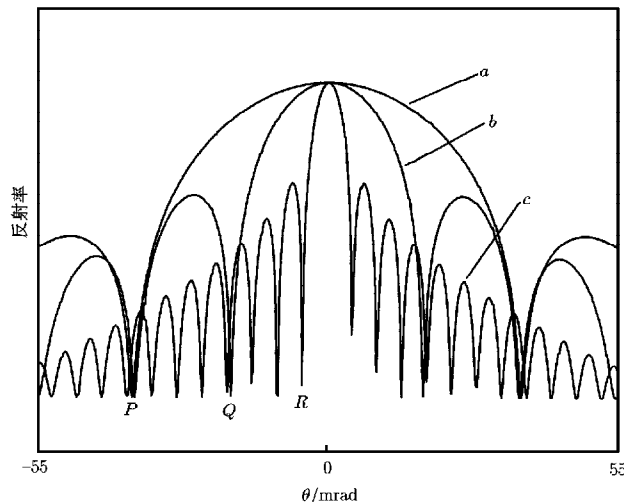


图 4 单层 GaAs, AlAs, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的包络调制曲线

表 1 图 5 所对应的动力学模拟参数

图 5 曲线	$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$		AlAs		GaAs		AlAs	
	$d(\text{nm})$	x	$d(\text{nm})$	x	$d(\text{nm})$	x	$d(\text{nm})$	x
a	17.00	0.364	2.18	—	4.41	—	2.06	—
b	16.90	0.364	2.18	—	4.51	—	2.06	—
c	16.80	0.364	2.18	—	4.61	—	2.06	—

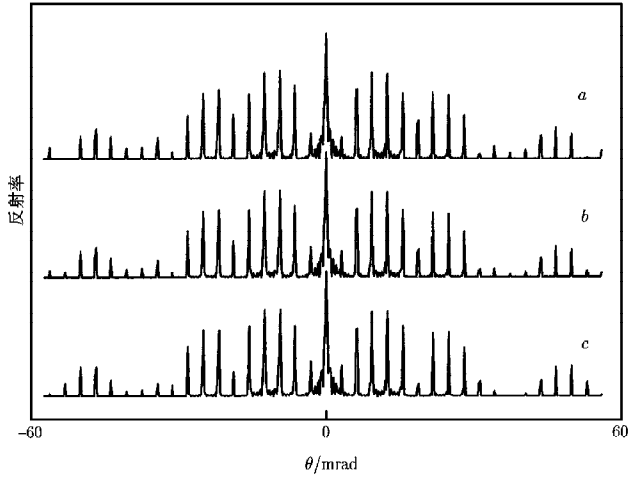


图 5 X 射线动力学模拟曲线 a 为 $d_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}} = 17.00 \text{ nm}$, $d_{\text{GaAs}} = 4.41 \text{ nm}$; b 为 $d_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}} = 16.90 \text{ nm}$, $d_{\text{GaAs}} = 4.51 \text{ nm}$; c 为 $d_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}} = 16.80 \text{ nm}$, $d_{\text{GaAs}} = 4.61 \text{ nm}$

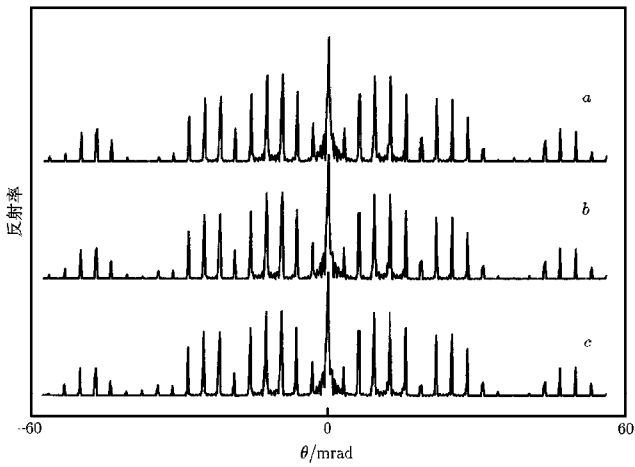


图 6 X 射线模拟曲线 a 为 $d_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}} = 17.00 \text{ nm}$, $d_{\text{AlAs}} = 2.18 \text{ nm}$; $d_{\text{AlAs}} = 2.06 \text{ nm}$, b 为 $d_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}} = 16.90 \text{ nm}$; $d_{\text{AlAs}} = 2.23 \text{ nm}$, $d_{\text{AlAs}} = 2.11 \text{ nm}$; c 为 $d_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}} = 16.80 \text{ nm}$; $d_{\text{AlAs}} = 2.28 \text{ nm}$, $d_{\text{AlAs}} = 2.16 \text{ nm}$

期值不变, 模拟参数列于表 2. 从图 6 中可以看到, 随 AlAs 层厚度发生 0.1 nm 的改变时, 处于 AlAs 层包络曲线节点附近的 ± 10 , ± 11 , ± 12 , ± 13 级卫星峰的相对强度产生了变化. 与图 3 实验曲线相比较, 曲线 c 与实验曲线符合得最好, 最终可定出 AlAs 层的厚度为 $d=2.20 \pm 0.10$ nm 和 $d=2.00 \pm 0.10$ nm.

表 2 图 6 所对应的动力学模拟参数

图 6 曲线	Al _x Ga _{1-x} As		AlAs		GaAs		AlAs	
	d(nm)	x	d(nm)	x	d(nm)	x	d(nm)	x
a	17.00	0.364	2.18	—	4.41	—	2.06	—
b	16.90	0.364	2.23	—	4.41	—	2.11	—
c	16.80	0.364	2.28	—	4.41	—	2.16	—

5 结 论

同步辐射具有很高的强度, 可探测到普通衍射仪所得不到的弱信号. 把它与高精度的 X 射线双晶衍射和 X 射线动力学理论模拟计算结合起来, 可得到准确的样品结构信息. X 射线运动学理论清楚地解释了卫星峰调制包络的物理图像. 对包络节点附近的卫星峰强度的模拟计算, 可大大提高模拟计算的精度.

[1] V.S.Speriosu, *J. Appl. Phys.*, **52**(10)(1981), 6094.
[2] V.S.Speriosu and T.Vreeland Jr., *J. Appl. Phys.*, **56**(6)(1984), 1591.
[3] J.M.Vandenberg, S.N.G.Chu *et al.*, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, **240**(1992), 141.
[4] L.Tapfer *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **67**(3)(1990), 1298.
[5] P.Auvray, M. Baudet and A. Regreny, *J. Appl. Phys.*, **62**(2)(1987), 456.
[6] W.H.Zachariasen, *Theory of X-Ray Diffraction in Crystals*, (Wiley, New York, 1945), p. 82.

STUDY OF DOUBLE-BARRIER SUPERLATTICE BY SYNCHROTRON RADIATION AND DOUBLE- CRYSTAL X-RAY DIFFRACTION

WANG YU-TIAN ZHUANG YAN JIANG DE-SHENG YANG XIAO-PING

(*Institute of Semiconductors, Academia Sinica; National Research Center for Optoelectronic Technology, Beijing 100083*)

JIANG XIAO-MING WU JIA-YANG XIU LI-SONG ZHENG WEN-LI

(*Institute of High Energy Physics, Academia Sinica, Beijing 100039*)

(Received 12 September 1995; revised manuscript received 27 September 1995)

ABSTRACT

A AlAs/GaAs/AlAs/AlGaAs double-barrier superlattice grown on GaAs substrate by MBE has been studied by combining double-crystal X-ray diffraction and synchrotron radiation. This combination provides a comprehensive structural analysis. During simulated by X-ray dynamical diffraction theory, we find the intensity of satellite peaks which situated near-by the modulated wave point of one layer are very sensitive to the variation of the layer's structural parameters. According to these, the accurate layer thickness can be get with an error less than 0.1 nm. The modulated phenomenon is investigated by X-ray kinematical diffraction theory.

PACC: 6110; 6855