

蓝宝石衬底多层 AlGaIn 薄膜透射谱研究

李浩杰^{1,2}, 张燕^{1*}

¹中国科学院上海技术物理研究所红外成像材料与器件重点实验室, 上海 200083;

²中国科学院大学, 北京 100049

摘要 全组分 AlGaIn 是指 Al 组分(原子数分数)在 0~1 之间的 AlGaIn。通过将组分引入到 AlGaIn 的复折射率中,在 200~800 nm 光谱范围内建立了全组分 AlGaIn 复折射率公式。通过椭圆偏振法获得了蓝宝石的光学参数,并利用透射谱进行了验证。利用上述复折射率公式和多层光学薄膜模型研究了蓝宝石衬底多层 AlGaIn 薄膜样品的透射谱,分析了各层薄膜对样品透射谱的影响以及工艺可能造成的实际结构的偏移,提出了一种多层薄膜透射谱的快速分析法。

关键词 薄膜; AlGaIn; 全组分; 光学性质; 多层薄膜模型; 透射谱拟合

中图分类号 O484.4+1

文献标志码 A

doi: 10.3788/AOS202040.1931002

Transmission Spectrum of Multilayer AlGaIn Thin Film on Sapphire Substrate

Li Haojie^{1,2}, Zhang Yan^{1*}

¹Key Laboratory of Infrared Imaging Materials and Detectors, Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China;

²University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

Abstract Full composition range AlGaIn refers to AlGaIn with an Al composition of 0-1. In this paper, the composition is introduced into the complex refractive index of AlGaIn, and a complex refractive index formula for full composition AlGaIn is established in the spectral range of 200-800 nm. The optical parameters of sapphire are obtained by ellipsometry and verified by the transmission spectrum. The complex refractive index formula and the multilayer optical film filter model are used to study the transmission spectra of the multilayer AlGaIn samples on sapphire substrates. The effect of each film on the transmission spectra of samples and the possible shift of an actual structure caused by the process are analyzed, and a fast analysis method is thus proposed for the transmission spectra of multilayer films.

Key words thin films; AlGaIn; full composition; optical properties; multilayer thin film model; transmission spectral fitting

OCIS codes 310.6860; 040.7190; 300.1030

1 引 言

AlGaIn 具有直接跃迁能带、宽范围可调带隙^[1]、高载流子迁移率^[2]和强抗辐射能力^[3],在高效紫外光探测^[4-5]领域、发光领域^[6-8]及高频功率器件^[9]领域得到广泛应用。近年来,随着金属有机化学气相沉积法(MOCVD)和分子束外延(MBE)等高 Al 组分 AlGaIn 外延技术^[10-12]的发展,AlGaIn 的相分离(组分偏移)^[13]效果得到改善,外延质量得到不

断提高,进而促使高效紫外探测技术^[14-15]不断进步。探测器结构也从简单的几层结构发展到复杂的多层结构,超晶格^[16]、量子点^[17]和组分渐变层^[18]等结构的引入使得器件结构进一步复杂化。

然而,AlGaIn 的光学性质研究多局限于单层薄膜结构和有限的组分范围,关于复杂多层结构以及全组分范围内的量化研究鲜有报道。Muth 等^[19]测量了 Al 组分(原子数分数,全文同)在 0~0.38 范围内的 AlGaIn 的吸收系数和折射率。Laws 等^[20]使用二阶多项式来改善 AlGaIn 的光学参数,并在 0~

收稿日期: 2020-05-21; 修回日期: 2020-06-17; 录用日期: 2020-06-23

* E-mail: zhangyan@mail. sitp. ac. cn

0.38 的组分范围内获得了较好的拟合度。Katsuki 等^[21]使用简化的带间跃迁模型分析了 AlGa_xN 的光学性质,并使用线性方程描述 AlGa_xN 的介电函数参数。Kucukgok 等^[22]通过 MOCVD 制备了 Al 组分在 0.2~0.6 的 AlGa_xN,并对其进行了结构和光学分析。Liu 等^[23]使用椭圆偏振法研究了 Al 组分在 0.35~0.75 范围内的 AlGa_xN 的光学性质和温度依赖特性。以上研究虽然局限在有限的组分范围内,但都显示 AlGa_xN 的光学性质对组分有相似的依赖性。对于单层 AlGa_xN 薄膜,可通过 X 射线衍射仪(XRD)和光致发光(PL)光谱获取其组分信息,利用原子力显微镜(AFM)研究其表面形貌和粗糙度,通过椭圆偏振法测量其光学性质和厚度。但对于多层复杂结构的 AlGa_xN 薄膜,光的反射和干涉过程受材料结构和表面粗糙度等多种因素影响,椭圆偏振谱振荡剧烈,且对于不同角度的入射光,不同位置的薄膜测试结果偏差较大,不利于分析实际的薄膜结构。多层 AlGa_xN 薄膜的透射谱包含丰富的材料结构信息,且易于测试,因此可用于多层薄膜结构的快速分析。

高 Al 组分 AlGa_xN 外延技术的发展以及日益复杂的器件结构使得单层薄膜评价技术和有限组分范

围内的光学性质研究方法已经不能满足现有需求。因此,十分有必要对现有的 AlGa_xN 复折射率公式进行修正,拓宽其适用的组分范围和适用的光谱范围,进而对复杂结构多层薄膜进行更准确的理论和仿真分析,并对工艺流程进行更有效快速的评估,为器件结构设计提供更有力的参考。

2 实 验

使用 SC630 紫外-近红外椭圆偏振仪测量了双抛光 c 轴取向纤锌矿结构蓝宝石衬底的复折射率,测试结果如图 1(a)所示,其中入射角为 60°。使用 Cary 50 光谱仪测量了蓝宝石的透射率,结果如图 1(b)所示。其中,编号为 #840、#844、#848 的样品结构相似,制备方法如下:1)在双抛光 c 轴取向蓝宝石衬底上,通过 MOCVD 在低温下外延生长 AlN 缓冲层;2)在 1100 °C 下按照设计结构沉积相应组分的 AlGa_xN,最上层为不同厚度的 Mg 掺杂 p 型 GaN。样品中的渐变层服从线性渐变规律。

三个器件的具体设计结构如表 1~3 所示,其中三种结构的外延衬底都为双抛光的蓝宝石衬底,p 表示 Mg 掺杂,n 表示 Si 掺杂,i 表示本征层(无掺杂)。

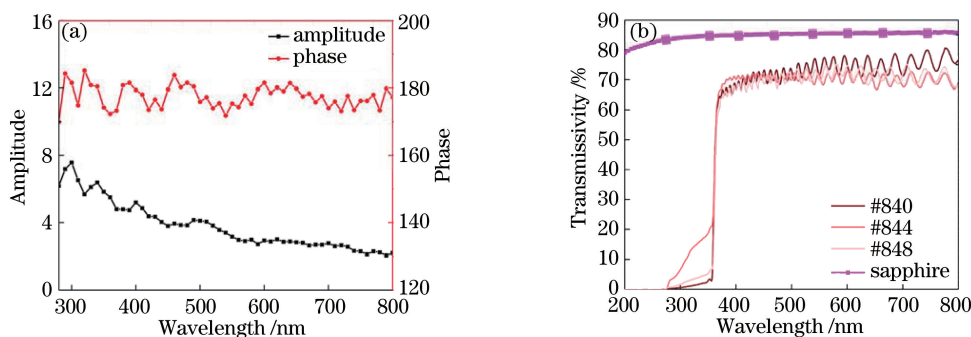


图 1 蓝宝石与 #840、#844、#848 样品的光学测试结果。(a) 60°入射角下蓝宝石的测试结果; (b) #840、#844、#848 样品和蓝宝石的透射谱

Fig. 1 Optical measurement results of #840, #844, #848 samples and sapphire. (a) Measurement results of sapphire under incident angle of 60°; (b) transmission spectra of #840, #844, #848 samples and sapphire

表 1 #840 的设计结构

Table 1 Designed structure of #840

Layer No.	Material	Doping type	Thickness / μm	Al component
1	GaN	p	0.20	0
2	GaN	i	0.20	0
3	Al _x Ga _{1-x} N	i	0.05	[0,0.55]
4	Al _{0.55} Ga _{0.45} N	n	1.00	0.55
5	Al _{0.55} Ga _{0.45} N	i	1.00	0.55

和 #840 样品相比,#844 样品最上层 GaN 的厚度减小到 200 nm,Al 组分为 0.55 的 AlGa_xN 中

间层厚度加大到 2500 nm,可以用于研究不同 Al 组分、不同厚度的 AlGa_xN 薄膜对透射谱的影响。

表 2 # 844 的设计结构
Table 2 Designed structure of # 844

Layer No.	Material	Doping type	Thickness / μm	Al component
1	GaN	p	0.20	0
2	$\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$	p	0.04	0.20
3	$\text{Al}_{0.42}\text{Ga}_{0.58}\text{N}$	i	0.14	0.42
4	$\text{Al}_{0.42}\text{Ga}_{0.58}\text{N}$	n	0.06	0.42
5	$\text{Al}_{0.42}\text{Ga}_{0.58}\text{N}$	i	0.18	0.42
6	$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	n	0.05	[0.42,0.55]
7	$\text{Al}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{N}$	n	2.00	0.55
8	$\text{Al}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{N}$	i	0.50	0.55

表 3 # 848 的设计结构
Table 3 Designed structure of # 848

Layer No.	Material	Doping type	Thickness / μm	Al component
1	GaN	p	0.30	0
2	$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	p	0.05	[0,0.42]
3	$\text{Al}_{0.42}\text{Ga}_{0.58}\text{N}$	i	0.14	0.42
4	$\text{Al}_{0.42}\text{Ga}_{0.58}\text{N}$	n	0.06	0.42
5	$\text{Al}_{0.42}\text{Ga}_{0.58}\text{N}$	i	0.18	0.42
6	$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	n	0.05	[0.42,0.55]
7	$\text{Al}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{N}$	n	2.50	0.55
8	$\text{Al}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{N}$	i	1.00	0.55

848 样品进一步加大中间的 AlGa_xN 层厚度,并引入两个渐变层,可以用于研究渐变层对透射谱的影响。

为了研究 AlGa_xN 的外延质量,通过 XRD 测量了 AlGa_xN 层 (002)、(102) 晶向的半峰全宽 (FWHM),测试结果如表 4 所示。

表 4 # 840、# 844、# 848 的半峰全宽
Table 4 FWHMs of # 840、# 844 and # 848

Sample No.	FWHM /($''$)	
	(002)	(102)
# 840	397	902
# 844	434	597
# 848	462	649

3 结果分析

3.1 蓝宝石的复折射率

研究的光谱范围为 200~800 nm,相应的光子能量为 1.55~6.2 eV。该范围内蓝宝石的折射率变化较小,可利用单振荡器近似 Sellmeier 方程^[24]来进行蓝宝石折射率的量化研究,其形式为

$$n(\lambda) = \left[A_1 + \frac{A_2 A_3^2}{A_3^2 - E(\lambda)^2} \right]^{1/2}, \quad (1)$$

式中: n 为折射率; λ 为入射光波长; A_1, A_2, A_3 为

Sellmeier 方程参数; E 为光子能量。该范围的光子能量低于蓝宝石带隙,蓝宝石对该范围内的光吸收很小,因此用 Urbach 公式^[25]拟合蓝宝石的吸收系数,具体形式为

$$\alpha(\lambda) = B_1 \exp \left[\frac{E(\lambda) - B_2}{B_3} \right], \quad (2)$$

式中: α 为吸收系数; B_1, B_2, B_3 为 Urbach 公式中与材料相关的参数。

用(1)、(2)式拟合椭圆偏振仪测得的蓝宝石的折射率 n 和消光系数 k ,获取拟合参数,拟合情况如图 2(a)所示。

通过拟合蓝宝石的折射率和消光系数,获得了蓝宝石的光学模型参数,其中 $A_1, A_2, A_3, B_1, B_2, B_3$ 分别为 1, 2.06, 10.97, 1, 3.814, 0.958。

蓝宝石的折射率和吸收系数在 280~350 nm 波长范围内有微弱的振荡,这是反射光在蓝宝石表面的干涉造成的,但该光谱范围内的 AlGa_xN 吸收系数很大,因此该干涉对透射谱的影响很小。利用椭圆偏振法获取的蓝宝石复折射率模型和透射率公式,对蓝宝石的透射谱进行了拟合验证,结果如图 2(b)所示。容易看出,虽然蓝宝石衬底的厚度远远大于外延薄膜,但它的吸收系数很小,只对日盲波段的透射有微弱影响。

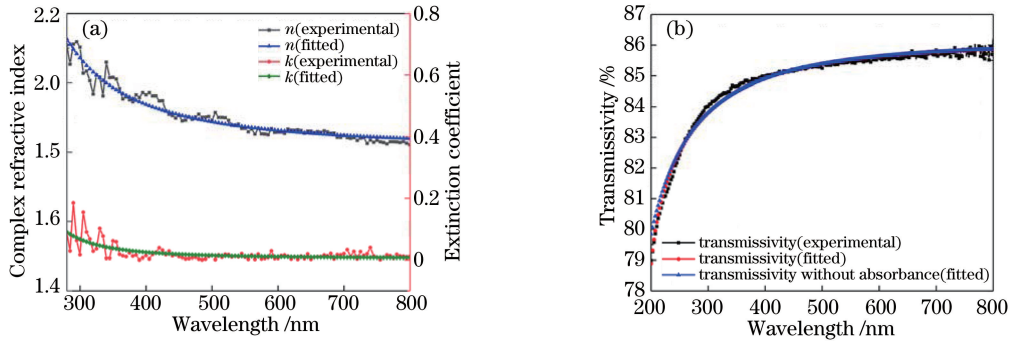


图 2 蓝宝石的光学参数拟合结果。(a)蓝宝石的复折射率和消光系数;(b)不同条件下的蓝宝石透射谱

Fig. 2 Optical parameter fitting results of sapphire. (a) Complex refractive index and extinction coefficient of sapphire; (b) transmission spectra under different conditions

3.2 Al 组分对 AlGa_N 复折射率的影响

不同 Al 组分 AlGa_N 的光学性质研究^[19-21]显示,AlGa_N 的复折射率和组分存在相似的依赖关系。大量研究表明^[26-27],III-V 族三元合金半导体材料的晶格常数与组分的关系遵循 Vegard 定理,三元合金半导体材料(如 AlGa_N)的晶格常数在对应

的两种二元材料(如 AlN, GaN)的晶格常数之间呈线性变化,而其禁带宽度与组分的关系可以用二阶多项式描述。晶格常数对三元合金光学性质的影响也是非线性的,因此用二阶多项式来描述组分与 Sellmeier 方程中参数之间的关系,即

$$\begin{bmatrix} A_1(x) \\ A_2(x) \\ A_3(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.3509 & 4.0288 & -1.1303 \\ 242.4883 & -286.5919 & 127.6904 \\ 46 & -9.3939 & 24.0739 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \end{bmatrix}, \quad (3)$$

式中: x 为 Al 组分。

将折射率模型与 Muth 等^[19]的测量结果进行对比,并在全组分范围内进行简单验证,结果如图 3 所示。可以看出,折射率模型的结果与文献[19]中的结果吻合较好,且在全组分范围内呈规律变化。文

献[19]的测量结果没有考虑材料对带隙以上光子的折射。Liu 等^[23]利用椭圆偏振法研究发现,AlGa_N 在带隙上的折射率曲线与在带隙下的折射率曲线并不相同,前者有微弱的凹陷,但 AlGa_N 对该范围的光吸收较大,透射谱的折射损失远低于吸收损失。

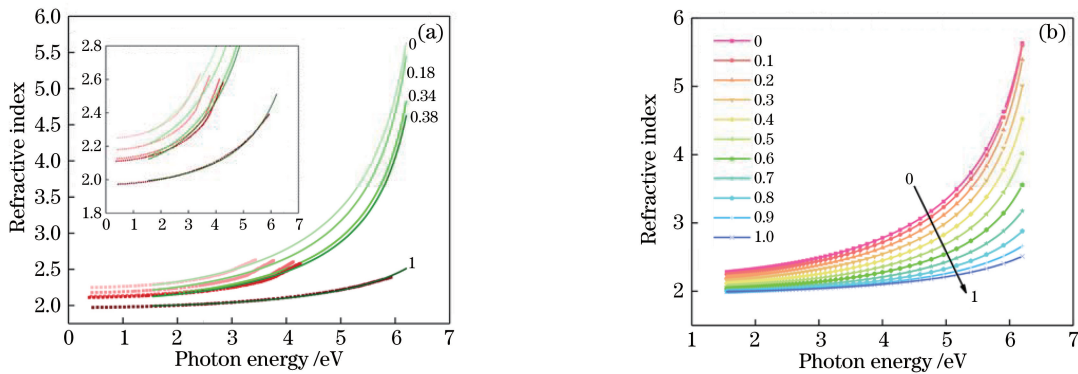


图 3 全组分 AlGa_N 的折射率随光子能量的变化。(a)所提折射率模型(线)与文献[19]的结果(点)对比;(b)全组分范围内的简单验证

Fig. 3 Refractive index of full composition AlGa_N. (a) Result comparison of proposed refractive index model (line) and that in Ref. [19] (dot); (b) simple verification in full composition range

AlGa_N 是直接带隙材料,对于能量大于带隙的光子,其吸收系数的平方与光子能量呈线性相关,因此描述其吸收系数^[28-29]的公式为

$$\alpha(\lambda) = \alpha_0 \left[\frac{E(\lambda) - E_g}{E_g} \right]^{1/2}, E(\lambda) > E_g, \quad (4)$$

式中: α 为吸收系数; α_0 为与材料的吸收特性相关的

参数; E_g 为 AlGa N 的带隙。

对于能量小于带隙的光子, AlGa N 的吸收呈指数下降^[30], 用 Urbach 带尾模型描述, 即

$$\alpha(\lambda) = \alpha_g \exp\left[\frac{E(\lambda) - E_g}{E_{\text{Urbach}}}\right], E(\lambda) \leq E_g, \quad (5)$$

式中: α_g 为与材料 Urbach 带尾效应相关的参数; E_{Urbach} 为材料的 Urbach 能量。 E_g 随组分变化的关系^[31]为

$$E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = E_g(\text{AlN})x + E_g(\text{GaN})(1-x) - bx(1-x), \quad (6)$$

式中: b 为能带弯曲参数。当温度为 0 时, $E_g(\text{AlN})$, $E_g(\text{GaN})$, b 分别为 6.25 eV, 3.51 eV, 0.7^[32]。

拟合结果显示, 吸收系数在带隙处有跳变, 如图 4 所示。

这是因为(4)式未考虑 AlGa N 的带尾吸收。Muth 等^[19] 以及 Liu 等^[23] 获得的不同 Al 组分 AlGa N 的吸收系数在带隙处都具有连续性, 因此利

用吸收系数的连续性和 Urbach 带尾模型, 对(4)式进行修正, 修正后的形式为

$$\alpha(x) = \alpha_0 \left[\frac{E(\lambda) - E_g}{E_g} + \left(\frac{\alpha_g}{\alpha_0}\right)^2 \right]^{1/2}. \quad (7)$$

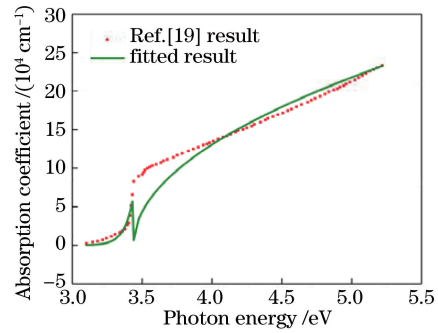


图 4 AlGa N 吸收系数随光子能量的变化
Fig. 4 Absorption coefficient of AlGa N versus photon energy

用(7)式拟合吸收系数, 参照带隙宽度随组分的变化, 用一元二次方程拟合参数和组分关系, 拟合结果为

$$\begin{bmatrix} \alpha_0(x) \\ \alpha_g(x) \\ E_{\text{Urbach}}(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 16.7815 & 23.4908 & -20.4411 \\ 8.4408 & -6.6203 & 9.4444 \\ 0.046 & 0.0092 & 0.0876 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \end{bmatrix}. \quad (8)$$

将修正后的吸收系数模型与 Muth 等^[19] 的测量结果进行对比, 并在全组分范围内进行简单验证, 如图 5 所示。Takeuchi 等^[21] 的理论计算结果和 Liu 等^[23] 使用椭圆偏振法测量获得的吸收系数均具有相似的特性。

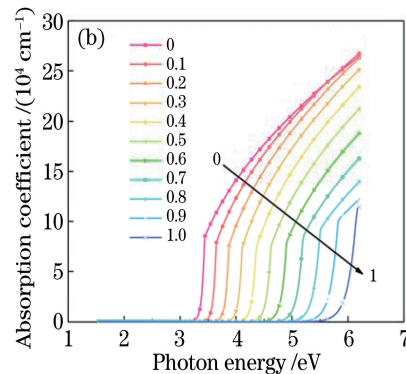
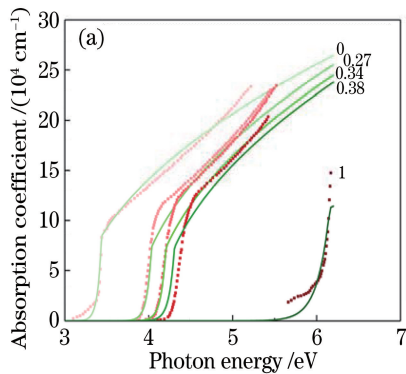


图 5 全组分 AlGa N 的吸收系数随光子能量的变化。(a)修正后的吸收系数模型(线)与文献[19]的结果(点)对比;
(b)全组分范围内的简单验证

Fig. 5 Absorption coefficient of full composition AlGa N versus photon energy. (a) Result comparison of corrected absorption coefficient model (line) and that in Ref. [19] (dot); (b) simple verification in full composition range

3.3 Al 组分、薄膜厚度和组分渐变层对 AlGa N 单层薄膜透射谱的影响

为了研究多层薄膜结构, 首先研究 Al 组分 x

将全组分 AlGa N 的复折射率模型参数化, 以便于对各种复杂结构的 AlGa N 样品进行仿真验证, 进而对不同器件工艺进行对比, 快速定位影响器件性能的主要因素, 为器件结构优化和性能提升提供参考。

和薄膜厚度 d 对单层薄膜透射谱的影响。

图 6(a) 是不同厚度的单层 Ga N 薄膜的透射谱。根据不同的透射特性, 可以将透射谱分为吸

收区、吸收边和干涉区三个区域。吸收区的光子能量大于材料带隙,随材料厚度的增加,透射率减小。吸收边对应的能量在带隙附近,这是确定材料带隙的重要依据。干涉区的光子能量小于材料带隙,反射损失大于吸收损失,当材料厚度增大到

一定值后,开始出现干涉效应,干涉峰的位置和疏密程度与厚度紧密相关。图 6(b)是不同 Al 组分 AlGa_N 的透射谱,可以看出,Al 组分影响吸收边的位置,同时对吸收区的透射和干涉区的振荡有一定影响。

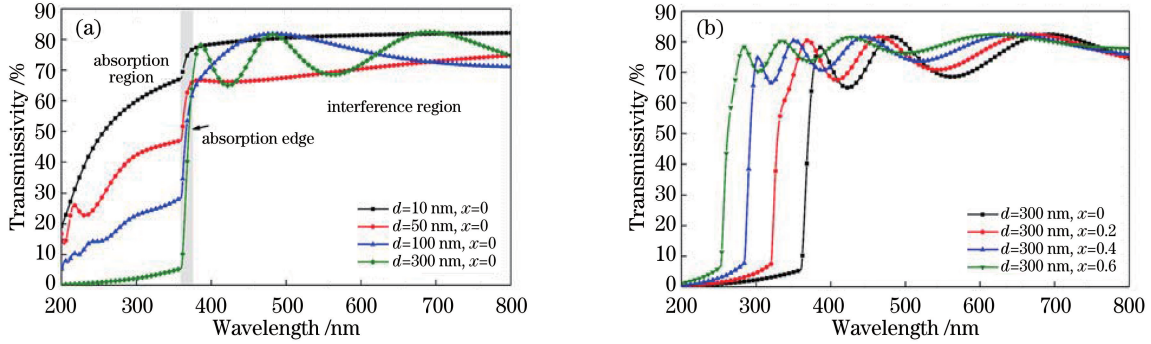


图 6 不同 AlGa_N 的透射谱。(a)不同厚度;(b)不同 Al 组分

Fig. 6 Transmission spectra of different AlGa_N. (a) Different thicknesses; (b) different compositions

为了研究组分渐变层对透射谱的影响,研究了 A、B、C 三种结构的透射谱,其具体结构如表 5~7 所示,三种结构的总体厚度相同。这三种结构的透射谱如图 7 所示。

表 5 结构 A 的参数

Table 5 Parameters of structure A

Layer No.	Material	Thickness / μm	Atomic fraction of Al
1	AlGa _N	0.6	0.6

表 6 结构 B 的参数

Table 6 Parameters of structure B

Layer No.	Material	Thickness / μm	Atomic fraction of Al
1	AlGa _N	0.03	0.3
2	AlGa _N	0.57	0.6

表 7 结构 C 的参数

Table 7 Parameters of structure C

Layer No.	Material	Thickness / μm	Atomic fraction of Al
1	AlGa _N	0.01	0.1
2	AlGa _N	0.01	0.3
3	AlGa _N	0.01	0.5
4	AlGa _N	0.57	0.6

对比结构 A、B、C 的透射谱可以看出,总体厚度决定了干涉区波峰的位置和疏密程度,组分渐变层增加了干涉区的吸收率,降低了透射率。这是因为渐变层的 Al 组分小于底部薄膜的 Al 组分,相应带隙较小,可以吸收底部薄膜不能吸收的光子,从而造成了干涉区透射率的降低。

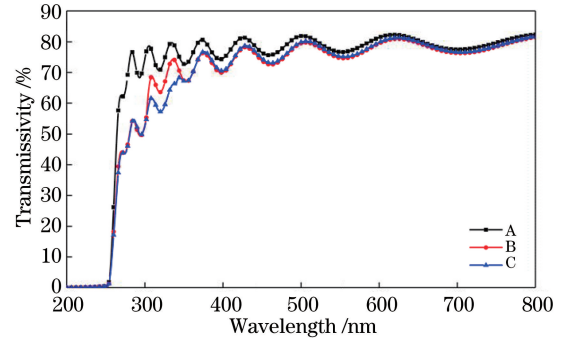


图 7 结构 A、B、C 的透射谱

Fig. 7 Transmission spectra of structures A, B and C

通过研究薄膜厚度、Al 组分和组分渐变层对透射谱的影响,提出用渐进式逼近法来拟合多层薄膜的透射谱。首先利用简单粗糙的薄膜结构,基于实际透射谱吸收区的吸收程度、吸收边的位置及干涉区波峰的位置和疏密程度,获得主要结构的厚度和组分分布,在此基础上不断细化拟合结构,逼近实际透射谱。

3.4 #840 的拟合结构

使用透射率的均方根误差(RMSE)评价拟合的准确度:

$$S_{\text{RMSE}} = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (f_i - e_i)^2}, \quad (9)$$

式中: S_{RMSE} 为均方根误差; m 为样本数; f_i 为第 i 个样本的拟合值; e_i 为第 i 个样本的实际测量值。

#840 的四个拟合结构 840-1、840-2、840-3 和 840-4 的具体结构如表 8~9 所示,其中 840-4 的结构与 840-3 相同,但是引入了修正公式,获得了更高

表 8 拟合结构 840-1 的参数

Table 8 Parameters of fitting structure 840-1

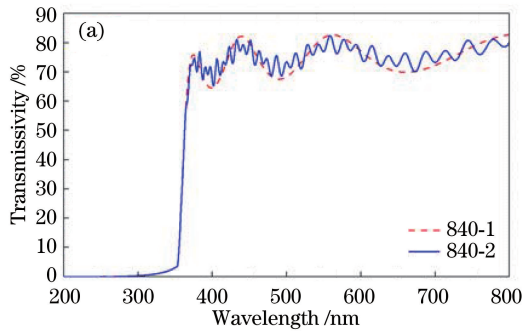
Layer No.	Material	Thickness / μm	Atomic fraction of Al
1	GaN	0.36	0.035

表 9 拟合结构 840-2 的参数

Table 9 Parameters of fitting structure 840-2

Layer No.	Material	Thickness / μm	Atomic fraction of Al
1	GaN	0.36	0.035
2	AlGaIn	2.12	0.550
3	AlN	1.68	1.000

的拟合度。这四个拟合结构和 #840 设计样品的透



射谱如图 8 所示。840-1、840-2、840-3 和 840-4 的 S_{RMSE} 分别为 4.5174, 3.1535, 2.8349, 1.6376。

表 10 拟合结构 840-3 和 840-4 的参数

Table 10 Parameters of fitting structures 840-3 and 840-4

Layer No.	Material	Thickness / μm	Atomic fraction of Al
1	GaN	0.36	0.035
2	AlGaIn	0.02	0.330
3	AlGaIn	0.04	0.400
4	AlGaIn	2.00	0.550
5	AlGaIn	0.04	0.650
6	AlGaIn	0.02	0.790
7	AlN	1.68	1.000

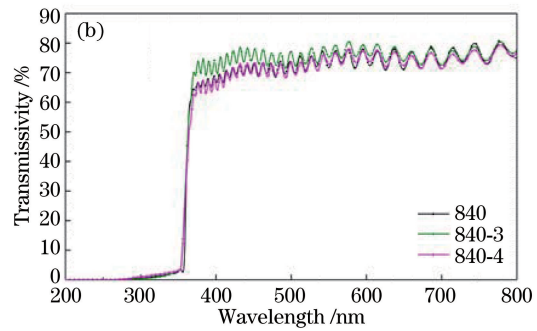


图 8 #840 的透射谱

Fig. 8 Transmission spectra of #840

可以看出:

- 1) Al 组分为 0 的最上层薄膜影响透射谱的吸收边沿位置以及整体的透射情况。
- 2) Al 组分为 0.55, 厚度为 2000 nm 的中间层薄膜以及薄膜整体厚度影响透射谱干涉峰的数量。
- 3) 组分渐变层影响透射谱干涉峰的振荡细节。
- 4) 通过不断增加过渡层, 可以不断逼近实际的透射谱。

从图 8(b)中可以看出, 拟合结构 840-3 在干涉区的透射率略大于实际透射率。这是因为 p-GaN 的高质量外延较为困难, 当外延厚度较大时, 薄膜的缺陷和位错较多, 带隙中出现杂质能级, 降低了光子吸收的能量门槛, 使薄膜能吸收较多的能量小于带隙的光子。研究发现, 这些杂质能级对光子的吸收率与光子能量的幂指数有关。修正后的吸收系数为

$$\alpha(\lambda) = (\alpha_g - E_{\text{Urbach}}) \exp\left[\frac{E(\lambda) - E_g}{E_{\text{Urbach}}}\right] + E_{\text{Urbach}} \left[\frac{E(\lambda)}{E_g}\right]^p, E(\lambda) \leq E_g, \quad (10)$$

式中: p 为修正因子, 与材料的缺陷数量级有关。本文 p 取 3, 可以获得更好的拟合度 ($S_{\text{RMSE}} =$

1.6376), 拟合情况如图 8(b)中的 840-4 所示。

从表 4 可以看出, 虽然 #840 在(002)晶向上的 FWHM 最小, 但在(102)晶向上的 FWHM 远大于 #844 和 #848, 说明 #840 的位错较多, 晶格扭曲较大, 这可能是材料对带隙下光子的吸收增强的原因之一。

拟合结果显示, p-GaN 的光学性质与低组分 AlGaIn 相似, 这是 Mg 掺杂造成的。Tsai 等^[26]的研究表明, GaN 与轻原子 Al 组成三元合金 AlGaIn 时, 随着 Al 组分的增加, AlGaIn 的晶格常数减小, 带隙增大; GaN 与重原子 In 组成三元合金 InGaIn 时, 随着 In 组分的增加, InGaIn 的晶格常数增大, 带隙减小。Mg 的原子质量与 Al 相近, 因此, GaN 掺入 Mg 后, 晶格常数减小, 带隙增大, 光学性质向低组分 AlGaIn 靠近。

3.5 #844 和 #848 的拟合结构

与 #840 相比, #844 的 p-GaN 层厚度较小, 对 280~350 nm 范围的光吸收不够充分, 干涉区较平缓, 没有明显的上升趋势。#844 的最终拟合结构 844-1 如表 11 所示。透射谱的拟合情况如图 9 所示, 最终拟合的 S_{RMSE} 为 1.683。

表 11 拟合结构 844-1 的参数

Table 11 Parameters of fitting structure 844-1

Layer No.	Material	Thickness / μm	Atomic fraction of Al
1	GaN	0.15	0.021
2	AlGaN	0.04	0.230
3	AlGaN	0.37	0.420
4	AlGaN	0.05	0.490
5	AlGaN	2.48	0.550
6	AlGaN	0.05	0.650
7	AlGaN	0.05	0.780
8	AlN	1.14	1.000

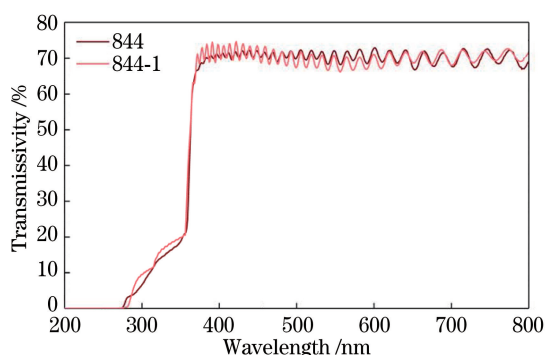


图 9 #844 的透射谱

Fig. 9 Transmission spectra of #844

可以看出:

- 1) Al 组分为 0 的最上层 p-GaN 的厚度小于设计厚度。
- 2) 整体 Al 组分与薄膜厚度情况与设计结构较为接近, 薄膜厚度偏移 50 nm 左右, Al 组分偏移 2% 左右。

#844 样品的透射率在 GaN 带隙以下的干涉区没有明显的减小, 这是因为 #844 的 p-GaN 层厚度小于 #840, 缺陷和位错较少, 因此 #844 对该区域的光吸收较少。XRD 的测试结果也显示, #844 在两个晶向上的 FWHM 都很小, 外延质量较好。#844 透射谱干涉区的振荡程度较实际透射谱有所偏移, 这是第 8 层较薄造成的。

#848 样品最上层 p-GaN 的厚度在 #840 最上层 p-GaN 的厚度和 #844 最上层 p-GaN 的厚度之间, 280~350 nm 范围内的透射率也介于两者之间, 接近带隙的干涉区的透射率有微弱减小。#848 的最终拟合结构 848-1 如表 12 所示。透射谱的拟合情况如图 10 所示, 最终拟合的 S_{RMSE} 为 1.527。

可以看出:

- 1) Al 组分为 0 的最上层薄膜的厚度接近设计厚度。

表 12 拟合结构 848-1 的参数

Table 12 Parameters of fitting structure 848-1

Layer No.	Material	Thickness / μm	Atomic fraction of Al
1	GaN	0.27	0.02
2	AlGaN	0.05	0.17
3	AlGaN	0.05	0.28
4	ZlGaN	0.39	0.47
5	AlGaN	0.02	0.53
6	AlGaN	2.37	0.60
7	AlGaN	0.05	0.66
8	AlGaN	0.05	0.78
9	AlN	0.50	1.00

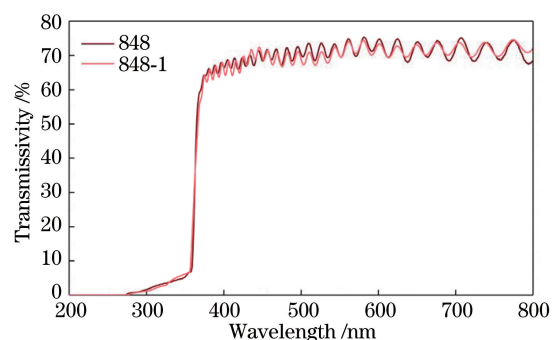


图 10 #848 的透射谱

Fig. 10 Transmission spectra of #848

- 2) Al 组分为 0.55, 厚度为 3500 nm 的中间层厚度和组分较设计结构都有较大偏移。Al 组分偏移 5%, 薄膜厚度偏移 1 μm 左右。
- 3) #848 拟合结构的 Al 组分相对设计组分, 整体偏大。

#848 样品接近吸收边的干涉区的透射率有微弱减小, 这是因为其 p-GaN 层厚度适中, 缺陷位错较少, 对带隙下光子有微弱吸收。#848 在两个晶向上的 FWHM 都略大于 #844, 外延质量介于 #840 和 #844 之间。结构 848-1 的吸收系数同样使用(10)式进行修正, 其中 p 取 5。

综上所述, #840 样品的实际结构与设计结构较为接近, 但 p-GaN 层厚度较大, 外延质量较差, 导致干涉区的透射率有所减小。#844 样品的最上层 p-GaN 拟合厚度略低于设计厚度, 造成了样品对 280~350 nm 波段光的不充分吸收。#848 样品的 Al 组分、整体厚度与设计组分、厚度有较大的偏差, 这可能是由于 #848 样品的 Al 组分为 0.55, 中间层厚度过大, 且有两个渐变层, 工艺不易于控制。对比三个样品的透射谱可以发现, 随着 p-GaN 厚度的增加, 薄膜缺陷和位错增加, 薄膜对带隙下光子的吸收增强, 器件对紫外可见光的抑制能力变差。Mg 掺

杂会使 GaN 的晶格常数变小,带隙变大,光学性质向低组分 AlGa_N 靠近。对比样品 # 840, # 844, # 848 的 XRD 测试结果和透射谱,发现 AlGa_N 的 (102)晶向的 FWHM 可以表征 AlGa_N 的外延质量以及材料对带隙下光子的吸收情况。该晶向的 FWHM 越小,薄膜质量越好,材料对带隙下光子的吸收越弱,透射谱的干涉区越平缓。

4 结 论

蓝宝石是 AlGa_N 器件重要的衬底之一。通过椭圆偏振法获取了蓝宝石的复折射率参数,并用透射谱进行了验证。通过将原有的 AlGa_N 复折射率公式扩展到全组分,并利用多层薄膜模型,对蓝宝石衬底多层 AlGa_N 薄膜的透射谱进行了渐进式拟合。结合 XRD 测试结果,分析了拟合结构与设计结构的组分偏移和厚度偏移以及可能的工艺原因,提出了一种多层薄膜透射谱的快速分析法,为 AlGa_N 器件工艺的改进、结构的优化及性能的提升提供了理论参考。

参 考 文 献

- [1] Wickenden D K, Barger C B, Bryden W A, et al. High quality self-nucleated Al_xGa_{1-x}N layers on (00.1) sapphire by low-pressure metalorganic chemical vapor deposition [J]. Applied Physics Letters, 1994, 65(16): 2024-2026.
- [2] Alaie Z, Mohammad Nejad S, Yousefi M H. Recent advances in ultraviolet photodetectors[J]. Materials Science in Semiconductor Processing, 2015, 29: 16-55.
- [3] Shur M. Wide band gap semiconductor technology: state-of-the-art [J]. Solid-State Electronics, 2019, 155: 65-75.
- [4] Zhao Y M and Donaldson W R. Ultrafast UV AlGa_N metal-semiconductor-metal photodetector with a response time below 25 ps [J]. IEEE Journal of Quantum Electronics, 2020, 56(3): 1-7.
- [5] Cai Q, Dong K X, Xie Z L, et al. Enhanced front-illuminated p-i-p-i-n GaN/AlGa_N ultraviolet avalanche photodiodes [J]. Materials Science in Semiconductor Processing, 2019, 96: 24-29.
- [6] Susilo N, Hagedorn S, Jaeger D, et al. AlGa_N-based deep UV LEDs grown on sputtered and high temperature annealed AlN/sapphire [J]. Applied Physics Letters, 2018, 112(4): 041110.
- [7] Cai X F, Li S P, Kang J Y. Improved characteristics of ultraviolet AlGa_N multiple-quantum-well laser diodes with step-graded quantum barriers close to waveguide layers [J]. Superlattices and Microstructures, 2016, 97: 1-7.
- [8] Sun J N, Sun W J, Zhao L P, et al. Study of the factors influencing the properties of AlGa_N/Ga_N quantum cascade lasers [J]. Acta Optica Sinica, 2012, 32(2): 0214002.
孙京南, 孙文军, 赵立萍, 等. 影响 AlGa_N/Ga_N 量子级联激光器性能的因素研究[J]. 光学学报, 2012, 32(2): 0214002.
- [9] Fletcher A S A, Nirmal D. A survey of Gallium Nitride HEMT for RF and high power applications [J]. Superlattices and Microstructures, 2017, 109: 519-537.
- [10] Li D B, Jiang K, Sun X J, et al. AlGa_N photonics: recent advances in materials and ultraviolet devices [J]. Advances in Optics and Photonics, 2018, 10(1): 43-110.
- [11] He L, Yang D J, Ni G Q. AlGa_N epitaxial technology [M] // He L, Yang D J, Ni G Q. Technology for advanced focal plane arrays of HgCdTe and AlGa_N. Heidelberg: Springer, 2016: 265-350.
- [12] Laleyan D A, Liu X H, Pandey A, et al. Molecular beam epitaxy and characterization of Al_{0.6}Ga_{0.4}N epilayers[J]. Journal of Crystal Growth, 2019, 507: 87-92.
- [13] Zhao Y M, Donaldson W R. Systematic study on aluminum composition nonuniformity in aluminum gallium nitride metal-semiconductor-metal photodetectors [J]. IEEE Transactions on Electron Devices, 2018, 65(10): 4441-4447.
- [14] van Schalkwyk L, Meyer W E, Nel J M, et al. Implementation of an AlGa_N-based solar-blind UV four-quadrant detector [J]. Physica B: Condensed Matter, 2014, 439: 93-96.
- [15] Yang L C, Fu K, Shi X S, et al. Technology and performance of metal-semiconductor-metal AlGa_N/Ga_N heterostructure ultraviolet photodetector [J]. Acta Optica Sinica, 2014, 34(s1): s104001.
杨乐臣, 付凯, 史学舜, 等. 金属-半导体-金属结构 AlGa_N/Ga_N 异质结紫外探测器技术及特性[J]. 光学学报, 2014, 34(s1): s104001.
- [16] Mondal R K, Chatterjee V, Pal S. Effect of step-graded superlattice electron blocking layer on performance of AlGa_N based deep-UV light emitting diodes[J]. Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 2019, 108: 233-237.
- [17] Brault J, Matta S, Ngo T, et al. Internal quantum efficiencies of AlGa_N quantum dots grown by molecular beam epitaxy and emitting in the UVA to UVC ranges[J]. Journal of Applied Physics, 2019,

- 126(20): 205701.
- [18] Kalra A, Rathkanthiwar S, Muralidharan R, et al. Polarization-graded AlGa_N solar-blind p-i-n detector with 92% zero-bias external quantum efficiency[J]. IEEE Photonics Technology Letters, 2019, 31(15): 1237-1240.
- [19] Muth J F, Brown J D, Johnson M A L, et al. Absorption coefficient and refractive index of GaN, AlN and AlGa_N alloys[J]. Mrs Internet Journal of Nitride Semiconductor Research, 1999, 4: 502-507.
- [20] Laws G M, Larkins E C, Harrison I, et al. Improved refractive index formulas for the Al_xGa_{1-x}N and In_yGa_{1-y}N alloys[J]. Journal of Applied Physics, 2001, 89(2): 1108-1115.
- [21] Takeuchi K, Adachi S, Ohtsuka K. Optical properties of Al_xGa_{1-x}N alloy[J]. Journal of Applied Physics, 2010, 107(2): 023306.
- [22] Kucukgok B, Lu N, Ferguson I T, et al. Structural and optical analyses of Al_xGa_{1-x}N thin films grown by metal organic chemical vapor deposition[J]. Japanese Journal of Applied Physics, 2015, 54(2S): 02BA05.
- [23] Liu Y, Li Q X, Wan L Y, et al. Composition and temperature dependent optical properties of Al_xGa_{1-x}N alloy by spectroscopic ellipsometry [J]. Applied Surface Science, 2017, 421: 389-396.
- [24] Yu G L, Ishikawa H, Egawa T, et al. Polarized reflectance spectroscopy and spectroscopic ellipsometry determination of the optical anisotropy of gallium nitride on sapphire[J]. Japanese Journal of Applied Physics, 1997, 36(2): L1029-L1031.
- [25] Urbach F. The long-wavelength edge of photographic sensitivity and of the electronic absorption of solids [J]. Physical Review, 1953, 92(5): 1324.
- [26] Tsai Y, Bayram C. Structural and electronic properties of hexagonal and cubic phase AlGaInN alloys investigated using first principles calculations [J]. Scientific Reports, 2019, 9(1): 6583.
- [27] Adachi S. III-V ternary and quaternary compounds [M]//KASAP S and CAPPER P. Springer handbook of electronic and photonic materials. Cham: Springer International Publishing, 2017: 1.
- [28] Zhao J G, Zhang X, Chen S, et al. Study of dual nitridation processes in growth of non-polar a-plane AlGa_N epi-layers[J]. Materials Letters, 2018, 227: 108-111.
- [29] Motamedi P, Cadien K. Structural and optical characterization of low-temperature ALD crystalline AlN [J]. Journal of Crystal Growth, 2015, 421: 45-52.
- [30] Jacobson M A, Konstantinov O V, Nelson D K, et al. Absorption spectra of GaN: film characterization by Urbach spectral tail and the effect of electric field [J]. Journal of Crystal Growth, 2001, 230(3/4): 459-461.
- [31] Xue S W, Xu J T, Li X Y. Simulation for spectral response of solar-blind AlGa_N based p-i-n photodiodes[J]. Proceedings of SPIE, 2015, 9522: 95221N.
- [32] Vurgaftman I and Meyer J R. Band parameters for nitrogen-containing semiconductors [J]. Journal of Applied Physics, 2003, 94(6): 3675-3696.