

# 超晶格结构的离子束沟道分析

潘传康

(江西工业大学)

郑戴仇

(江西教育学院)

1970年, Leo Esaki 和 Ray Tsu 首先提出了超晶格的概念<sup>[1]</sup>. 他们从量子力学的基本理论推论出超晶格具有电子传输和光学性质的可剪裁性, 并指出了可能实现的制备超晶格的方法, 即把两种不同的半导体材料交替地生长在一起, 形成一种超薄多层结构(组分超晶格). 随着分子束外延(MBE)技术的完善和发展, 三年后 L. L. Chang 等人用 MBE 方法成功地实现了  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}$  组分超晶格的制备<sup>[2]</sup>. 其后  $\text{InAs}/\text{GaAs}$ ,  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ,  $\text{InAs}/\text{GaSb}$ ,  $\text{AlSb}/\text{GaSb}$  和  $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}/\text{GaAs}$  等各种系列的组分超晶格都相继制成和得以研究.

把 RBS (Rutherford Backscattering) 方法应用于超晶格结构的研究起始于 1980 年 F. W. Saris 等人的工作<sup>[3]</sup>.  $\text{InAs}/\text{GaSb}$  超晶格背散射谱的振动结构是超晶格层次和组分的周期性的反映. 他们还发现了沿着 [110] 晶轴方向的反常沟道现象. W. K. Chu 等人提出了行偏移模型 (row-offset model) 并用此模型去解释这一结果, 但仅在定性方面成立, 而在定量方面却与实验结果相差甚远. 1983 年, J. H. Barrett 作超晶格沟道实验的计算机模拟指出, 由于超晶格相邻层间材料的晶格常数的失配, 因而在形成超晶格时, 晶格将发生形变. 沿着晶格生长的方向, 拉伸与压缩形变交替地存在于不同的层中. 考虑到形变引起超晶格 [110] 晶轴方向扭折的因素后, 计算机模拟计算结果与实验结果在定量方面是一致的<sup>[4]</sup>. 1983 年, W. K. Chu 等人用离子束沟道扫描法直接证实了超晶格中拉伸和压缩形变的存在, 并测出了  $\text{AlSb}/\text{GaSb}$  晶格常数的微小形变量 ( $\sim 0.04 \text{ \AA}$ )<sup>[5]</sup>.

超晶格的性质与超晶格结构的形变程度有

关, 形变成为一个重要的附加调制因素, 这点使得用沟道法研究超晶格的形变显得更有意义.

最近 C. K. Pan 等人把 RBS(卢瑟福背散射)、计算机模拟计算和 X 射线等方法综合地应用于  $\text{AlSb}/\text{GaSb}$  形变层超晶格结构的研究, 发现离子束的轰击会导致形变程度的减弱, 这个结果可能导致产生一种调制超晶格性能的新方法<sup>[6]</sup>.

## 一、超晶格背散射能谱

超晶格背散射能谱包含着超晶格组分和层厚的信息, 图 1 是  $\text{InAs}/\text{GaSb}$  超晶格的背散射能谱. 样品中  $\text{InAs}$  和  $\text{GaSb}$  的每层厚度都是  $500 \text{ \AA}$ , 各有 20 层. 氦离子束的能量是  $2.225 \text{ MeV}$ . 图上还画出了  $\text{GaSb}$  单晶的背散射能谱(虚线), 以便作比较.

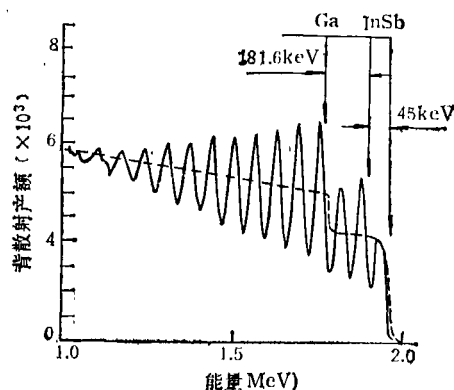


图 1 超晶格  $\text{InAs}/\text{GaSb}$  背散射谱<sup>[3]</sup>

背散射能谱的振动结构是与超晶格的组分和层厚的周期性相对应的. 实验中入射线与样品表面法线的夹角是  $3^\circ$ , 粒子探测器置于散射角  $170^\circ$  的位置.

$\text{GaSb}$  单晶背散射谱是有一个台阶的较平滑的曲线, 台阶是由于单晶表面上的  $\text{Sb}$  原子和

Ga 原子质量的不同而形成。氮离子被这两种原子散射后的能量相差 181.6keV。

超晶格谱呈现明显的振动结构是超晶格中 InAs 和 GaSb 两种材料交替叠合的反映。由于最表面层是 GaSb, 所以这层中 Sb 和 Ga 原子所给出的背散射粒子能量与 GaSb 单晶谱的能量前沿位置一致。超晶格谱的第一个峰的位置是由第一个 GaSb 层中的 Sb 原子上散射出来的粒子给出, 第二个峰的位置是由第一个 InAs 层中的 In 原子上散射的粒子决定。In 原子质量比 Sb 要轻, 它使得 In 的峰的能量位置低于 Sb 约 15.4keV, 加上入射粒子通过第一层 GaSb 进入和射出时的 30keV 的能量损失, 最终 In 的峰的位置距第一个 Sb 峰的位置为 45keV。第二个峰的高度除第一层 InAs 中 In 的贡献外, 还叠加有从第二层 GaSb 中的 Sb 原子上的背散射粒子产额。从上述实例的分析中, 我们可以看出超晶格背散射谱振动结构与超晶格的组分原子和层厚的关系。

## 二、超晶格的沟道谱

超晶格沟道谱包含着超晶格结构的信息。图 2 是 AlSb/GaSb 超晶格的随机谱和沟道谱。样品中 AlSb 和 GaSb 每层厚度都是 300 Å, 各有 10 层。氮离子束能量是 1.76MeV。为便于比较, 图上还画出了表示沿 GaSb 单晶的 [100] 方向的沟道谱(最低的实线)。

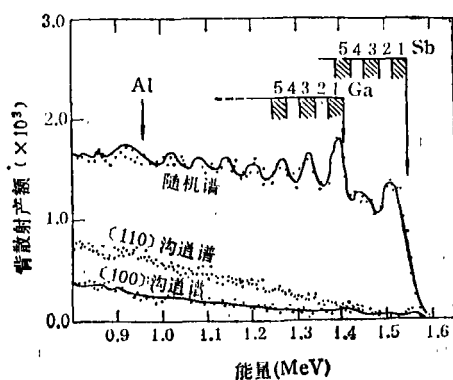


图 2 超晶格 AlSb/GaSb 的随机谱和沟道谱<sup>[1]</sup>

从图 2 可以看出: (1) 沿 [100] 方向的沟

道谱和单晶 GaSb 沿 [100] 方向的沟道谱几乎完全一致, 沟道谱表面峰附近的最小产额比率接近 3%, 这表明 AlSb/GaSb 超晶格具有晶格的完美性; (2) 沿 [110] 方向的沟道谱, 背散射产额明显地高于沿 [100] 方向的产额。对于一般的立方晶格, 沿 [110] 方向的沟道谱应略低于沿 [100] 方向的沟道谱, 而这里却显示出相反的情况。我们称之为反常沟道效应。反常沟道效应普遍地存在于超晶格之中, 它是与超晶格结构的形变密切相关的一种现象。

## 三、行偏移模型与形变模型

为了作出对反常沟道谱的本质的解释, W. K. Chu 等人提出了行偏移模型。他们假设在超晶格层间的内界面上, 由于不同原子的结合产生了键的增长和缩短的变化。以 InAs/GaSb 超晶格为例, InAs 键长为 0.2623nm, GaSb 键长为 0.2639nm, 它们之间的差别很小, 仅为 0.7%。然而在层间内界面上, Ga-As 键长为 0.2448nm, 比 GaSb 小 7%, In-Sb 键长为 0.2805nm, 比 InAs 大 7%。对离子束来说, 上述变化没有造成任何沿 [100] 方向的障碍, 但对 [110] 方向却产生了一个明显的在每个内界面处原子排列的偏移。他们认为这种沟道方向在层间界面上的偏移将导致高的背散射产额。

J. H. Barrett 对超晶格沟道实验进行计算机模拟指出<sup>[4]</sup>, 行偏移模型在定量方面不能符合实验的结果。为了与实验一致, 则键长的变化必须增大四倍, 然而这点又不符合超晶格结构的实际情况, 因此行偏移不是超晶格反常沟道谱产生的主要原因。

J. H. Barrett 认为, 由于超晶格相邻两层的材料在晶格常数上的失配, 为了使两种材料生长在一起, 两相邻层的晶格常数在与生长方向垂直的平面内应取同样的值, 而在晶体生长的方向上将发生拉伸或压缩的形变, 这就是形变模型 (strained model)。

在垂直于晶格生长的平面内的晶格常数  $a_{\perp}$  可按下式计算<sup>[7]</sup>:

$$a_{\parallel} = a_1 \left[ 1 + \frac{fG_2h_2}{G_1h_1 + G_2h_2} \right],$$

或

$$a_{\parallel} = a_2 \left[ 1 - \frac{fG_1h_1}{G_1h_1 + G_2h_2} \right],$$

式中  $(a_1, a_2)$ ,  $(G_1, G_2)$  分别为两种材料为单晶时的晶格常数和剪切模量,  $h_1, h_2$  分别为它们在组成超晶格时的层厚。

在生长方向上产生的拉伸或压缩的形变, 我们可以根据泊松 (Poisson) 效应进行计算:

$$a_{\perp}^1 - a_1 = -2 \left[ \frac{C_{12}}{C_{11}} \right]_1 (a_{\parallel} - a_1),$$

或

$$a_{\perp}^2 - a_2 = -2 \left[ \frac{C_{12}}{C_{11}} \right]_2 (a_{\parallel} - a_2),$$

式中  $a_{\perp}^1, a_{\perp}^2$  分别为两种组成超晶格的材料在生长方向上形变后的晶格常数,  $C_{12}, C_{11}$  是材料的弹性强度系数。对于 AlSb/GaSb 样品, 只要将已知数值代入上式, 即可算得  $a_{\perp}^1 - a_2 = 0.04 \text{ \AA}$ 。如前所述, 这种形变对 [100] 方向的沟道没有影响, 但在 [110] 方向上, 却会使各层的最佳沟道方向产生了扭折 (如图 3 所示)。J. H. Barrett 把这种扭折当作超晶格反常沟道效

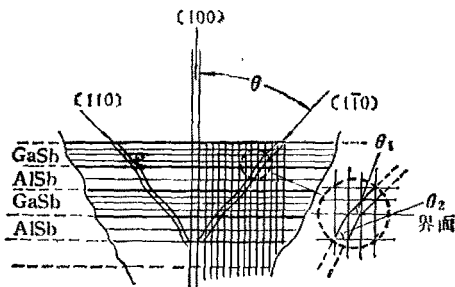


图 3 超晶格中 [110] 方向的扭折<sup>[5]</sup>

应的起源, 并且通过计算机模拟在定性和定量两方面都得到与实验一致的结果。最佳沟道方向扭折的角度可以通过如下简单的几何方法算出:

$$\Delta\theta = \theta_2 - \theta_1 = \text{tg}^{-1} \left[ \frac{a_{\perp}^2}{a_{\parallel}} \right] - \text{tg}^{-1} \left[ \frac{a_{\perp}^1}{a_{\parallel}} \right].$$

对 AlSb/GaSb 超晶格,  $\Delta\theta$  的值为  $0.374^\circ$ 。

#### 四、形变量的沟道法测量

1983年, W. K. Chu 等人首先用沟道分

层角扫描方法对超晶格形变量或扭折角进行了测量<sup>[5]</sup>。实验时采用 1.76 MeV 氦离子束, 并在 AlSb/GaSb ( $300 \text{ \AA}/300 \text{ \AA}$ ) 的样品上进行。晶轴方位的确定是用一个二维定角器完成的。绕垂直于样品表面的轴的旋转角用  $\phi$  表示, 绕通过样品并垂直于离子束的轴的转动角用  $\theta$  表示。把离子束调到 [110] 轴的方向, 并进行角扫描, 其步骤如图 4 所示。

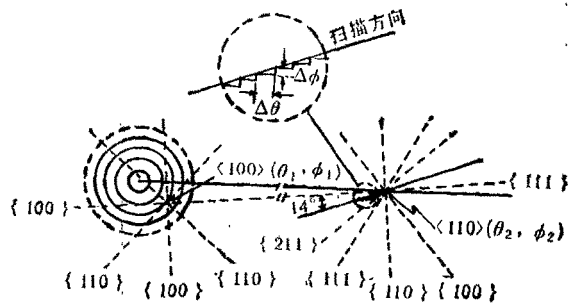


图 4 沟道实验的角方位图<sup>[5]</sup>

首先沿用标准的方法找到 [100] 晶轴的方位角  $(\theta_1, \phi_1)$ , 然后沿着 (100) 平面逐点逼近 [110] 轴  $(\theta_2, \phi_2)$ 。在进行过程中, 每改变一次  $\theta$  角要相应改变一次  $\phi$  角。  $\theta$  的变化, 开始可以一次大一些 ( $\sim 10^\circ$ ), 随后越接近 [110] 轴, 变化之值应越小。由于超晶格 [110] 晶轴方向是扭折的, 所以初步确定的 [110] 沟道方向是许多层的平均最佳沟道方向。为了反映各层最佳沟道方位, 需要沿一确定的平面进行扫描, 摄取一系列的在 [110] 轴附近的背散射谱。W. K. Chu 等人的实验中所采用的扫描平面位置偏离 (100) 平面  $14^\circ$  (如图 4 所示), 以避免平面沟道效应的影响。实验中一共摄取了 52 个背散射谱, 各谱间  $\theta$  角相差  $0.05^\circ$ ,  $\phi$  角相差  $0.02^\circ$ 。能谱的振动性质与前面描述的一致, 但特点在于 AlSb/GaSb 中 Sb 原子是各层都有的, 因而在 Ga 信号出现前的高能区段, 背散射产额仅为第一层到第四层的 Sb 原子的贡献, 这就使得我们有可能去分层探索最佳沟道方向 (这个特点可以从图 2 中看出)。W. K. Chu 的实验中 15 keV 大约相当于探测器的分辨率。如果我们取一个 15 keV 的能量区间为 1.535—1.550 MeV, 则在

这个能量区间内每个谱的背散射产额都是从第一层 GaSb 中的 Sb 原子上散射出来的,我们把 52 个谱的每一个谱在这个能量区间上的积分产额比率与它们的取谱的角位置关系曲线画出来,就得到一条角扫描曲线,扫描曲线的最低中心位置对应着第一层的最佳沟道方向。随后我们把能量区间依次固定在其它的位置上,如 1.490—1.505MeV 对应于第二层,1.460—1.475 MeV 对应于第三层 1.430—1.445MeV 对应于第四层。图 5 画出了每一层的角扫描曲线。

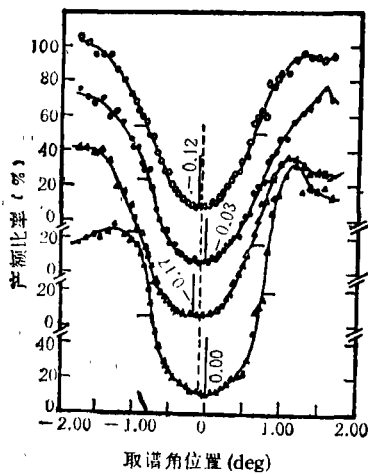


图 5 分层角扫描曲线<sup>[4]</sup>

最下面的一条曲线的最低中心点角位置是  $0^\circ$  (相当于图 3 中  $\theta = 45^\circ$ ),意味着这一层没有形变,因而最佳沟道方向与单晶 GaSb 一致。第二条曲线对应着第二层,曲线最低中心点角位置是  $-0.17^\circ$ ,即  $\theta < 45^\circ$ 。对于第三层和第四层的最佳沟道方向依然可以看出。

我们还可以通过能量区段位置的选择,从表面移向内层,并在每层内多作几条角扫描曲

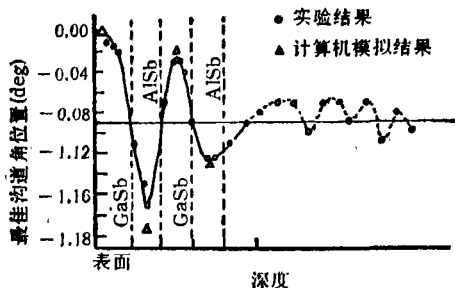


图 6 最佳沟道的角位置与深度的关系曲线<sup>[4]</sup>

线,然后把曲线最低中心角位置与深度的关系画出来(见图 6),得出一个衰减的振动曲线。

衰减的原因可以解释为粒子在通过表面以下较深层次时,由于能量的歧离而逐渐减小对晶轴方向扭折的敏感性,最终趋于一个平均值。从最初的几个层次看出,形变超晶格在[110]方向上存在的扭折现象是十分明显的。我们可以把表面第一层和第二层之间最佳沟道方向角之差用来描述层间的扭折现象。实验得出的这个角度是  $0.17^\circ$ ,与理论计算的扭折角不相同,其原因将在下面讨论。

### 五、沟道角扫描法与计算机模拟法、X 射线法的对比

为了进一步分析 AlSb/GaSb 的沟道角扫描的实验结果,C. K. Pan 等人进一步作计算机模拟和 X 射线法测量,并将各种结果进行比较<sup>[6]</sup>。计算机模拟是在与沟道实验相同的条件下取不同的扭折角( $0^\circ, 0.17^\circ, 0.24^\circ, 0.36^\circ$ )进行的。图 7 示出了从计算机模拟得出的在假定扭折角为  $0.36^\circ$  时的分层角扫描曲线。其第一层与第二层的最佳沟道方位的夹角是  $0.20^\circ$ ,这个值也小于模拟时输入计算机的假设的超晶格层间的扭折角 ( $0.36^\circ$ )。

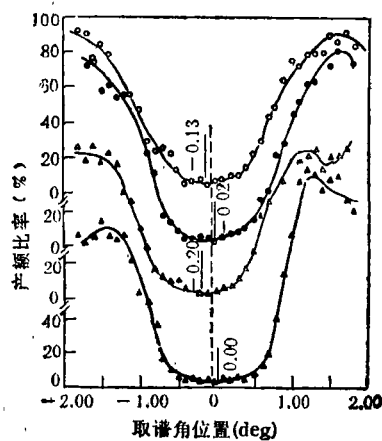


图 7 计算机模拟的角扫描曲线

这个结果使我们认识到实验测出的第一、第二层间最佳沟道的夹角只是超晶格扭折角大

小的一种表征,其值并不等于扭折角。如果我们近似地作个估计,设沟道角扫描实验得出的第一、二层间最佳沟道方向的夹角与形变超晶格中扭折角的大小成正比,那么实验得出的 $0.17^\circ$ 就相当于扭折角为 $0.31^\circ$ ,这个值依然小于理论计算值( $0.374^\circ$ )。C. K. Pan 等人进一步将同一样品作 X 射线分析,实验是分别在样品上被离子束轰击过的区域和未被离子束轰击过的区域上进行的,结果发现在未被离子束轰击过的区域上得出的扭折角为 $0.365^\circ$ ,这个值与理论计算值非常一致,而在离子束轰击过的区域得到的扭折角则变小,变小的程度取决于轰击的剂量。这启发我们想到离子束的轰击可能导致超晶格内形变的某种程度的松弛,其影响的大小有赖于剂量,这种效应还可能被用作对形变的一种调制因素,所有这些问题,尚待进一步研究。

## 六、平面沟道粒子波长与形变超晶格周期共振分析法

AlSb / GaSb 超晶格由于两种材料都含有 Sb,而且 Ga, Al 与 Sb 在原子质量上有一个较大的差别,因而在背散射谱上提供了一个单纯由 Sb 的信号组成的区域,这点给作分层沟道扫描以特殊的方便。但是这种方法用于其他的超晶格就不一定便利,如图 1 中的 InAs / GaSb 谱从第二个峰开始就是第二层 GaSb 中的 Sb 原子和第一层 InAs 中的 In 原子贡献的叠加。虽然我们可以借助于理论的思考把谱进行分解,但毕竟是一件非常繁杂的工作。这里介绍另一种结构分析方法,即平面沟道粒子波长与形变层超晶格周期共振法。这是 W. K. Chu 等人,在分析 GaP / GaAs<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub>(29nm/29nm)超晶格沟道谱时提出的<sup>[9]</sup>。

图 8 是这个样品的随机谱和 {110} 平面沟道谱。样品中  $x = 0.12$ , 氦离子能量为 1.2 MeV。{110} 平面沟道谱仅在第一层中呈现出较好的沟道,而在通过第二个层间界面后,沟道现象完全消失,背散射谱产额甚至超过随机谱。

此种现象的产生,还是起源于超晶格内之形变,形变引起了{110}平面在层间发生扭折。

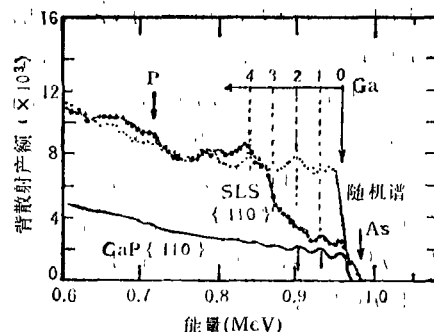


图 8 GaP/GaAsP 反常平面沟道谱<sup>[9]</sup>

图 8 所示谱的特征是由于平面沟道粒子波长与形变层周期共振所产生。对 GaP / GaAs<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub>(29nm/29nm)来说,形变层周期是 $29 \times 2 \times \sqrt{2} = 82\text{nm}$ ,这就是说,周期是指粒子通过两相邻层的距离,乘以 $\sqrt{2}$ 是因为离子束入射方向与[100]轴有 $45^\circ$ 夹角。由于受晶体原子平面集体势场的作用,因而粒子在平面沟道中所走的路径,是一特定曲线。为简化起见,如果这种势在垂直于平面的方向上是谐和的,则径迹是正弦或余弦曲线。这是粒子能够被约束在平面间运动而深入到晶体内部的原因。这个性质早为实验所证实(Abel et al., 1975)。在图 8 中,从 GaP 单晶{110}平面沟道谱中我们也看到波动的现象,这是粒子在平面沟道中对上述运动性质的一种反映,波峰对应于粒子接近原子平面而有较大的背散射几率,波谷对应于粒子被聚焦在原子平面的中心而具有较小的背散射几率。很明显,两波峰(或波谷)之间对应的在深度标尺上的距离是粒子径迹波的波长的二分之一。实验表明,入射粒子的能量不同则波长不同,因而我们可以通过改变离子束的能量达到改变波长的目的。在 GaP / GaAs<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub>超晶格中,As 的成分很少,而且 As 与 Ga 原子序数相差不大,所以我们有理由采用从 GaP 单晶实验得到的波长去当作粒子在超晶格样品中的波长。W. K. Chu 的实验测得能量为 1.2 MeV 的离子束在 GaP 晶体中的波长为 82nm,这个值刚好与 GaP / GaAs<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub>( $x = 0.12$ )的

周期相匹配。离子束在{110}平面中运动,每通过一次界面,由于原子平面有一个扭折角,因而获得一个附加的横向冲量,这个冲量将增加粒子离开平面沟道的几率。因而在通过若干次扭折后,粒子几乎全部离开沟道。这是对图8谱的定性解释。W. K. Chu等人利用连续、谐和势的假设,列出了粒子的运动方程,进行了数学计算,得到了与实验非常吻合的结果,而且推算出GaP/GaAs<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub> ( $x = 0.12$ )超晶格的形变扭折角为0.15°。这与由弹性理论算出的0.20°基本一致。

本文作者对美国北卡大学著名离子束专家 W. K.

Chu 教授的多方指导表示感谢。

### 参 考 文 献

- [1] L. Esaki and R. Tsu., *IBM J. Res. Develop.*, **14** (1970), 61.
- [2] L. L. Chang et al., *J. Vac. Sci. Technol.*, **10** (1973), 11.
- [3] F. W. Saris et al., *Appl. Phys. Lett.*, **37** (1980), 931.
- [4] J. H. Barrett, *Phys. Rev. B*, **28** (1983), 2328.
- [5] W. K. Chu et al., *Phys. Rev. B*, **28** (1983), 4033.
- [6] C. K. Pan et al., *Phys. Rev. B*, **31** (1985), 1270.
- [7] J. W. Matthews and A. E. Blakeslee, *J. Vac. Sci. Technol.*, **14** (1977), 989.
- [8] W. K. Chu et al., *Phys. Rev. Lett.*, **52** (1984), 125.

## 中国硅酸盐学会快离子导体专业委员会 正式成立

经中国硅酸盐学会第三届理事会研究和中国科学院学部审定批准,快离子导体专业委员会已经正式成立。该委员会由中国科学院上海硅酸盐研究所、中国科学院物理研究所、北京钢铁学院等单位的11人组成,挂靠在中国科学院上海硅酸盐研究所。

快离子导体专业委员会于1987年2月25日至26日在中国科学院上海硅酸盐研究所举行了第一次会议。会议由快离子导体专业委员会主任委员林祖饗教授主持。

会议回顾了1980年第一届中国快离子导体学术讨论会以来,国内快离子导体的研究、教学、应用开发

与国际交往等方面的情况。会议讨论决定:(1)中国第四届快离子导体学术讨论会定于1988年8月初在湖南科技活动中心召开,国外同行可以自费参加或由有关单位邀请参加;(2)争取派代表参加今年在联邦德国召开的第六届国际固态离子学会议,争取1991年在中国召开第八届国际固态离子学会议;(3)以中国快离子导体专业委员会的名义作为集体会员加入亚太地区固态离子学组织,并争取较多的人出席1988年5月在日本举行的亚太地区固态离子学会议。

(王 刚)

### 1987年第7期《物理》内容预告

重离子体系及其超导电性(赵忠贤等);半导体超晶格(王迅);六维空间的晶态——准晶态(姜小龙等);非晶态-晶态相变型光盘记录介质(冯嘉猷等);激光打印、激光制版和激光刻字(龚焕明等);等离子体金属表面硬化技术(郭华聪);无机闪烁晶体及其在高能物理与核物理中的应用(顾以藩);八毫米微波在等离子体离子声湍流上的散射测量(吴小文等);MPT-X装置

电源回路的计算和实验(程健等);激光稳频技术的新发展(II)——连续激光器的稳频技术(屠世谷等);微观宇宙的开拓者及其应获得的崇高评价——纪念卢瑟福逝世五十周年(阎康年);关于卢瑟福的点滴回忆(张文裕);统计物理学(及有关)名词(中国物理学会名词委员会);