

Si/Ge 应变层超晶格的椭偏光谱

张瑞智 罗晋生

(西安交通大学电信学院, 西安 710049)

摘 要 测量了几种不同组分的 $(\text{Si})_M/(\text{Ge})_N$ 应变超晶格材料的椭偏光谱(2.0~ 5.0 eV), 并得到了其介电函数谱; 应用介电函数的临界点理论, 研究了 $(\text{Si})_M/(\text{Ge})_N$ 应变超晶格材料的光学性质。发现短周期 Si/Ge 应变超晶格除了具有明显的 E_1 和 E_2 带间跃迁外, 还存在与应力和超晶格能带的折迭效应有关的跃迁峰, 其能量分别位于 2.3~ 3.0 eV 和 3.3~ 4.0 eV 范围内。

关键词 椭偏光谱, 介电函数, 超晶格。

1 引 言

$(\text{Si})_M/(\text{Ge})_N$ 应变层超晶格是一类特别引人注目的超晶格系统。这种由 M 层 Si 原子和 N 层 Ge 原子组成基本单元的超晶格是共价、非极性和晶格失配的半导体超晶格典型范例。通过控制不同的层数和合金成分, 可以在大范围内剪裁 Si/Ge 应变层光电特性。但无论是基础研究还是新器件的开发, 对 Si/Ge 应变层超晶格的基本光学特性有一个清楚的了解是非常重要的。目前对 Si/Ge 应变层结构的理论和实验研究, 已有不少报道。本文报道了作者对 Si/Ge 应变超晶格紫外-可见光区的椭偏光谱测量结果。椭偏光谱法可以直接测得材料的光频介电函数谱。对于带间跃迁过程, 可以从介电函数的虚部分析基本吸收边及布里渊区的临界点的能带结构和性质。椭偏光谱具有快速准确和完全无损的测量优点。目前将椭偏技术用于多层材料结构的研究报导日益增多。对于硅锗材料, 大多工作是测量 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 合金的光学性质^[1], 文献[2]报导了应变 $(\text{Si})_6/(\text{Ge})_4$ 超晶格材料的椭偏光谱。作者制备了几种不同组分的对称应变 Si/Ge 超晶格样品, 测量了其紫外-可见光区的椭偏光谱, 得到了其光频介电函数谱。并根据介电函数的临界点理论, 通过分析 Si/Ge 应变超晶格的带间跃迁, 研究了短周期 $(\text{Si})_M/(\text{Ge})_N$ 应变超晶格材料的光学性质。

2 实验和椭偏光谱的测量

$(\text{Si})_M/(\text{Ge})_N$ 应变层超晶格样品的结构如图 1 所示。该样品是在美国加州大学洛杉矶分校用分子束外延(MBE)方法制备的。由于 Si 和 Ge 的晶格失配律很大, 通过应变使晶格匹配生长在 Si 衬底上的 Si/Ge 超晶格只能达到 10 nm 厚。生长层中非对称应变可导致层中能量不稳定。因此在(100) Si 衬底上首先生长一层 2 μm 厚的 $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ 缓冲层, 然后再生长

(Si)_M/(Ge)_N 超晶格($M/N = 4$)。这样生长的对称应变超晶格,总厚度几乎没有限制。共制备了 3 种样品,表 1 给出各样品的原子层数和周期数,样品实际厚度为 300 nm。

Table 1. Parameters of the strained (Si)_M/(Ge)_N superlattices

sample	M/N	period
1	8/2	240
2	16/4	120
3	32/8	60

椭圆光谱是用旋转检偏器式自动椭圆光谱仪测量的。测量的能量范围为 2.0~ 5.0 eV,扫描间隔为 0.05~ 0.1 eV。在椭圆光谱测量中,实验主要是测量反射光的偏振态。它通过分析光在样品表面反射前后 p 波和 s 波偏振状态的变化(振幅和相位)来揭示材料的光学性质。对于最简单的由空气和固体介质组成的两相体系,当入射光的波长及入射角 ϕ 已知时,则可很方便的得到材料的复介电函数^[3]。

$$\epsilon = \sin^2 \phi + \sin^2 \phi \operatorname{tg}^2 \psi \left[\frac{1 - \rho}{1 + \rho} \right]^2$$

$$\rho = \operatorname{tg} \psi \exp(i\Delta) = R_p/R_s \quad (1)$$

式中 R_p 和 R_s 分别为 p 波与 s 波的振幅反射率; ψ 和 Δ 代表椭圆角。图 2 给出了 1 号样品的椭圆光谱。

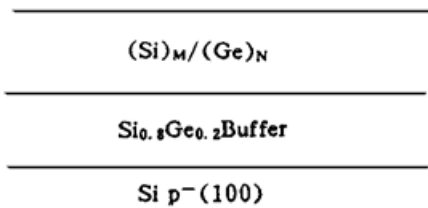


Fig. 1 Schematic structure of the samples

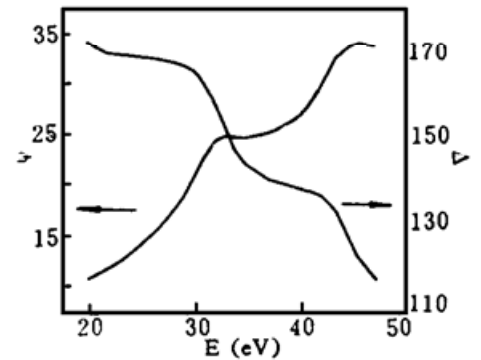


Fig. 2 Raw ellipsometric data of the sample 1 (Si₈/Ge₂ SLS)

3 介电函数谱

由椭圆光谱得到介电函数谱,最简单的处理方法是采用上面提到的两相模型。就所用的样品来说,(Si)_M/(Ge)_N 应变层超晶格本身是一种多层结构,但是当 M 与 N 值较小时,更适宜把它做为一整体,用超晶格整体的介电函数来表征其特征。考虑到样品表面氧化层的影响,在处理数据时采用空气-氧化层-超晶格-衬底结构 4 层模型。有关的椭圆计算公式请参阅文献[4]。

图 3 和图 4 分别是各个超晶格样品的介电函数的实部 ϵ_1 谱和虚部 ϵ_2 谱。图中还给出了应变 Si_{0.8}Ge_{0.2} 合金层的介电函数谱,其数据取自文献[5]。

根据带间跃迁理论^[6],在二维临界点附近的介电函数由下式给出

$$\epsilon(E) = c - A \exp(i\phi) \lg(E - E_g + i\Gamma) \quad (2)$$

式中 A 为振幅, E_g 为跃迁能量, Γ 为展宽参数, ϕ 为激子相移角。为了更精确的确定临界点的跃迁能量,通过拟合介电函数的虚部 ϵ_2 对能量的二阶导数谱来确定光谱结构的临界点的特

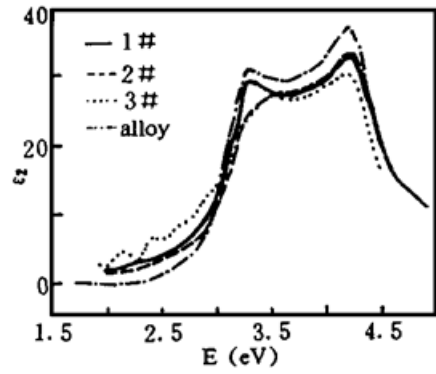
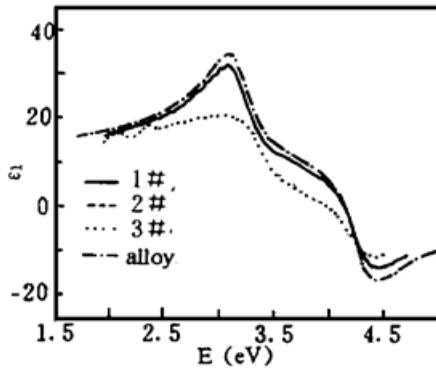


Fig. 3 Real part of ϵ_1 of the dielectric function of the Si/Ge SLS

Fig. 4 Imaginary part ϵ_2 of the dielectric function of the Si/Ge SLS

征。由于二阶导数谱上极小值还与激子效应有关，因而极小值所对应的能量并不完全是临界点的能量。然而，在给定能量范围内，二阶导数谱上极小值的数目有助于决定临界点的个数及跃迁能量。图 5 和图 6 分别为 1 号样品和 2 号样品 ϵ_2 对能量的二阶导数谱。

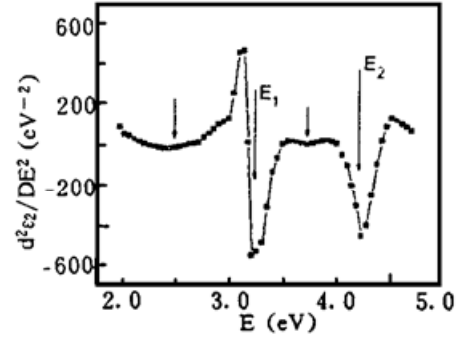
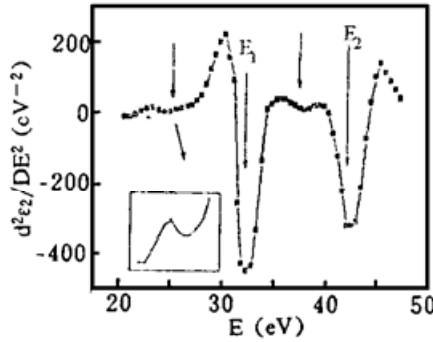


Fig. 5 The second derivative spectrum of imaginary part of the dielectric function of the sample 1

Fig. 6 The second derivative spectrum of imaginary part of the dielectric function of the sample 2

4 结果讨论

(Si)₃₂/(Ge)₈ 超晶格的 ϵ_1 与 ϵ_2 曲线，在低能端出现一系列振荡结构，是一种多次反射产生的干涉效应。这时不宜把超晶格当作一个整体来处理，对超晶格本身需要用分层模型来处理。因此实验测得的 Si₃₂/Ge₈ 应变层超晶格的介电函数谱只有表观意义。下面只讨论 1 号样品((Si)₈/(Ge)₂)和 2 号样品((Si)₁₆/(Ge)₄)的介电函数谱。

介电函数的虚部 ϵ_2 谱的结构与电子带间跃迁有关。对硅和锗，2.0~ 5.0 eV 范围的介电函数谱对应于 E_1 峰($\Lambda_1 \sim \Lambda_3$)、 E_0^1 峰($\Gamma_{15} \sim \Gamma_{25}$)和 E_2 峰(布里渊区 X 点附近)的结构。在常温下 E_1 和 E_0^1 是简并的，一般称为 E_1 跃迁。

从实验所得的介电函数谱(图 3、图 4)和二阶导数谱(图 5、图 6)可以看出，如同合金一样，Si/Ge 应变超晶格也具有明显的 E_1 峰和 E_2 峰。除此之外，二阶导数谱还有两个最小峰(临界点)，能量分别位于 2.3~ 3.0 eV 和 3.3~ 4.0 eV 范围内。文献[7]对(Si)₄/(Ge)₄ 超晶格的电反射法测量也观察到在 2.6~ 3.3 eV 之间有一系列带间跃迁。作者认为这一现象是超晶格材料所独有的。2.3~ 3.0 eV 之间的跃迁来源于超晶格中的应力所产生的能带的变化；3.3~ 4.0 eV 之间的结构产生于布里渊区中的能带折迭^[8]。常温下这些跃迁强度很小，因此介电函数谱中表现不明显。作者利用(2)式模拟计算了 ϵ_2 的二阶导数，得到临界点的能量如下：

1 号样品 (Si_8/Ge_2 超晶格): $E_1 = 3.11 \text{ eV}$, $E_2 = 4.21 \text{ eV}$

2 号样品 ($\text{Si}_{16}/\text{Ge}_4$ 超晶格): $E_1 = 3.15 \text{ eV}$, $E_2 = 4.23 \text{ eV}$

$\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ 应变合金层: $E_1 = 3.09 \text{ eV}$, $E_2 = 4.31 \text{ eV}$

$\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ 应变合金层的数据取自文献[9]。可以看出, 与合金材料一样, E_2 的大小与组分关系很小, 几乎不随其变化; 但是 E_1 则不然, 其能量随组分变化。与合金材料不同的是, 当 M 和 N 较小时 ($M + N < 20$), E_1 的大小更取决于 M 和 N 的比值。从图 2 和图 3 中可以看出, $(\text{Si})_M/(\text{Ge})_N$ 超晶格的 $\epsilon(E)$ 谱与组分为 $x = N/(M + N)$ 的 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 应变合金层的 $\epsilon(E)$ 谱非常相似。但由于应力的影响, Si/Ge 应变超晶格在低能端有更强的吸收。 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 应变合金层的 E_1 随着锗组分 x 的增大向低能量移动, 可以推测, 短周期的 $(\text{Si})_M/(\text{Ge})_N$ 应变超晶格的 E_1 也应具有类似的特性。

结 论 本文测量了 Si/Ge 应变超晶格的椭圆偏光谱, 得到并分析了介电函数谱, 研究了超晶格的带间跃迁。发现 Si/Ge 超晶格除了具有明显的 E_1 峰和 E_2 峰外, 还有两个带间跃迁, 其能量分别在 $2.3 \sim 3.0 \text{ eV}$ 和 $3.3 \sim 4.0 \text{ eV}$ 范围内。短周期的 $(\text{Si})_M/(\text{Ge})_N$ 应变超晶格的光学特性类似于同样组分比的 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 应变合金层的光学特性。

参 考 文 献

- [1] C. Pickering, R. T. Carline, D. J. Robbins *et al.*, Spectroscopic ellipsometry characterization of strained and relaxed $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ epitaxial layer. *J. Appl. Phys.*, 1993, **73**(1) : 239~ 250
- [2] U. Schmid, F. Lukes, N. E. Christensen *et al.*, Interband transitions in strain-symmetrized Ge_4Si_6 superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, 1993, **65**(15) : 1933~ 1936
- [3] D. E. Aspnes, A. A. Studna, Dielectric functions and optical parameters of Si, Ge, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, and InSb from 1.5 to 6.0 eV. *Phys. Rev. (B)*, 1983, **27**(2) : 985~ 1009
- [4] 张瑞智, 罗晋生, 陈敏麒, 双层光学薄膜参数的多入射角椭圆偏分析方法. *光学学报*, 1989, **9**(1) : 75~ 80
- [5] C. Pickering, R. T. Carline, Dielectric function spectra of strained and relaxed $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ alloys ($x = 0 \sim 0.25$). *J. Appl. Phys.*, 1994, **75**(1) : 4642~ 4647
- [6] D. E. Aspnes, *Handbook on Semi-conductors*. North Holland, New York, 1980 : 2
- [7] T. P. Pearsall, J. Bevk, J. C. Bean *et al.*, Electronic structure of Ge/Si monolayer strained-layered superlattices. *Phys. Rev. (B)*, 1989, **39**(6) : 3741~ 3757
- [8] U. Schmid, N. E. Christensen, M. Cardona, Relativistic band structure of Si, Ge and GeSi inversion-asymmetry effect. *Phys. Rev. (B)*, 1990, **41**(9) : 5919~ 5930
- [9] M. Libezne, J. Poortmans, M. Caymax *et al.*, Spectroscopic ellipsometry of strained $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ layer. *Thin Solid Films*, 1993, **233**(1) : 158~ 161

Spectroscopic Ellipsometry of Strained Si/Ge Superlattices

Zhang Ruizhi Luo Jinsheng

(Department of Microelectronic Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049)

(Received 28 March 1996; revised 18 July 1996)

Abstract The dielectric functions of the strained Si_M/Ge_N superlattices have been measured by using spectroscopic ellipsometer in the $2.0 \sim 5.0 \text{ eV}$ photon-energy range. The observed results were analyzed by fitting the second derivative spectrum of the dielectric function. The new superlattice-like transitions are observed in addition to the typical E_1 and E_2 transitions.

Key words spectroscopic ellipsometry, dielectric function, superlattice.