

纤锌矿 GaN 薄膜光学性质的研究*

李雪, 魏彦峰, 龚海梅, 方家熊

(中国科学院上海技术物理所 传感技术国家重点实验室, 上海 200083)

摘 要:在测试大量纤锌矿 GaN 外延薄膜透射光谱基础上,通过对有代表性的四个样品的透射光谱进行拟合,获取了 GaN 外延薄膜的光学常量并计算了薄膜厚度. 结果表明:GaN 外延薄膜的折射率差异较小,但在 370~800 nm 波长范围内消光系数差异很大,GaN 薄膜的消光系数差异在一定程度上可用以评价外延薄膜的质量.

关键词:GaN;透射光谱;折射率;消光系数

中图分类号:TN304.2

文献标识码:A

文章编号:1004-4213(2007)02-0304-4

0 引言

随着 III-V 族氮化物外延薄膜沉积技术和结构质量的发展,外延薄膜性能表征显得相当重要. III-V 族氮化物常用的结构是纤锌矿结构,因此研究纤锌矿 GaN 的光学性质有利于光电器件的制造. 有很多方法用于研究 GaN 薄膜的光学性质^[1-2],透射光谱测量是一种常用的方法,通过透射光谱数据计算薄膜的厚度和光学常量的方法曾用在外延 HgCdTe 薄膜上^[3]. 近来也有报道基于透射光谱的 GaN 薄膜厚度测量^[4],然而,由于异质外延得到的 GaN 晶体薄膜并不是完美的晶体,晶体质量的不同会影响折射率,折射率数值的准确性又影响薄膜厚度的准确性,采用通常的折射率数值去计算薄膜厚度会造成一定偏差.

本文测试大量蓝宝石上异质外延的纤锌矿 GaN 薄膜的透射光谱,通过导纳矩阵的方法对有代表性的四种样品的透射光谱进行拟合,获取每个 GaN 外延薄膜的折射率、消光系数,并计算了薄膜厚度.

1 实验过程

利用透射光谱测试了大量样品,在此选出具有代表性的四个样品均是采用金属有机化学汽相沉积(MOCVD)在双抛蓝宝石(α -Al₂O₃)衬底外延的纤锌矿 GaN 薄膜. 样品 1#,2# 为非故意掺杂的 GaN 薄膜,样品 3# 为掺 Si 的 n-GaN,样品 4# 为掺 Mg 的 p-GaN,利用紫外/可见分光光度计测试室温透射光谱. 紫外/可见分光光度计的光源是氘灯/钨灯,利用光栅分光后经透镜聚焦垂直入射到样品

上,光斑直径约为 0.5 mm,透射光由探测器收集,测量的波长范围从 300~1 000 nm,波长分辨率为 0.5 nm,除 370 nm 波长处光源换灯外,其他波段均为连续的光谱测量.

2 导纳矩阵对透射光谱分析的理论拟合

2.1 导纳矩阵理论

根据多层膜的干涉理论,可以采用导纳矩阵方法对测试的透射光谱结果进行数值分析. 导纳矩阵计算过程如下^[5-6]:

假设薄膜的总层数为 m ,入射介质的折射率为 n_0 ,出射介质的折射率为 n_s ,各层薄膜的复折射率为 $N_k(k=1,2,\dots,m)$,各层薄膜的厚度为 d_k ,光通过膜的出射角为 θ_s ,光通过各层薄膜时的折射角与折射率满足关系为

$$n_0 \sin \theta_0 = N_1 \sin \theta_1 = N_2 \sin \theta_2 = \dots = N_m \sin \theta_m = n_s \sin \theta_s \quad (1)$$

对于正入射的情况,入射角、出射角、折射角都取 0.

因此,各层薄膜的相位厚度为

$$\delta_k = (2\pi/\lambda) N_k d_k \cos \theta_k \quad (2)$$

各层薄膜的光学导纳 η

$$\eta_0^p = n_0 / \cos \theta_0, \eta_k^p = N_k / \cos \theta_k, \eta_s^p = n_s / \cos \theta_s \text{ (P 分量)}$$
$$\eta_0^s = n_0 \cos \theta_0, \eta_k^s = N_k \cos \theta_k, \eta_s^s = n_s \cos \theta_s \text{ (S 分量)} \quad (3)$$

计算导纳矩阵,先计算 P 分量

$$\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = \left\{ \prod_{k=1}^m \begin{bmatrix} \cos \theta_k & i \sin \theta_k / \eta_k^p \\ i \eta_k^p \sin \theta_k \cos \theta_k & \cos \theta_k \end{bmatrix} \right\} \begin{pmatrix} 1 \\ \eta_s^p \end{pmatrix} \quad (4)$$

P 分量的反射率和透射率为

$$R_p = |(\eta_0^p B - C) / (\eta_0^p B + C)|^2 \quad (5)$$

$$T_p = 4\eta_0^p \eta_s^p / |(\eta_0^p B + C)|^2$$

依照式(1)、(2)、(3)、(4)计算出 S 分量的反射率和透射率 R_s 、 T_s ,对于非偏振光入射的情况,总的

*上海市科学技术委员会课题(046105016)资助
Tel:021-65420850 Email:lixue@mail.sitp.ac.cn
收稿日期:2005-10-19

能量反射率 R 和透射率 T 为

$$R = (R_p + R_s) / 2, T = (T_p + T_s) / 2 \quad (6)$$

一束光照到所测试的 GaN 样品等于照到双层或三层介质(若考虑缓冲层时),其光在介质中传播如图 1,在每个界面被反射和透射. 为了对透射光谱的实验结果进行更好的拟合,必须考虑衬底的影响,由于衬底的厚度大于光源的相干长度,因此光在衬底中的传播是非相干的,只需考虑光波之间的强度叠加^[7]. 根据图 1 中的标记的符号,光经过外延

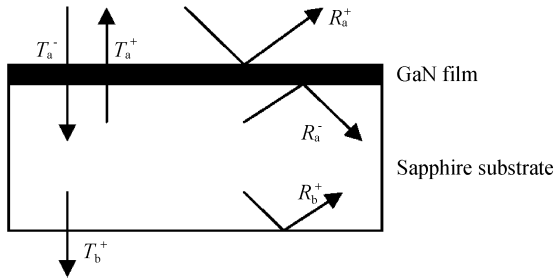


图 1 照到介质上的光的传输

Fig. 1 Light transmission in a GaN film

层和衬底后总的透射率为

$$T = T_a^+ (1 - H) T_b^+ / [1 - R_a^+ R_b^+ (1 - H)] \quad (7)$$

式(7)中 H 是一个可调参量,代表外延层表面对光的散射损耗, $R_a^+, R_a^-, T_a^+, T_a^-$ 根据式(1)~(6)计算, T_b^+, R_b^+ 由衬底和空气的折射率计算得到.

2.2 透射光谱拟合

设 GaN 外延薄膜厚度为 d , 复折射率 $\tilde{n} = n -$

$ik, n(\lambda), k(\lambda)$ 的色散关系由式(8)表达^[8-9]

$$n(\lambda)^2 = A^2 + B^2 / (\lambda^2 - C^2) \quad (8)$$

$$k(\lambda) = k_1 \exp(k_2 / \lambda)$$

式中 A, B, C, k_1, k_2, d 为拟合参量. 在透明区根据 Sellmeier 色散规律 $k=0$, 在台阶区 k 一般遵循指数关系, 在短波长区 GaN 材料吸收 α 相当大, 对于动量为 0 的带间直接跃迁, $\alpha^{[10]}$ 表示为

$$\alpha = A_1 (h\nu - E_g)^{1/2} \quad (9)$$

式中 A_1 是系数, E_g 是 GaN 能带宽度, $h\nu$ 是入射光子能量, k 可由 $\alpha = 4\pi k / \lambda$ 表示出来, n 的变化相对吸收系数要小的多, 在这一区域取折射率 n 为波长 370 nm 时对应的折射率.

用导纳矩阵方法对样品的透射光谱进行拟合, 数据拟合的结果用标准偏差来评价

$$\sigma_i = \left(\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (T_{e,i} - T_{c,i})^2 \right)^{1/2} \quad (10)$$

式中 $T_{e,i}, T_{c,i}$ 分别为在某一波长处测量的和计算的透射率. 总的来说, 拟合过程就是通过色散关系中拟合参量的优化寻找最小标准偏差 σ_i 的过程. 此外拟合过程发现, 缓冲层厚度 d' 对 370~500 nm 的光谱拟合影响很大, 所以对于生长缓冲层的样品在拟合过程中需要考虑缓冲层的影响.

图 2 中点是测量的透射率, 实线即为采取本方法得到的计算曲线, 四个样品的拟合参量列于表 1 中. 透射光谱在 400~800 nm 可以得到很好的拟合, 在 370 nm 附近计算数据和实验数据有些偏离,

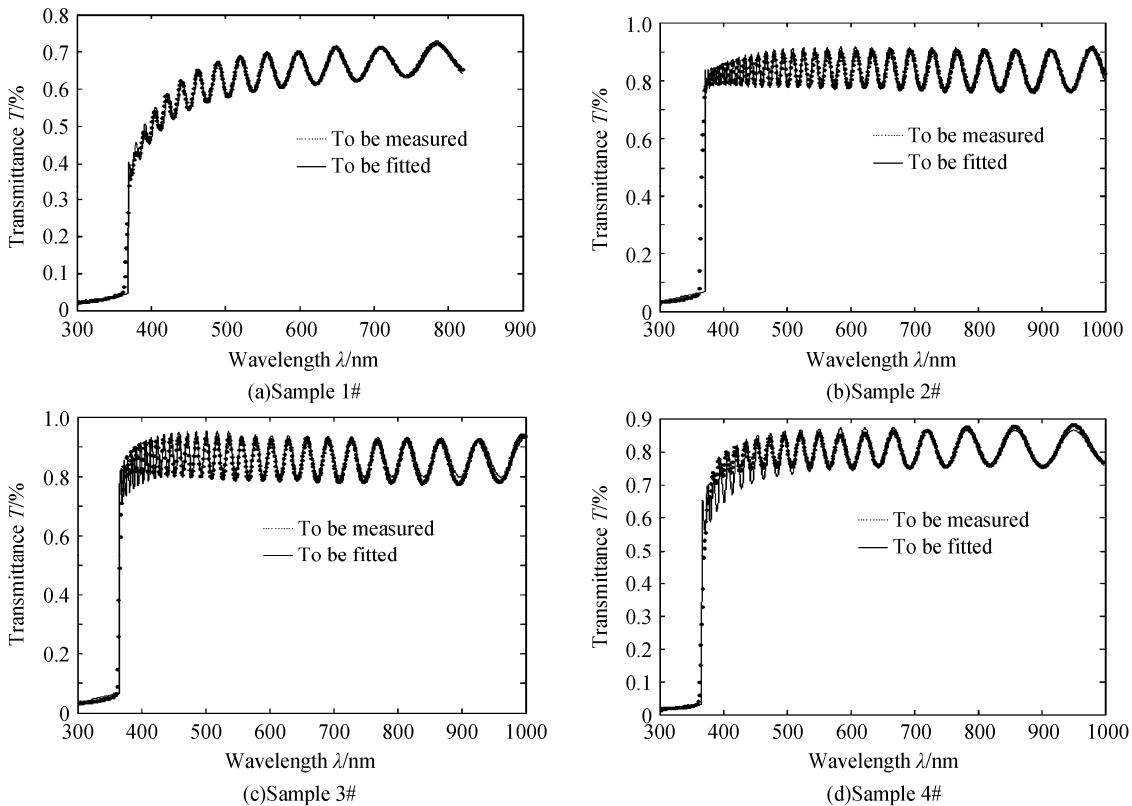


图 2 1#, 2#, 3#, 4# GaN 薄膜拟合前后的透射光谱

Fig. 2 Transmission spectra of 1#, 2#, 3#, 4# GaN film before and after fitting

表1 通过透射光谱提取的 GaN 光学拟合参量

样品编号	A	B	C	d	d'	k ₁	k ₂	H
	--	/nm	/nm	/nm	/nm	--	/nm	--
1#	2.27	304.2	293	1531	--	6.50×10^{-6}	2 690	0.11
2#	2.27	313.5	295.5	2 970	20	$8.5 \times 10^{-7.5}$	2 750	0
3#	2.26	314	295	2 817	22	8.2×10^{-9}	4 380	0
4#	2.27	293	308	1 855	17	9.4×10^{-8}	3 900	0.03

这主要是带间跃迁带来较为复杂的局部吸收,简单的色散关系在禁带附近通常不能保持的缘故.四个样品的折射率随光子波长的关系可从表1中获取,计算薄膜的折射率在波长700 nm和波长400 nm时分别是2.29~2.32和2.53~2.55,外延层的折射率差异较小,其差异的原因和薄膜生长的晶体质量有关.通过表1计算薄膜的消光系数在波长700 nm和波长400 nm时分别是 $3.03 \times 10^{-4} \sim 4.28 \times 10^{-6}$ 和 $5.4 \times 10^{-3} \sim 2.60 \times 10^{-4}$,薄膜的消光系数表现出了很大的差异.一方面是消光系数存在的波段,一方面是消光系数的强弱,如1#号样品的指数吸收在400~800 nm之间一直存在.相比而言,2#,3#号透射光谱的拟合结果中消光系数很小,这表明这一类的样品 GaN 薄膜对光散射较弱,其薄膜质量较好.

把从透射光谱中获取的四个样品的折射率和 G. Yu 等人^[11]通过椭圆偏振光计算的 GaN 薄膜的折射率进行对比,如图3.采用透射光谱提取的折射率与光子波长的关系和 G. Yu 等人通过椭圆偏振光测量的基本吻合,每个样品的折射率略有差异,这和外延薄膜生长过程的晶体质量有关.

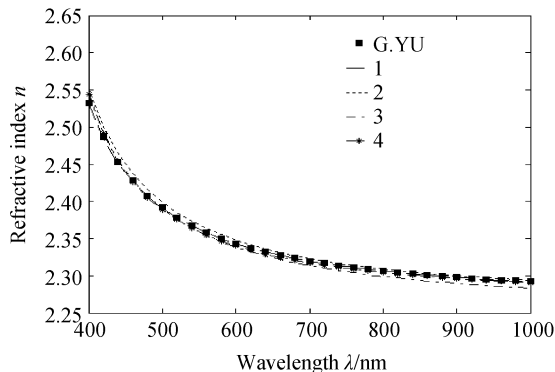


图3 1#,2#,3#,4# GaN 薄膜折射率及 G. Yu 的结果
Fig.3 Refractive index of 1#,2#,3#,4# GaN film and from the reference of G. Yu

3 结论

总之,采用透射光谱研究 GaN 外延薄膜的光学性质是一种准确,方便的方法.本文通过透射光谱的分析提取了 GaN 外延薄膜的光学常量、厚度以及对光学散射的损耗.从拟合结果看,外延层的折射率与光子波长的关系和 G. Yu 等人通过椭圆偏振光测量的结果基本吻合,每个样品间略有差异,而

GaN 薄膜的消光系数差异很大,这在一定程度上可以用来评价外延薄膜的质量.

参考文献

- [1] TONG Xing-lin, ZHENG Qi-guang, YU Ben-hai, *et al.* Optical and structural properties of gan films grown on si substrate by excimer pulsed laser deposition [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2003, **32**(12):1506-1509.
童杏林, 郑启光, 于本海, 等. 脉冲激光沉积 GaN 薄膜的结构和光学特性研究 [J]. 光子学报, 2003, **32**(12):1506-1509.
- [2] FENG Qian, DUAN Meng, HAO Yue. XPS and PL studies of GaN epilayers grown on SiC substrate [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2003, **32**(12):1510-1513.
冯倩, 段猛, 郝跃. SiC 衬底上异质外延 GaN 薄膜 XPS 谱和 PL 谱研究. 光子学报, 2003, **32**(12):1510-1513.
- [3] WANG Qing-xue, WEI Yan-feng, ZHU Jian-mei, *et al.* Infrared transmission spectroscopy of B+ implanted HgCdTe epilayers [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2005, **34**(8):1179-1182.
王庆学, 魏彦锋, 朱建妹, 等. B+ 注入 HgCdTe 外延材料的红外透射光谱分析 [J]. 光子学报, 2005, **34**(8):1179-1182.
- [4] ZHANG Jin-cheng, HAO Yue, LI Pei-xian, *et al.* Thickness measurement of GaN film based on transmission spectra [J]. *Acta Physica Sinica*, 2004, **53**(4):1243-1246.
张进城, 郝跃, 李培咸, 等. 基于透射谱的 GaN 薄膜厚度测量 [J]. 物理学报, 2004, **53**(4):1243-1246.
- [5] YIN Shu-bai. *Optics of thin film-theory and practise* [M]. Beijing: Science Publishing Company, 1987.
尹树百. 薄膜光学-理论与实践 [M]. 北京: 科学出版社, 1987.
- [6] LIN Yong-chang, LU Wei-qiang. *Optical theory of thin film* [M]. Beijing: National Defence Industrial Publishing Company, 1990.
林永昌, 卢维强. 光学薄膜原理 [M]. 北京: 国防工业出版社, 1990.
- [7] HOUGEN C A. Model for infrared absorption and transmission of liquid-phase epitaxy HgCdTe [J]. *J Appl Phys*, 1989, **66**(8):3763-3766.
- [8] FLORY F R. *Thin films for optical systems* [M]. New York: Marcel Dekker, 1995:299-303.
- [9] YU P Y, CARDONA M. *Fundamentals of semiconductors* [M]. Berlin: Springer, 1996: Chap. 6.
- [10] HEAVENS O S. *Optical properties of thin solid films* [M]. New York: Dover, 1955: Chap. 4.
- [11] YU G, WANG G, ISHIKAWA H, *et al.* Optical properties of wurtzite structure GaN on sapphire around fundamental absorption edge (0.78-4.77 eV) by spectroscopic ellipsometry and the optical transmission method [J]. *Appl Phys Lett*, 1997, **70**(24):3209-3211.

Study on Optical Characteristics of Wurtzine GaN

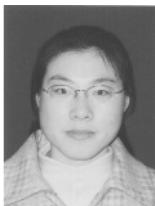
LI Xue, WEI Yan-feng, GONG Hai-mei, FANG Jia-xiong

(State Key Laboratories of Transducer Technology, Shanghai Institute of Technical Physics,
Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China)

Received date: 2005-10-19

Abstract: GaN epitaxial films with the wurtzine structure were measured using the transmission spectra. Optical constants and thickness of GaN epitaxial films were obtained by fitting transmission spectra of typical samples. It is showed that the refractive index has a little difference among GaN epitaxial films, however the extinction efficiency with the range of wavelength from 370 nm to 800 nm has the large difference. The difference of extinction efficiency can value the quality of GaN films to a certain extent.

Key words: GaN; Transmission spectra; Refractive index; Extinction efficiency



LI Xue: was born in 1976, and in Liaoning, China. She received her Ph. D. degree in micro-electronics and solid electronics from Chinese Academy of Sciences in March, 2005. Currently she is a lecturer at Shanghai Institute of Technical and Physics, Chinese Academy of Sciences. Her main research interests focus on GaN-based UV detector.