

透射式 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层 X 射线衍射摇摆曲线半峰宽研究

李晓峰 张景文 高鸿楷 侯 洵
(中国科学院西安光学精密机械研究所光电子学研究室,西安 710068)

摘 要 本文研究了晶体 X 射线摇摆曲线半峰宽同其晶格完整性之间的关系,外延层之间 X 射线衍射的非相干叠加以及热应力引起的晶格应变和晶面弯曲对摇摆曲线半峰宽宽窄的影响。
关键词 AlGaAs/GaAs; X 射线衍射; 应力; 应变; 光电阴极

0 引言

在半导体外延层的生长过程中,常利用其某一晶面的 X 射线衍射摇摆曲线半峰宽的宽窄来评价外延层结晶质量的好坏¹。同样在透射式 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层的 MOCVD 生长过程中,也是利用 GaAs(400)晶面的 X 射线衍射摇摆曲线半峰宽的宽窄来评价其外延层结晶质量的好坏,以便优化外延生长工艺,使外延的生长工艺达到最佳。根据透射式 GaAs 光电阴极制作工艺的要求,要在 GaAs 衬底上交替生长两层 AlGaAs 外延层和两层 GaAs 外延层,一般来讲,AlGaAs 外延层和 GaAs 外延层 X 射线衍射摇摆曲线的半峰宽越宽,其结晶质量越差,反之半峰宽越窄,其结晶质量越好。然而外延层的结晶质量和半峰宽的这种对应关系并不是绝对的,而是有条件的。特别是对于透射式 GaAs 光电阴极层 AlGaAs/GaAs 外延层这种特殊的多层器件结构外延层来讲,除结晶质量外,其它因素同样也会影响其 X 射线衍射摇摆曲线半峰宽的宽窄。所以在透射式 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层的 MOCVD 生长过程中,当利用其摇摆曲线半峰宽来评价外延层的结晶质量时,应该充分考虑到这些影响摇摆曲线半峰宽宽窄的其他因素,只有这样才能得出正确的结论,为优化外延生长工艺提供科学的依据。因此对影响透射式

GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层 X 射线衍射摇摆曲线半峰宽宽窄的因素进行研究是很有必要的。

1 X 射线衍射摇摆曲线及其半峰宽 (FWHM)

任何一种晶体都可以看作为一种 X 射线的衍射光栅,对于透射式 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层来讲也不例外。因此在透射式 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层的 MOCVD 生长过程中,可以利用 X 射线衍射监测外延层的晶格生长质量。当在衍射面内讨论晶格的衍射问题时,可以将晶体的一族平行晶面简化为一列平行线,这样就可以将三维的衍射问题简化为一维的衍射问题。根据一维 X 射线衍射的运动学理论²,衍射强度随衍射角变化的关系为

$$I=A(\pi\Delta\theta)^{-1}\sin^2(B\pi\Delta\theta) \tag{1}$$

式中 I 为 X 射线的衍射强度, A 、 B 为常量, $\Delta\theta$ 为与衍射极大值所对应的 Bragg 衍射角的角位移。由式(1)看出当衍射角满足 Bragg 衍射条件时,衍射强度获极大。衍射强度随衍射角变化的曲线即为摇摆曲线,显然理想晶体的摇摆曲线及其半峰宽是一定的。

对于实际的晶体而言,由于晶体的不完善性,

其晶面就会存在晶面间距的变化梯度 Δd , 因此满足 Bragg 衍射极大条件的衍射角就从一个特定的 Bragg 衍射角 θ 变为一特定的变化范围 $\Delta\theta$ 从而使摇摆曲线的半峰宽较理想晶体摇摆曲线半峰宽有所展宽. 所以从某种程度上讲, 晶体 X 射线衍射摇摆曲线半峰宽的宽窄是其晶格完整性的体现. 所以在透射式 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层的 MOCVS 的生长过程中, 通过监测外延层摇摆曲线半峰宽的宽窄就可以获得外延层结晶质量方面的信息, 从而为优化外延工艺提供科学的依据. 然而由于外延层和衬底以及处延层之间存在衍射束的相互叠加, 另外外延层和衬底以及外延层之间也存热应力, 因此在它们的影响下, 外延层 X 射线衍射的摇摆曲线半峰宽就会展宽, 所以在分析透射式 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层摇摆曲线半峰宽时应该充分考虑到外延层之间衍射束的相互叠加以及热应力对摇摆曲线半峰宽宽窄的影响.

2 外延层 X 射线的衍射束非相干叠
加对摇摆曲线半峰宽的影响

当在衬底上所生长的外延层具有多层结构时, 各外延层之间的 X 射线衍射就要相互叠加. 如果外延层的厚度在 X 射线的相干长度范围内 (如超晶格³), 那么这种叠加就是一种相干叠加, 否则就是一种非相干叠加. 对于非相干叠加而言, 假设各外延层的摇摆服从高斯分布, 那么非相干叠加所得的摇摆曲线的半峰宽就是各外延层摇摆曲线半峰宽的几何和⁴, 即

$$FWHM = (\sum_i \Delta^2)^{1/2} \tag{2}$$

式中 Δ 为各外延层摇摆曲线的半峰宽.

透射式 GaAs 光电阴极的制作要求在 GaAs 衬底上交替生长两层 AlGaAs 外延层和两层 GaAs 外延层, 且每一外延层的厚度均在 1 μm 以上 (最后一层保护层除外)⁵, 而由于受 X 射线源单色性的限制, X 射线的相干长度很小 (不超过 1 μm), 因此其 AlGaAs/GaAs 外延层 X 射线衍射束的叠加就是一种非相干叠加, 其 X 射线衍射摇摆曲线的半峰宽对 AlGaAs 而言就是两层 AlGaAs 外延层摇摆曲线半峰宽的非相干叠加, 对 GaAs 而言就是 GaAs 衬底以及两层 GaAs 外延层的摇摆曲线半峰宽的非相干叠加. 图 1 是透射式 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 四层结构外延层 165LP 样品的 X 射线衍射摇摆曲线. 将该样

品的最后两层外延层通过选择性腐蚀去除后, 得一透射式 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 两层结构外延层, 该外延层的摇摆曲线如图 2 所示.

对四层结构外延层, 其 AlGaAs 外延层 X 射线衍射摇摆曲线的半峰宽为 111", GaAs 外延层 X 射线衍射摇摆曲线的半峰宽为 120". 对两层结构外延层, AlGaAs 外延层摇摆曲线的半峰宽为 51", GaAs 外延层摇摆曲线的半峰宽为 50". 由此可见, 四层结构外延层由于存在外延层衍射的非相干叠加, 因此外延层的摇摆曲线半峰宽较宽, 而两层结构外延层由于不存在外延层的非相干叠加, 因此外延层衍射的摇摆曲线半峰宽较窄. 所以根据以上的讨论可以看出对于较厚的外延层来讲, 由于存在 X 射线衍射的非相干叠加, 外延层的层数越多, 其外延层摇摆曲线的半峰宽就越宽.

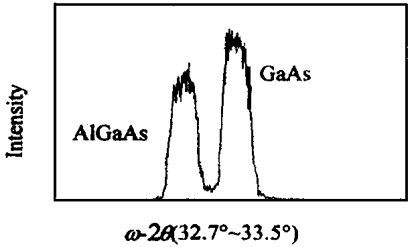


图 1 样品 165LP 四层结构外延层摇摆曲线
Fig. 1 Rocking curve of four layers of structure

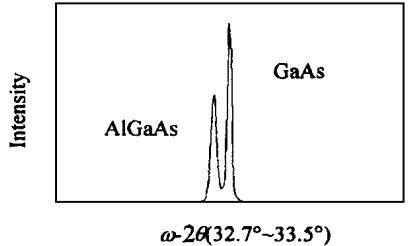


图 2 样品 165LP 两层结构外延层摇摆曲线
Fig. 2 Rocking curve of two layers of structure

3 外延层晶格应变对其摇摆曲线半
峰宽的影响

对于多层异质外延层来讲, 由于各外延层之间存在热膨胀系数失配, 因此它们之间就会存在热应力⁶. 在热应力的作用下, 晶格就会发生应变. 对于较厚的多层外延层中的每一外延层而言, 由于在其上下边界上存在热应力, 因此该应力就会通过晶格应变逐步向外延层的中心释放, 所以在外延层的生长方向上, 其晶格的晶面间距就会存在一变化梯度, 从而使摇摆曲线的半峰宽变宽. 对透射式 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层

来讲,其两层 AlGaAs 外延层上下边界上外延层 (衬底) 的厚度不一样,因此其所处的应变边界约束条件也不一样.同样两层 GaAs 外延层上下边界上的应变边界约束条件也不一样,因此四层外延层的应变情况不一样,对应的晶面间距变化梯度也不一样,摇摆曲线半峰宽的展宽也不一样.由于外延层之间的热应力同外延层的生长温度有关(温度越高,热应力越大),因此外延层摇摆曲线的半峰宽同外延层的生长温度有关(温度越高,热应力越大),因此外延层摇摆曲线的半峰宽同外延层的生长温度有直接的关系.图 3 是透射式 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层 166LP 样品的 X 射线衍射摇摆曲线,图 4 是透射式 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层 176LP 样品的 X 射线衍射摇摆曲线.两样品除生长温度外,其余条件都一样.166LP 样品外延层的生长温度为 600℃,而 176LP 样品外延层的生长温度为 630℃.从图 3 和图 4 看出,166LP 样品 AlGaAs 外延层摇摆曲线的半峰宽为 59″,GaAs 外延层摇摆曲线的半峰宽为 56″,但 176LP 样品 AlGaAs 外延层摇摆曲线的半峰宽为 118″,GaAs 外延层摇摆曲线的半峰宽为 116″.这充分说明透射式 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层的生长温度越高,应力越大,外延层的晶面间距变化梯度越大,摇摆曲线的半峰宽也越宽.

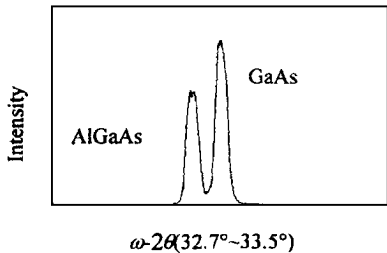


图 3 样品 166LP 四层结构外延层摇摆曲线
Fig.3 Rocking curve of four layers of structure

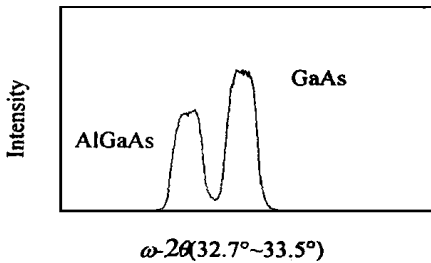


图 4 样品 176LP 四层结构外延层摇摆曲线
Fig.4 Rocking curve of four layers of structure

4 外延层晶面弯曲对摇摆曲线半峰宽的影响

外延层在热应力的作用下,其晶格会发生应变,因而晶面会存在晶面间距变化梯度外,其晶面还会发生弯曲⁷.晶面弯曲的曲率半径除与外延层的厚度、弹性模量等有关外,还与外延层的尺寸有关.当外延层的晶面发生弯曲时,距曲率中心不同距离处晶面的晶格在切向上会受到不同程度的拉伸或压缩,同时为弥补外延层在切向上的拉伸或压缩,外延层的晶格在径向上就会发生不同程度的压缩或拉伸,这样就导致外延层的晶面存在另一种由于晶面弯曲所引起的晶面间距变化梯度,因此其 X 射线衍射摇摆曲线的半峰宽就会进一步的展宽.外延层的晶面弯曲程度与外延层的尺寸有关.外延层的尺寸越大,其弯曲的曲率越大,对应的晶面间距变化梯度越大,摇摆曲线的半峰宽也越宽.图 5 是透射式光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层 167LP 样品的 X 射线衍射摇摆曲线.当获得图 5 的 X 射线衍射摇摆曲线以后,将该样品的尺寸减小后再在同一测量点上进行测量,得该样品的另一 X 射线衍射摇摆曲线,见图 6.两摇摆曲线是在同一样品的同一点上进行测量的,所不同的是样品的尺寸不一样.从图 5 和图 6 看出,大样品摇摆曲线的半峰宽对 AlGaAs 为 35″,对 GaAs 为 25″,而小样品摇摆曲线的半峰宽对 AlGaAs 为 35″,对 GaAs 为 16″.大样品和小样品相比较,GaAs 摇摆曲线的半峰宽有较明显的变化,而 AlGaAs 摇摆曲线的半峰宽没有变化.这可能是因为晶面弯曲对外延层所引起的晶面间距变化梯度对摇摆曲线半峰宽的影响较小,因此衍射仪还不足以反映出两层 AlGaAs 外延层晶面弯曲所引起的摇摆曲线半峰宽的展宽现象.而

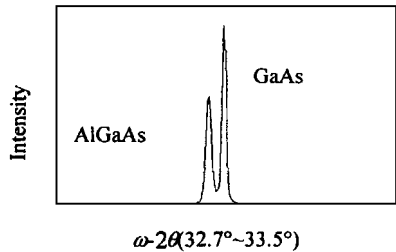


图 5 样品 167LP 大尺寸外延层摇摆曲线
Fig.5 Rocking curve of large size sample

GaAs 摇摆曲线半峰宽的展宽可能是因为 GaAs 衬底较厚,衬底的晶面弯曲引起了较大的晶面间距变化梯度,使衍射仪有所反映 .

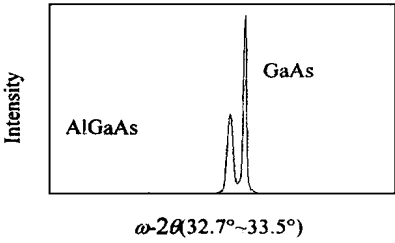


图 6 样品 167LP 小尺寸外延层摇摆曲线
Fig. 6 Rocking curve of small size sample

5 结论

任何一种晶体都是一种 X 射线的衍射光栅,其晶格的完整性决定着 X 射线衍射摇摆曲线半峰宽的宽窄,因此体单晶 X 射线衍射摇摆曲线的半峰宽越窄,其晶格的完整性越好 .对于透射式 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层来说,由于

各外延层之间 X 射线衍射的叠加是一种非相干叠加,因此两层外延层 X 射线衍射摇摆曲线的半峰宽就比一层外延层 X 射线衍射摇摆曲线的半峰宽更宽 .同时由于 AlGaAs 与 GaAs 之间的热膨胀系数不一样,因此它们之间就会存在热应力,在热应力的作用下,外延层的晶格就会发生应变,晶面就会发生弯曲,从而导致晶面间距存在晶面间距变化梯度,使 X 射线衍射摇摆曲线的半峰宽变宽 .由于透射式 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层 X 射线衍射摇摆曲线的半峰宽除与外延层的结晶质量有关外,还与外延层的层数以及它们之间存在的热应力有关,因此在利用摇摆曲线的半峰宽来比较不同外延片的结晶质量时,必须充分考虑到影响摇摆曲线半峰宽大小的各种因素,只有这样才能得到较为准确的信息,才能为优化透射式 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层的 MOCVD 生长工艺提供科学的依据 .

参考文献

1 Chu Ryang Wie·High resolution X-ray Diffraction characterization of semiconductor structures·Materials Science and Engineering, 1994, R 13(1) :16~18
2 Gilles Renaud·Oxide surface and metal/oxide interfaces studied by grazing incidence X-ray scattering·Surface Science Reports, 1998, 32:12~13
3 Fewster P F·X-ray diffraction from low dimensional structures·Semicond Sci Technol, 1993, 8:1921~1923
4 Shaw R·Image science·London :Academic Press Inc, 1974:220~221
5 Fewster P F·High-resolution diffraction-space mapping and topography·Appl Phys, 1994, A 58(1) :121~127
6 van der Sluis P·Determination of strain in epitaxial semiconductor structures by high-resolution X-ray diffraction·Appl Phys, 1994, A 58:129~134
7 Feng Zhechuan, Liu Hongdu·Generalized formula for curvature radius and lager stresses caused by thermal strain in semiconductor multilager structures·J Appl Phys, 1983, 54(1) :83~85

X-RAY DIFFRACTION ROCKING CURVE OF AlGaAs/GaAs EPITXIAL LAYER OF TRANSPARENT GaAs PHOTOCATHODE

Li Xiaofeng, Zhang Jingwen, Gao Hongkai, Hou Xun

Xi'an Institute of Optics and Precision Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Xi'an 710068

Received date: 2001-07-05

Abstract The paper researched the relationship between the FWHM of X-ray diffraction rocking curve and lattice perfection, elaborated the influence on the FWHM of rocking curve due to non-inference interaction of diffraction beam and lattice strain, lattice plane bend.

Keywords AlGaAs/GaAs; X-ray diffraction; Stress/strain; Photocathode



Li Xiaofeng is a native of Yunnan Province, China. He was an employee and engineer in Yunnan Optical Instruments Factory before he was enrolled in Xi'an Institute of Optics and Precision Mechanics of Chinese Academy of Sciences as a Doctroal Candidate in Sept, 1997. Now he is working toward his Ph. D degree. His major is optics and his adviser is Mr. Hou Xun, a senior scientist and Academican of Chinese Academy of Sciences. His research field covered the semiconductor photoemission, semiconductor epitaxial technology, surface analysis, noise signal processing and the third generation image intensifier.