

GaAs/GaP 界面的 X 射线掠入射衍射分析*

崔树范 吴兰生 王观明 麦振洪

(中国科学院物理研究所 北京 100080)

王春艳 王玉田

(中国科学院半导体研究所 北京 100083)

李 梅 葛中久

(中国科学院长春物理研究所 长春 130021)

摘要 本文用掠入射全反射 X 射线衍射, 结合常规 X 射线衍射, 对 GaAs/GaP 应变层界面进行了研究, 给出了界面失配度、薄膜晶胞的畸变和界面弛豫等结构参数。结果表明掠入射衍射 (GID) 是测定半导体薄外延膜界面结构的有效工具。

PACC: 6110F, 6820, 6855

1 引言

半导体应变层薄膜和超晶格因其在材料和器件中的重要性, 近年来成为普遍关注的前沿课题之一。80 年代发展起来的掠入射衍射 (GID) 技术是研究表面、界面结构的一种有效工具^[1,2]。我们用 GID 技术结合常规 X 光衍射, 观测了自由晶格常数失配度为 3.7% 的 GaAs/GaP 界面, 给出了其结构参数。

2 实验

实验所用的样品是分子束外延 (MBE) 生长的 GaAs(500 Å)/GaP(样品 A) 和 GaAs(100 Å)/GaP (样品 B), 衬底温度为 560°C。常规 X 射线衍射 (XRD) 和掠入射衍射 (GID) 实验分别在 D/MAX- γ_4 转靶 X 射线衍射仪和先前描述过的 GID 装置^[3]上进行的。GID 装置所用的光源为 0.8kW 细焦点 X 光管, 按 0.15mm 竖直焦点尺寸和 0.3mm 水平狭缝尺寸, 掠射角的控制分辨率^[3]为 0.1°。

3 结果和讨论

图 1 和图 2 分别为样品 A 和 B 的常规径向扫描 (θ - 2θ) 衍射图。该扫描方式中散射

* 国家自然科学基金资助课题
本文 1992 年 11 月 22 日收到

矢量的方向固定,大小改变,为测量面间距的衍射几何。由 GaAs 和 GaP 004 峰的相对位置,经过 GaP 晶格常数校正后,可以得出 GaAs 膜的垂直晶格常数 $a_{\perp}^{\parallel}$ 。

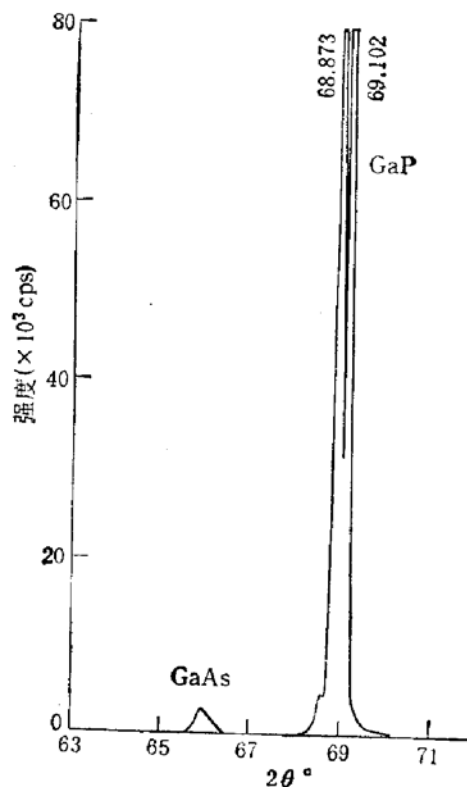


图 1 样品 A 的 XRD 图谱, $\text{CuK}\alpha$ 004 反射

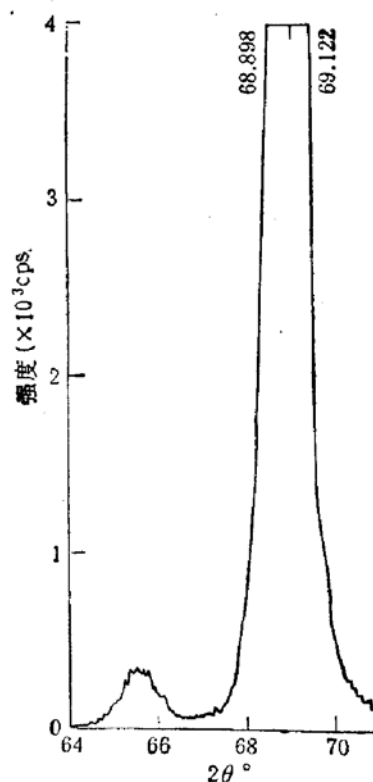


图 2 样品 B 的 XRD 图谱, $\text{CuK}\alpha$ 004 反射

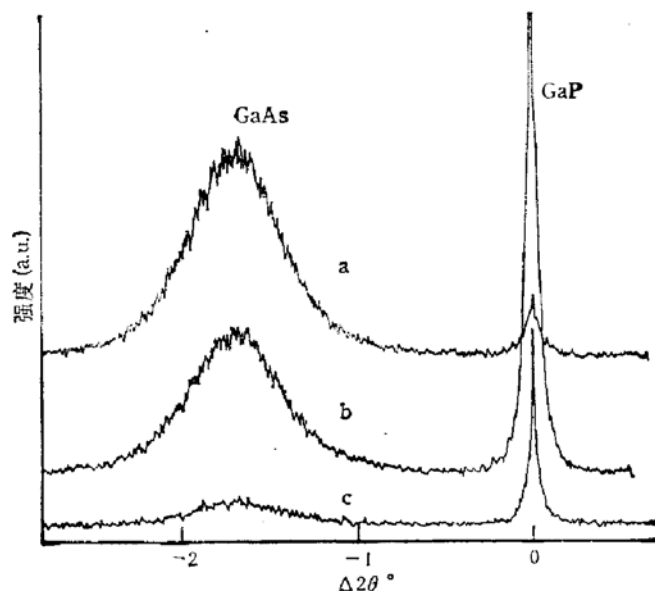


图 3 样品 A 的 GID 图谱 $\text{CuK}\alpha 220$ 衍射
(a) $\phi = 0.1^\circ$ (b) $\phi = 0.2^\circ$ (c) $\phi = 0.3^\circ$

图 3 为样品 A 的非共面几何 (NCG) 掠入射全反射 220 衍射图,其中 a, b, c 三个不同掠入射角 ϕ 为 0.1° 、 0.2° 和 0.3° ,相应的 $1/e$ 贯穿深度^[1]分别约为 $40 \text{ \AA}$ 、 $120 \text{ \AA}$ 和 $1180 \text{ \AA}$ 。图 3 中 GaAs 膜峰的出现表明界面发生弛豫;因为 NCG 模式 GID 所测量的是垂

直于膜表面的晶面散射,对于完美共格外延生长的界面,观察不到第二个峰。由 GaAs 膜峰的相对位置,经过 GaP 衬底晶格常数校正后,可得到薄膜的水平晶格常数 a_l^H 。

界面弛豫量 ν 和界面失配度(水平 X 光应变) ϵ^H 分别表示为:

$$\nu = (a_l^H - a_s)/(a_l^{\text{free}} - a_s), \quad (1)$$

$$\epsilon^H = (a_l^H - a_s)/a_s, \quad (2)$$

式中 a_l^{free} 和 a_s 分别为薄膜和衬底的自由晶格常数。GaAs 和 GaP 的自由晶格常数分别为 5.6534 Å 和 5.4495 Å。一般认为衬底为半无限厚晶体,其晶格常数不变。界面弛豫量 ν 和界面失配度 ϵ^H 可由下式推导:^[4]

$$\epsilon^H = \nu m,$$

$$\epsilon^\perp = (1 - \nu)Em + \nu m, \quad (3)$$

式中 $\epsilon^\perp$ 为薄膜的垂直 X 光应变, $\epsilon^\perp = (a_l^\perp - a_s)/a_s$, $E = (1 + 2C_{12}/C_{11})$, C_{11} 和 C_{12} 为弹性常数, $m = (a_l^{\text{free}} - a_s)/a_s$, 表示薄膜和衬底之间的自由点阵失配度。对于二元半导体化合物薄膜, E 和 m 为已知数,因此,由普通 X 光衍射或双晶衍射测定 $\epsilon^\perp$ 后,即可由(3)式相继算出 ν 和 ϵ^H 。但对于三元或以上化合物半导体薄膜或超晶格, E 和 m 分别为成份 x 的函数,而 x 在 MBE 生长中往往偏离名义值,是待确定的量,因此不能由(3)式计算界面失配度和弛豫量。适当的方法是采用 GID 技术直接测定 a_l^H , 然后由(1)和(2)式算出 ν 和 ϵ^H 。表 1 列出了样品 A 的界面结构参数,其中 FWHM 表示 GaAs 膜峰的半高宽。

表 1 样品 A 的界面结构参数

XRD			GID				
$a_l^\perp$ (Å)	ν	ϵ^H	ϕ (度)	a_l^H (Å)	ν	ϵ^H	FWHM(度)
5.6640	0.94	0.035	0.1	5.6283	0.88	0.033	0.603
			0.2	5.6283	0.88	0.033	0.603
			0.3	5.6283	0.88	0.033	0.603

从表 1 我们可以看出, GID 测量结合常规衍射可以给出薄膜晶胞畸变参数、界面失配度和弛豫量。样品 A 中界面弛豫达到 90% 左右,但薄膜晶胞还是保留了一定的四方畸变特性,即 $a_l^\perp > a_l^H$; 尤其值得注意的是,畸变参数和衍射曲线半高宽均不随薄膜的深度发生变化,即晶格弛豫是在薄膜与衬底的界面处集中发生的。

我们用 GID 技术没有测到样品 B 的薄膜峰。由于样品 B 薄膜的厚度仅有 100 Å,而且未生长缓冲层,因而衬底表面和薄膜的制备质量将对 GID 实验有较大影响;另外,我们的 GID 装置的光源功率小,也没有采用累加记数,灵敏度受到限制。但从图 3 中曲线 a 可以看出, GID 方法使得近表面层衍射信号贡献极大地增强,100 Å 厚的薄膜是在其测量灵敏度之内的。

表 2 样品 B 的界面结构参数

$a_l^\perp$ (Å)	a_l^H (Å)	ν	ϵ^H
5.7068	5.5966	0.73	0.027

表 2 列出了由(3)式计算的样品 B 的界面结构参数。与样品 A 相比,样品 B 的界面失配度和弛豫量都有所减小。

参 考 文 献

- [1] 崔树范,物理,1993(在出版中).
- [2] W. C Marra. *et al.*, J. Appl. Phys., 1979, 50: 6927.
- [3] S. F. Cui *et al.*, Rev. Sci. Instrum., 1991, 62, : 2419.
- [4] S. F. Cui *et al.*, Modern Phys. Lett., 1991, B23: 1591.

X-Ray Grazing Incidence Diffraction Analysis of GaAs/GaP Interfaces

Cui Shufan Wu Lansheng Wang Guanming Mai Zhenhong

(*Institute of Physics, The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080*)

Wang Chunyan Wang Yutian

(*Institute of Semiconductors, The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083*)

Li Mei and Ge Zhongjiu

(*Changchun Institute of Physics, The Chinese Academy of Sciences, Changchun 130021*)

Abstract The interfaces of strained layers GaAs/GaP are investigated by means of X-ray grazing incidence diffraction under total external reflection conditions, combined with regular X-ray diffraction. The distortion of the thin films, the parameters of mismatch and relaxation of the interface are established. The results show that grazing incidence diffraction (GID) is a powerful tool for determining the interface structure of semiconductor epitaxial thin films.

PACC: 6110F, 6820, 6855