

透射式 GaAs 光电阴极 AlGaAs 窗层 Al 组份的 X 射线衍射分析

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 研究了 AlGaAs 窗层中 Al 组份的 X 射线衍射分析原理和计算方法, 并给出了实例 .

关键词 GaAs; AlGaAs; 光电阴极; 衍射; 外延; 晶格常量

0 引言

透射式 GaAs 光电阴极(以下简称 GaAs 光电阴极或光电阴极)由粘结在玻璃基底上的 AlGaAs 窗层和 GaAs 光电发射层组成, 而 AlGaAs 窗层和 GaAs 光电发射层一般是利用 MOCVD 或 LPE 技术外延层生长的¹ GaAs 光电阴极的光电发射特性除与其光电发射层的结晶质量、掺杂浓度、AlGaAs 窗层与其光电发射层界面的失配位错等有关外, 还同 AlGaAs 窗层的 Al 组份有关 . 因为不同的 Al 组份对应了 AlGaAs 窗层不同的禁带宽度, 因此也就对应了不同的短波阈值波长 . 如果 Al 值低, 则阈值波长短, 在夜视仪器的使用过程中会产生不必要的背景 . 如果 Al 值高, 则阈值波长长, 在夜视仪器的使用过程中会降低应有的信号, 所以 AlGaAs 窗层在 GaAs 光电阴极中相当于一个高通滤波器(对波长而言), 在光电阴极的外延过程中应该控制好 AlGaAs 窗层中的 Al 组份 . 在 MOCVD 外延工艺过程中, Al 组份主要由 TMAI 和 TMG 的摩尔浓度比决定, 但由于 MOCVD 的反应过程太复杂, 有时会使 AlGaAs 外延层的 Al 组份偏离理论设定值 . 另外在整个外延层的有效直径范围内, Al 组份的均匀性也会超出正常的范围 . 所以在外延工艺中应该不断的对 AlGaAs 的 Al 组份进行监测并适当修正外延工艺, 使 Al 组份的实测值达到光电阴极要求的理论值 . 因此本文介绍 GaAs 光电阴极 AlGaAs 窗层 Al 组份的 X 射线衍

射分析方法 .

1 AlGaAs 外延层 Al 组份的 X 射线衍射基本分析原理

三元化合物固溶体(如 AlGaAs)的晶格常量随溶质原子浓度比的变化而变化 . 如 AlGaAs 这种由 GaAs 和 AlAs 组成的固溶体, 其晶格常量随 GaAs 和 AlAs 比例的不同而不同, 也就是随 AlGaAs 中 Al 组份的变化而变化, 且其晶格常量在 GaAs 晶格常量和 AlAs 晶格常量间变化 . 因此对 AlGaAs 而言, 根据 Vegard 定律, 对不同的晶格常量进行线性插值即可确定不同的晶格常量所对应的 Al 值, 计算公式为

$$x = (a_x - a_0) / (a_1 - a_0) \quad (1)$$

式中 x 为 AlGaAs 中的 Al 组份, a_x 表示 AlGaAs 的晶格常量, a_0 表示 GaAs 的晶格常量($5.6528 \times 10^{-10} \text{ m}$), a_1 表示 AlAs 的晶格常量($5.6612 \times 10^{-10} \text{ m}$) .

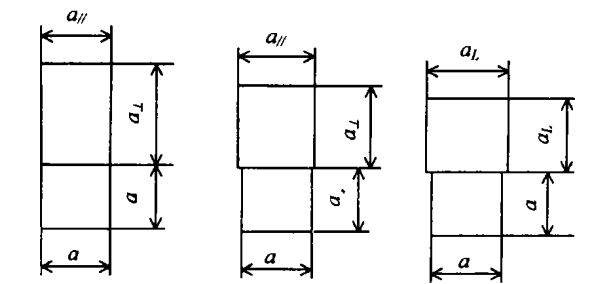
晶体的晶格常量一般采用 X 射线衍射的 Bond 方法测量², 它利用在入射线两端的探测器测量晶体两个反射位置的角度差来获得其 Bragg 衍射角, 并根据 Bragg 定律得到晶体晶格常量的方法 . 用 Bond 方法得到衍射角可以消除衍射仪角度零位的校正误差 . Bond 方法一般适用于体单晶的晶格常量测定 . 当测量外延层的晶格常量

时,采用相对测量的方法也可以消除衍射仪角度零位的校正误差.这是因为对外延层来讲,其衬底的衍射角是一定的,因此可以作为标定衍射角的基准.但对于 GaAs 衬底上生长的 AlGaAs 外延层而言,由于 AlGaAs 和 GaAs 的晶格常量相差甚小,其衍射角相差也甚小,所以无论是采用哪种方法测量其衍射角时,为了得到较为精确的衍射角,都必须采用高分辨率 X 射线衍射仪³.

2 应变条件下 AlGaAs 外延层 Al 组份的 X 射线衍射分析

对于在 GaAs 衬底上生长的 AlGaAs 外延层而言,由于在 GaAs 衬底上生长的 AlGaAs 外延层存在弹性应变,因此无论用那种方法测得的外延层的晶格常量都不是其固有的晶格常量,而只是面间距.面间距经过校正后才是外延层真正的晶格常量.只有在外延层与衬底间不存在弹性应变(完全弛豫)的情况下,所测量的面间距才是晶格常量.

一般来讲,在衬底上生长的外延层存在多种应变情况,图 1 表示了三种应变情况,即完全应变,非完全应变(或称部分弛豫)和完全弛豫,见图 1.图 1 中的 a 和 a_L 分别表示衬底和外延层的晶格常量(假设 a_L 大于 a), $a_{//}$ 和 $a_{\perp}$ 分别表示应变条件下,外延层晶胞在平行于界面方向和垂直于界面方向的晶格常量.在完全应变情况下,外延层在平行于界面上的晶格常量 $a_{//}$ 同衬底的晶格常量 a 完全匹配,但在垂直于界面的方向上,其晶格常量 $a_{\perp}$ 大于衬底的晶格常量 a ,见图 1(a).在非完全应变的情况,外延层在平行于界面上的晶格常量 $a_{//}$ 并不完全匹配衬底的晶格常量 a ,但在垂直于界面的方向上,其晶格常量 $a_{\perp}$ 仍然大于衬底



(a) Fully strained (b) Partially relaxed (c) Fully relaxed

图 1 外延层和衬底的应变情况
Fig. 1 Strained situation in the interface of substrate and epitaxial layer

的晶格常量 a , 见图 1(b). 在完全弛豫的情况下, 外延层和衬底各自保持自己固有的晶格常量, 因此外延层不存在应变, 见图 1(c).

如果在 GaAs(001) 衬底上外延的 AlGaAs 外延层是完全应变的, 那其晶胞的形变可以通过各向同性固体的弹性理论来处理(虽然 GaAs 是各向异性的). 因此如果在 GaAs(001) 衬底上生长的 AlGaAs 外延层发生完全应变, 那么这种四方应变可根据 X 射线衍射仪测得的面间距和泊松比(泊松比是固体横向应变和纵向应变之比, 不同方向上的泊松比不一样)并根据下式来计算外延层的晶格常量

$$a_x = a + (1 - \nu)(d - a) / (1 + \nu) \quad (2)$$

式中, a_x 为 AlGaAs 外延层固有的晶格常量, a 为 GaAs 衬底的晶格常量, ν 为泊松比, d 为 AlGaAs 外延层的(001) 晶面的实测面间距.

在非完全应变条件下, 外延层在垂直于和平行于界面上的晶格常量位于完全应变和完全弛豫之间. 这时其固有的晶格常量必须利用非对称衍射测量出反射晶面的倾斜角后才能进行计算. 四方晶格反射面的面间距 d 和晶面倾角 ϕ 由以下两式给出

$$d^{-1} = \frac{2h^2 a_{//}^2 + l^2 a_{\perp}^2}{a_{//}^2 a_{\perp}^2} \quad (3)$$

$$\cos \phi = \frac{1}{a_{\perp}} \sqrt{2h^2 a_{//}^2 + l^2 a_{\perp}^2} \quad (4)$$

式中, d 是反射晶面的面间距, h, l 是反射面的晶面指数, $a_{//}$ 和 $a_{\perp}$ 是单胞水平方向和垂直方向的晶格常量. 联立方程式(3)、(4)和 Bragg 定律就可以得出单胞的晶格常量 $a_{\perp}$ 和 $a_{//}$

$$a_{\perp} = \frac{\lambda}{2 \sin \theta \cos \phi} \quad (5)$$

$$a_{//} = \frac{1}{2} \frac{h}{\cot \phi} \frac{a_{\perp}}{l} \quad (6)$$

式中, λ 是入射 X 射线的波长. θ 是反射晶面的衍射角, ϕ 是反射晶面同样品表面的夹角. 在得到 AlGaAs 外延层的晶格常量后, 根据固体弹性形变的理论就可计算出 AlGaAs 外延层固有的晶格常量

$$a_x = a_{\perp} [1 - 2\nu(1 + \nu)^{-1}(a_{\perp} - a_{//})a_{\perp}^{-1}] \quad (7)$$

式中 $a_{//}$ 和 $a_{\perp}$ 是外延层非完全应变条件下单胞水平方向和垂直方向的晶格常量, ν 是泊松比. 如果外延层不存在应变, 即外延层是完全弛豫的, 那么其晶格常量对(001) 晶面而言就是面间距, 可直接用衍射仪进行测量.

无论 AlGaAs 外延层是完全应变的,非完全应变或完全弛豫,在求得 AlGaAs 外延层固有的晶格常量后,利用式(1)就可以求得 AlGaAs 外延层在完全应变,非完全应变或完全弛豫情况下的 Al 组份.

3 实验及数据分析

利用 Philips 公司生产的 PW3040 型高分辨率 X 射线衍射仪(Xpert-MRD)对在 GaAs(001)衬底上用 LPMOCVD 外延的 AlGaAs 窗层的 Al 组份进行了分析.衍射为(115)晶面的非对称衍射.衍射仪的单色器为 Ge(220)四晶准直单色

器,其 $\Delta\gamma/\lambda$ 为 5×10^{-5} ,采用 $\omega/2\theta$ 扫描,步长为 0.0005° . 分别在同一样品的两个不同位置(相距 10mm)上进行高角度和低角度衍射测试,测试结果见表 1. 表 1 中的 ω_H , ω_L 和 2θ 分别为 GaAs 衬底(115)晶面高角度衍射和低角度衍射入射角以及衍射角的理论值. ϕ 为 GaAs 光电发射层(115)晶面与(001)晶面夹角的理论值. $\Delta\omega_H$ 、 $\Delta\omega_L$ 分别为 AlGaAs 窗层高角度衍射和低角度衍射入射角同 GaAs 光电发射层高角度衍射和低角度衍射入射角之差的实测值.

根据表 1 的计算数据和实测数据就可以计算出 AlGaAs 外延层的 Al 组份. 首先计算出

表 1 176 样品 AlGaAs 窗层和 GaAs 光电发射层(115)晶面的 X 射线衍射测量结果

测量位置	衍射角理论值(°)				衍射角实测角(°)	
	ω_H	ω_L	2θ	ϕ	$\Delta\omega_H$	$\Delta\omega_L$
位置 1	60.8644	29.2781	90.1425	15.7932	0.04605	0.08206
位置 2	60.8644	29.2781	90.1425	15.7932	0.05908	0.10535

AlGaAs 外延层与 GaAs 衬底衍射入射角差 $\Delta\omega_H$ 与 $\Delta\omega_L$ 的和 $\Delta\omega$ 及差 $\Delta\omega$. 由于 AlGaAs 外延层(115)晶面与 GaAs 衬底(115)的晶面的衍射角之差为 $\Delta\omega$, 因此根据 GaAs(115)晶面衍射角 2θ 和 $\Delta\omega$ 就可求出 AlGaAs(115)晶面的衍射角 2θ . 又因为 AlGaAs(115)晶面的倾斜角 ϕ 与 GaAs(115)晶面的倾斜角 ϕ 的差为 $\Delta\omega/2$, 因此

根据 GaAs(115)晶面的倾斜角 ϕ 和 $\Delta\omega$ 就可以计算出 AlGaAs 外延层(115)晶面的倾斜角 ϕ . 有了 AlGaAs(115)晶面的衍射角 2θ 和倾斜角 ϕ , 由方程(5)和(6)就可以求出 AlGaAs 外延层的晶格常量 c 和 a . 再根据方程(7)和方程(1)(其中 v 取 0.333)即可求出 AlGaAs 外延层固有的晶格常量 a 和 Al 组份, 计算结果见表 2.

表 2 176 样品 AlGaAs 窗层和 GaAs 光电发射层(115)晶面的 X 射线衍射计算结果

测量位置	衍射角计算值(°)				晶格常量与 Al 组份(%)			
	$\Delta\omega_H$	$\Delta\omega_L$	2θ	ϕ	c	a	a_x	Al
位置 1	0.1281	0.0416	90.0144	15.8140	0.56603	0.56536	0.56568	40
位置 2	0.1644	0.0463	89.9781	15.8146	0.56623	0.56536	0.56579	54

从表 2 看出, 同一 GaAs 衬底上外延的 AlGaAs 外延层两个相距 10mm 位置上的 Al 组份相差很大, 偏离了 AlGaAs 外延层的正常外延工艺, 因此不能满足三代管 GaAs 光电阴极均匀性的要求. 通过对 LPMOCVD 反应器的检查, 发现是样品的旋转机构出现了问题, 在排出故障后, 外延层的均匀性得到了恢复, 外延工艺得到了及时的修正.

4 结论

透射式 GaAs 光电阴极的 AlGaAs 窗层相当于一个高通滤波器(对波长而言), 不同的 Al 组份

对应了不同的短波阈值波长. 因此在 GaAs 光电阴极的外延生长过程中必须控制好 AlGaAs 窗层的 Al 组份, 以达到 GaAs 光电阴极对它的设计要求. AlGaAs 窗层 Al 组份的 X 射线衍射分析方法是一种简单适用的方法, 它通过 AlGaAs 外延层晶格常量的测定来获得 Al 组份, 其测量的准确性决定于晶格常量测量的准确性. 由于在外延过程中外延层之间存在应变, 因此所测的晶面间距 d 必须经过校正后才能得到外延层固有的晶格常量. 又由于外延层之间的应变可能是完全应变或非完全应变, 因此在校正之前要根据不同的应变情况选择不同的计算公式. AlGaAs 外延层 Al 组份 X

射线衍射分析方法的特点是不需要制样,不损伤样品,对于多层外延层的测定不需要将 AlGaAs 外延层上面 GaAs 外延层的去除掉,这是 X 射线衍射方法同其他方法(如电子探针、光谱透过)相比较的最大优点。在 AlGaAs 外延层的外延工艺中,通过 Al 值的测定就可以修正外延工艺,使外

参考文献

1 Manasevit H M ·Single-crystal gallium arseine on insulating substrates ·Appl Phys Lett, 1968, 12(4) :156~157

2 Fewster P F ·A high-resolution mutiple-crytstal multiple-reflection diffractometer ·J Appl Gryst, 1982, 22(1) :64~69

3 Fewster P F ·X-ray diffraction from low dimensional structures ·Semicond Sci Technol, 1993, 8(10) :1915~1934

X-RAY DIFFRACTION ANALYSIS ON THE Al CONTENT OF THE AlGaAs BUFFER LAYER IN THE 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 It described the analysing principle of Al content on AlGaAs buffer layer and gave the calculation formulae corresponding to their strain situations. Besides, some calculation examples were given.

Keywords GaAs; AlGaAs; X-ray; Photocathode; Diffraction; Lattice parameter; Strain



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.