

透射式 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层 X 射线衍射摇摆曲线研究

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 利用透射式 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层的结构特点及其 X 射线衍射摇摆曲线分析方法, 解释了 AlGaAs/GaAs 外延层摇摆曲线半峰宽和其衍射角角位移随外延层生长温度升高而增大的现象。
关键词 GaAs; AlGaAs; X 射线; 光电阴极; 衍射; 外延

0 引言

半导体外延层 X 射线衍射的摇摆曲线包括了外延层的结晶质量、厚度、晶格常量、应力等方面的信息。由摇摆曲线可以得出外延层的衍射角(衍射峰位), 从而可以确定外延层的晶格常量。对三元化合物, 还可以确定其组份¹。由摇摆曲线衍射强度条纹的角间距还可以确定外延层的厚度。如果外延层的晶格常量是已知的, 那么根据外延层与衬底之间的应变状况就可以直接从外延层某一晶面对称衍射的衍射角将晶面间距确定下来。如果外延层的晶格常量是未知的, 那么根据外延层与衬底某一晶面的非对称衍射的衍射角也可以将晶面间距确定下来。通过计算机的模拟², 还可以确定外延层的某些结构参量, 如外延层的组份梯度、超晶格的周期等。所以在半导体外延层的生长过程中, X 射线衍射仪也就成了半导体外延设备所不可缺少的配套分析工具。对于 III-V 族半导体而言, 一般利用其(004)晶面的 X 射线衍射摇摆曲线来监测(001)衬底上所生长的外延层的结晶质量, 这对于 AlGaAs/GaAs 外延层也不例外。然而一般外延层摇摆曲线的分析方法主要适用于较薄的单层外延层或单层外延层及其保护层(capping layer or passivating layer)。对于透射式 GaAs 光电阴极(以下简称 GaAs 光电阴极)这种特殊的四层器件结构外延层来讲, 在利用

摇摆曲线分析其结构特性时, 必须结合其具体的结构特点, 这样才能得到较为准确的信息并起到指导外延生长工艺的作用。所以本文介绍透射式 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层的摇摆曲线分析方法。

1 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层的结构特点

透射式 GaAs 光电阴极一般采用生长四层外延层的倒置法工艺制作, 其外延层通常采用 MOCVD 技术进行生长。在 AlGaAs 外延层的 MOCVD 生长过程中, AlGaAs 外延层的 Al 组份主要由 TMAI 与 TMG 的摩尔浓度比所决定, 这一结论已由电子探针的分析所证实。外延层的膜层厚度在外延工艺一定的条件下由生长时间所决定, 且外延层的厚度可由 SEM 或光学显微镜进行验证。根据 GaAs 光电阴极的设计要求, 其外延层的结构如图 1 所示。从图 1 的结构可以看出, 整个外延层的厚度小于 6 μm, 在 X 射线的穿透范围内, 因此在整个外延层 X 射线衍射摇摆曲线中, GaAs 的衍射峰由两层 GaAs 外延层及其衬底的衍射峰叠加而成。同样 AlGaAs 的衍射峰也是由两层 AlGaAs 外延层的衍射峰叠加而成, 所

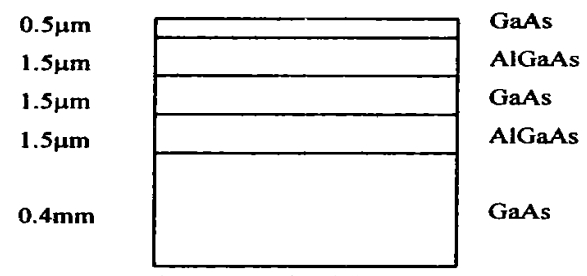


图1 GaAs 光电阴极的外延层结构

Fig.1 Epitaxial layer structure of GaAs photocathode

以仅从GaAs 光电阴极AlGaAs 或GaAs 外延层的衍射角及其衍射峰半峰宽是很难分析出其各外延层结构参量的. 另外对GaAs 光电阴极这种四层结构外延层而言, 除最后一层外延层外, 每一外延层的上下两边界上都存在应力, 并且该应力会通过晶格应变向外延层内部释放, 这样外延层就会存在一晶面间距变化梯度, 因此GaAs 光电阴极AlGaAs/GaAs 外延层中的晶面间距是不均匀的, 存在一晶面间距变化梯度, 这样由摇摆曲线所得到的衍射角或面间距只是各外延层的平均衍射角或平均面间距, 而不是某一外延层的衍射角或面间距. 对外延层应变的分析也只能代表各外延层的平均应变, 而不是某一外延层的应变. 摇摆曲线的展宽也是各外延层摇摆曲线展宽的叠加, 而不表示某一外延层摇摆曲线的展宽. 因此一般外延层摇摆曲线的分析方法不适应GaAs 光电阴极外延层摇摆曲线的分析. 对GaAs 光电阴极外延层摇摆曲线的分析只有同GaAs 光电阴极具体的外延层结构特点结合起来, 才可能得出较为准确的结论.

2 AlGaAs 外延层 X 射线衍射摇摆曲线的基本分析方法

在利用X 射线衍射摇摆曲线来分析AlGaAs 外延层的结构参量时, 首先应该确定其Bragg 衍射角, 它是进行AlGaAs 外延层的结构分析的基础. 一般认为GaAs 衬底的Bragg 衍射角 θ 是固定的, 晶面倾角 φ (晶面同样品表面的夹角) 也是固定的, 因此可将其作为标定AlGaAs 外延层Bragg 衍射角和晶面倾角的基准, 这样就可以消除衍射仪的零位校准误差. 因此要确定AlGaAs 外延层的衍射角和晶面倾角, 必须先确定AlGaAs 外延层的Bragg 衍射角和晶面倾角同GaAs 衬底Bragg 衍射角和晶面倾角的差 $\Delta\theta$ 和 $\Delta\varphi$ 影响AlGaAs 外延层与GaAs 衬底衍射角

(入射X 射线与样品表面的夹角) 角位移 $\Delta\omega$ 大小的因素有: ①AlGaAs 外延层和GaAs 衬底的(hkl) 晶面具有不同的晶面间距. ②AlGaAs 外延层和GaAs 衬底的(hkl) 晶面存在不同的晶面倾角. 所以 $\Delta\omega$ 为³.

$$\Delta\omega=\Delta\theta+\Delta\varphi \tag{1}$$

由式(1) 知所测得的AlGaAs 外延层和GaAs 衬底衍射角的角位移 $\Delta\omega$ 包括了AlGaAs 外延层与GaAs 衬底Bragg 衍射角的角位移 $\Delta\theta$ 和晶面倾角的角位移 $\Delta\varphi$ 而 $\Delta\theta$ 和 $\Delta\varphi$ 可以通过同一晶面的两次非对称衍射将其从 $\Delta\omega$ 中确定下来. 设某一晶面的两次非对称衍射所测量到的衍射角为 ω (低角度衍射) 和 ω (高角度衍射), 那么根据简单的衍射几何关系可得

$$\omega=\theta-\varphi \tag{2}$$

$$\omega=\theta+\varphi \tag{3}$$

设AlGaAs 外延层和GaAs 衬底衍射角的角位移在两次测量中分别为 $\Delta\omega$ 和 $\Delta\omega$, 那么

$$\Delta\omega=\omega^s-\omega^l \tag{4}$$

$$\Delta\omega=\omega^s+\omega^l \tag{5}$$

以上两式中的上标S 和L 分别表示GaAs 衬底和AlGaAs 外延层, 下标1 和2 分别表示第一次测量(低角度衍射) 和第二次测量(高角度衍射). 将式(2) 和式(3) 代入式(4) 和式(5), 得

$$\Delta\omega=\Delta\theta+\Delta\varphi \tag{6}$$

$$\Delta\omega=\Delta\theta-\Delta\varphi \tag{7}$$

同样在以上两式中, 下标1 和2 分别表示第一次测量和第二次测量. 联立式(6) 和式(7) 得

$$\Delta\theta=2^{-1}(\Delta\omega+\Delta\omega) \tag{8}$$

$$\Delta\varphi=2^{-1}(\Delta\omega-\Delta\omega) \tag{9}$$

由此可见, 从AlGaAs 外延层和GaAs 衬底同一晶面两次非对称衍射的测量结果 $\Delta\omega$ 和 $\Delta\omega$ 就可以确定出该晶面AlGaAs 外延层和GaAs 衬底的Bragg 衍射角和晶面倾角的差 $\Delta\theta$ 和 $\Delta\varphi$ 从而就可以确定出AlGaAs 外延层的Bragg 衍射角 θ 和晶面倾角 φ 有了AlGaAs 外延层的Bragg 衍射角 θ 和晶面倾角 φ 就可以分析AlGaAs 外延层的应变情况和确定AlGaAs 外延层的晶格常量.

一般来讲, 当AlGaAs 外延层存在应变时, 其在水平方向和垂直方向上的晶格常量不一样($\Delta\alpha\neq\Delta\alpha$), 因此在水平方向和垂直方向上的应变也不一样⁴, 且为

$$\Delta\alpha/\alpha=(\sin\theta\cos\varphi/\sin\theta\cos\varphi)-1 \tag{10}$$

$$\Delta\alpha/\alpha=(\sin\theta\cos\varphi/\sin\theta\cos\varphi)-1 \tag{11}$$

由式(10)和式(11)计算出 $\Delta\alpha$ 和 $\Delta\alpha$ 后,再由下式计算出AlGaAs外延层的晶格常量

$$\alpha=\alpha_{\text{AlGaAs}}(1-2v(\alpha_{\text{AlGaAs}}-\alpha_{\text{AlAs}})/(1+v)\alpha_{\text{AlAs}}) \tag{12}$$

式中 α 为AlGaAs外延层的晶格常量, v 为泊松比, $\Delta\alpha$ 和 $\Delta\alpha$ 分别为AlGaAs外延层水平方向和垂直方向上的晶格常量.有了AlGaAs的晶格常量,就可以确定其组分

$$x=(a-a_0)/(a_1-a_0) \tag{13}$$

式(13)中的 x 表示AlGaAs外延层中的Al组份值, a 、 a_0 和 a_1 分别为AlGaAs、GaAs和AlAs的晶格常量.另外对较薄的AlGaAs外延层,从摇摆曲线衍射条纹的角间距还可以由下式确定其厚度⁵

$$t=\lambda\sin(\theta+\phi)/\Delta\omega\sin2\theta \tag{14}$$

式中 t 为AlGaAs外延层的厚度, θ 为所测晶面的Bragg衍射角, ϕ 为衍射晶面与样品表面法线的夹角, $\Delta\omega$ 为衍射条纹的角间距.

以上关于AlGaAs外延层摇摆曲线的基本分析方法和结论主要适用于单层AlGaAs外延层,不适用于多层AlGaAs外延层,因为其AlGaAs外延层摇摆曲线的半峰宽是各AlGaAs外延层摇摆曲线的叠加.另外由于GaAs光电阴极的AlGaAs/GaAs外延层是一种特殊的四层器件结构外延层,因此对GaAs光电阴极AlGaAs外延层摇摆曲线的分析必须结合其本身的结构特点,只有这样才能得到AlGaAs外延层中正确的结构信息,从而为优化外延生长工艺提供科学的依据.

3 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层的摇摆曲线分析

试验样品为利用低压MOCVD设备生长的GaAs光电阴极AlGaAs/GaAs外延层.该MOCVD设备采用卧式水平双衬套石英冷壁反应器,内管的截面为长方形,外管的截面为圆形,石墨样品台可旋转,生长压力为60托.GaAs外

延衬底的表面为(001)偏(110)约5°.衬底直径为Φ25mm,厚为0.4mm.CaAs光电阴极AlGaAs/GaAs外延层的X射线衍射摇摆曲线利用Philips公司生产的PW3040型(X'pert-MRD)高分辨率X射线衍射仪进行测量.其单色器为Ge(220)四晶准直单色器, $\Delta\lambda/\lambda$ 为 5×10^{-5} ,发散角为12".衍射晶面为(004).

采用 ω - 2θ 扫描,步长为0.0005°.四个样品除生长温度外,其余条件相同.图2为四个样品的

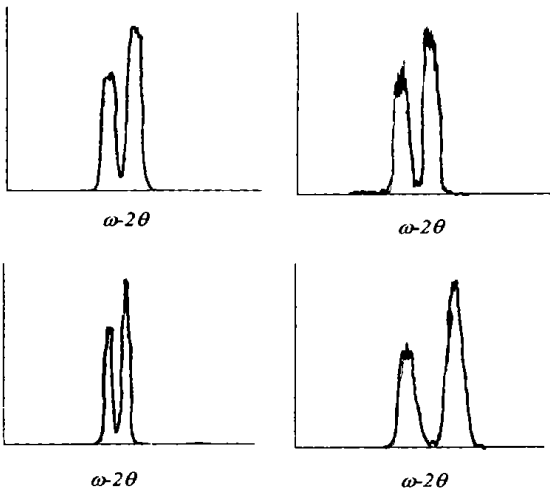


图2 X射线衍射实测摇摆曲线
Fig.2 X-ray diffraction rocking curve of epitaxial layer
X射线衍射摇摆曲线,其中164LP和165LP两个样品采用双温法生长(AlGaAs外延层和GaAs外延层的生长温度不相同),166LP和176LP两个样品采用单温法生长(AlGaAs和GaAs外延层的生长温度相同).表1是根据图2的摇摆曲线所整理得到的数据.

表中的 ω 、 ω 和 $\Delta\omega$ 分别为GaAs和AlGaAs外延层摇摆曲线的衍射角及其角位移,柯和柯分别为GaAs和AlGaAs外延层摇摆曲线的半峰宽, T_1 和 T_2 分别为GaAs和AlGaAs外延层的生长温度.因为GaAs衬底的衍射角不会改变,因此在GaAs光电阴极AlGaAs/GaAs外延层X射

表1 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层摇摆曲线的衍射角及其角位移

样品	$\omega(^{\circ})$	$\omega(^{\circ})$	$\Delta\omega(^{\circ})$	柯($^{\circ}$)	柯($^{\circ}$)	$T_1(^{\circ}\text{C})$	$T_2(^{\circ}\text{C})$
164LP	32.97574	32.90146	0.07428	120	111	600	630
165LP	33.01430	32.95685	0.05745	103	98	600	615
166LP	33.04299	33.00958	0.03341	56	59	600	600
176LP	33.02632	32.97023	0.05609	116	118	630	630

线衍射摇摆曲线的分析中,可以将 GaAs 外延层的衍射角作为一个标定衍射角的基准. 这样当 AlGaAs 外延层同 GaAs 外延层衍射角的角位移发生变化时,即认为是 AlGaAs 外延层的衍射角发生了变化. 从表 1 可以看出,在单温法生长的两个样品中,176LP 样品的生长温度为 630°C ,比 166LP 样品的生长温度高 30°C ,同时 176LP 样品对应的 $\Delta\omega$ 和 ω 也大于 166LP 样品对应的 $\Delta\omega$ 和 ω . 在双温法生长的两个样品中,164LP 样品和 165 样品 GaAs 外延层的生长温度均为 600°C ,但 164LP 样品 AlGaAs 外延层的生长温度比 165 样品 AlGaAs 外延层的生长温度高 15°C ,同时 164LP 样品对应的 $\Delta\omega$ 和 ω 也大于 165LP 样品所对应的 $\Delta\omega$ 和 ω . 由此可见, GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层无论是采用单温法生长还是采用双温法生长, AlGaAs 外延层和(或) GaAs 外延层的生长温度越高,对应的角位移 $\Delta\omega$ 和摇摆曲线的半峰宽 ω 也就越大.

原因是 AlGaAs 与 GaAs 存在晶格参量失配和热膨胀系数失配,生长温度越高,热应力越大. 热应力的作用使 AlGaAs 外延层的晶格在水平方向上受到压缩,同时为补偿其在水平方向的收缩, AlGaAs 外延层的晶格在垂直样品的方向上必然会发生膨胀,相当于受到拉伸. 生长温度越高,这种拉伸也越大,因此 AlGaAs 外延层的面间距 d 也就越大,这样就造成 AlGaAs 外延层的衍射角同 GaAs 衍射角的差 $\Delta\omega$ 越大. 另外由于 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层是具有一定的厚度的四层结构外延层,在其外延层的上下两边界上都存在热应力. 边界上的热应力必然会向外延层内部释放,使外延层的晶格存在一晶面间距变化梯度 Δd . 外延层的生长温度越高,边界热应力越大,晶面间距变化的梯度 Δd 越大,所以摇摆曲线的半峰宽也就越宽. 另外从图 2 看出双温法生长的 164LP 和 165LP 两个样品的摇摆曲线衍射峰的顶端出现了“毛刺”. 原因是因为双温法采用了不同的生长温度,这样就造成了 AlGaAs 或 GaAs 外延层上下界面上的应变不相等,因此就引入了附加的非均匀应变,从而使双温法生长的外延层的摇摆曲线的衍射峰顶端出现了“毛刺”.

综上所述,由于 AlGaAs/GaAs 外延层具有一定的厚度,且存在晶格失配和热膨胀系数失配,因此他们之间就会存在边界热应力,这样就造成

GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层的衍射角角位移和摇摆曲线的半峰宽同生长温度有关. 温度越高,衍射角的角位移越大,摇摆曲线半峰宽越宽. 所以 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层 X 射线衍射摇摆曲线半峰宽和衍射角角位移的大小除了反映外延层的结晶质量和组份大小外,还反映了外延层中的应变大小,在对 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层 X 射线衍射摇摆曲线进行分析时应该充分考虑到这一点.

4 结论

在半导体外延层的生长过程中,常以 Cu-K α (004) 晶面 X 射线衍射的摇摆曲线来分析外延层的晶格常量、组分、膜厚、应变等. 对于 GaAs 光电阴极这种特殊的四层 AlGaAs/GaAs 器件结构外延层而言,由于外延层具有一定的厚度,且存在热膨胀系数失配和晶格失配,这样就会存在热应力,在热应力的作用下 AlGaAs 外延层的晶格在水平方向上会受到压缩,而在垂直方向上受到拉伸. 另外 AlGaAs 外延层和 GaAs 外延层在热应力的作用下还会存在晶面间距变化梯度,因此就造成了其衍射角的角位移和摇摆曲线的半峰宽随生长温度的提高而增大. 所以 GaAs 光电阴极 AlGaAs 外延层和 GaAs 外延层 X 射线衍射摇摆曲线的半峰宽和衍射角的角位移的大小除与外延层的结晶质量和组份大小有关外,还与外延层中应变的大小有关. 所以在比较 GaAs 光电阴极外延层 X 射线衍射摇摆曲线半峰宽时,只有在外延层的层数和厚度相同的条件下比较才有意义. 在 GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层的 MOCVD 生长过程中不能将外延层 X 射线衍射摇摆曲线的半峰宽作为评价外延层结晶质量的唯一标准. GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层 X 射线衍射摇摆曲线半峰宽比体单晶摇摆曲线的半峰宽是必然的,生长温度越高, GaAs 光电阴极 AlGaAs/GaAs 外延层中的应变就越大,摇摆曲线的半峰宽也就越宽. 所以要降低外延层中的应变,就要降低外延层中的生长温度,同时由于单温法生长较双温法生长有更小而均匀的应变,因此在外延生长过程中应采用单温法生长工艺,并且在保证外延层结晶质量的条件下,生长温度应该尽量低,这样才能减小外延层中的应变,降低摇摆曲线的半峰宽,从而满足外延层后续工艺的要求.

参考文献

- 1 Fewster P F·X-ray diffraction from low dimensional structures·Semicond Sci Technol, 1993, 8(10) :1915~1916
- 2 Fewster P F·Composition and lattice mismatch measurements of thin semiconductor layers by X-ray diffraction·J Appl Phys, 1987, 62(10) :4154~4158
- 3 Bartels W J, Nijman W J·X-ray double crystal diffractometry of $Ga^{1-x}Al_xAs$ epitaxial layers·J Crystal Growth, 1978, 44(25) :522~523
- 4 van der Sluis P·Determination of strain in epitaxial semiconductor structures by high-resolution X-ray diffraction·1994, A 58:129~134
- 5 Bartels W J, Nijman W J·X-ray double crystal diffractometry of $Ga^{1-x}Al_xAs$ epitaxial layers·J Crystal Growth, 1978, 44(25) :518~525

THE X-RAY DIFFRACTION ROCKING CURVE OF AlGaAs/GaAs EPITAXIAL 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 This paper described the structure characteristics and analysis method of rocking curve of AlGaAs/GaAs epitaxial layer, explained the phenomenon of broadening of FWHM and increasing of diffraction peak separation of rocking curve of AlGaAs and GaAs epitaxial layer with their upgrading growth temperature.

Keywords GaAs; AlGaAs; X-ray; Photocathode; Diffraction; Epitaxy



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 Doctoral 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 Academician 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.