

GaN 薄膜光学常数的椭圆偏振光谱研究

俞金玲, 姜伟, 李书平, 刘达艺, 康俊勇

(福建省半导体材料及应用重点实验室, 厦门大学物理系, 福建 厦门 361005)

摘要: 采用椭圆偏振光谱法, 在 1.5 ~ 6.5 eV 光谱范围研究了纤锌矿结构 GaN 外延薄膜. 通过物理模型建立和光谱拟合得到了 GaN 外延薄膜的厚度和光学常数. 所得厚度值与扫描电子显微镜测量的结果相差仅为 0.4%. 表明所采用的模型和 Cauchy 吸收色散表式适用于 GaN 薄膜. 进一步采用四相逐点拟合算法得到更全面更准确的 GaN 薄膜光学常数.

关键词: 椭圆偏振光谱; GaN; 薄膜, 光学常数; 色散模型

中图分类号: O433.4

文献标识码: A

The optical constants of GaN film investigated by spectroscopic ellipsometry

YU Jin - ling, JIANG Wei, LI Shu - ping, LU Da - yi, KANG Jun - yong

(Fujian Key Laboratory of Semiconductor Materials and Applications, Department of Physics, Xiamen University, Xiamen, Fujian 361005, China)

Abstract: A wurtzite GaN thin film was investigated by spectroscopic ellipsometry (SE) in the spectrum range of 1.5 ~ 6.5 eV. The thickness and optical constants were obtained by building physical structure model and spectral fitting. The difference of the thickness obtained by SE and by scanning electron microscope (SEM) is only 0.4%, which shows that the model and Cauchy absorbent formula are suitable to study the properties of GaN. Furthermore, the four - phase point - by - point fitting model was used to obtain the optical constants in more accuracy.

Keywords: spectroscopic ellipsometry; GaN; thin film; optical constants; dispersion formula

GaN 基半导体材料具有宽的直接带隙、高的化学稳定性等优良特性, 在短波长光电子器件方面具有广泛的应用. 近年来, 人们已经对 GaN 的光学特性进行了大量的研究^[1-7], 但所得结果仍未十分一致. 不同的报道中, 光谱低能端折射系数 n 相差达到 6%, 带隙附近的色散关系相差近一个数量级^[1]. 并且对 GaN 光学常数的研究多数只局限于 300 ~ 800 nm 波段^[2, 3, 7, 8], 低于 300 nm 的研究报道很少^[5]. 然而这一波段的光学性质对于器件设计非常重要, 所以有必要对其进行进一步研究.

本文采用光谱范围为 1.5 ~ 6.5 eV 椭圆偏振光谱仪测量纤锌矿结构 GaN 外延薄膜的厚度与光学常数. 通过考虑表面覆盖层进一步优化物理结构模型. 在色散关系的研究中分别采用了经典色散公式、Cauchy 吸收公式和 Sellmeier 公式, 并与扫描电子显微镜测量的结果进行比较. 进而在二相模型的基础上采用四相逐点拟合算法得到更全面更准确的 GaN 薄膜光学常数.

1 样品与实验

实验所用样品为在单面抛光蓝宝石衬底 (0001) 面上, 采用金属有机物化学气相沉积 (MOCVD) 方法制备的非掺杂纤锌矿结构 GaN 外延薄膜. 由 X 射线衍射实验 (XRD) 可知样品的 c 轴沿生长方向, 垂直于样品表面. 采用扫描电子显微镜 (SEM) 观测了样品的横截面, 如图 1 所示. 可以看出, GaN 薄膜的厚度约为 2.893 μm . 采用法国 Jobin Yvon 公司生产的 UVSEL 扫描光谱型相调制椭圆偏仪 (UVSEL FUV), 在入射角为 70 的情况下, 以 0.01 eV 步长扫描了 1.5 ~ 6.5 eV 的光谱.

收稿日期: 2007 - 07 - 18

作者简介: 俞金玲 (1983 -), 女, 本科生; 通讯联系人: 康俊勇, 教授.

基金项目: “863” 计划资助项目 (2006AA03A110); 基础科研资助项目 (A1420060155); 国家自然科学基金资助项目 (60336020); 厦门市科技计划资助项目 (3502Z20063001)

2 结果和讨论

椭圆偏振光法基于测量样品表面及各层界面间反射光的相互作用引起的入射光偏振态的改变, 通常用两个椭圆参数 Ψ 和 Δ 表示, 再通过建立样品的物理结构模型, 采用算法模拟光束反射过程中与样品的相互作用来拟合出所测样品的有关特性, 诸如膜厚、折射率、消光系数等^[9].

2.1 物理结构模型建立

由于蓝宝石背面没有抛光, 所以光入射到蓝宝石背面时发生了漫反射, 由此反射的光被探测器接收到的几率很小, 故可以忽略^[3]. 根据 SEM 的观测 (图 1), 样品的表面和界面都比较平整, 而且 GaN 层较厚, 可以忽略表面粗糙层和界面过渡层, 但由于样品长时间暴露在空气中, 表面将由于氧化、沾污等原因形成覆盖层. 因此, 构建空气/表面覆盖层/GaN/衬底四相模型较为合理. 如图 2 所示, 表面覆盖层由 50% 空气和 50% GaN 组成, 其介电常数由 Bruggeman 有效介质 (EMA) 模型描述^[10]; 衬底为各向异性 Al_2O_3 ; 由于 GaN 中 o 光和 e 光折射率相差不超过 3%^[15], 故设定该层为各向同性.

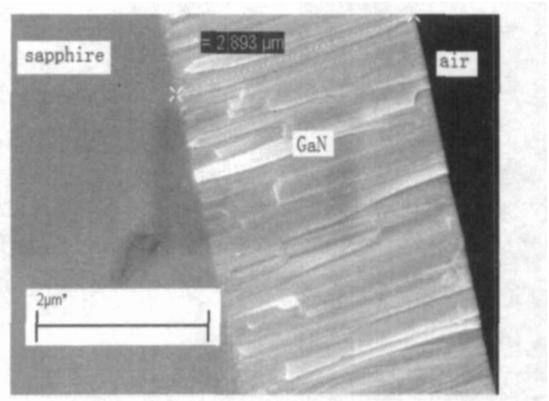


图 1 用横截面扫描电子显微镜测量 GaN 薄膜厚度的结果

Fig 1 A cross-sectional image of the GaN thin film by SEM

2.2 分析方法

通常, 对带隙以下的椭圆偏振光谱采用色散公式描述; 对近带边及带隙以上的椭圆偏振光谱, 由于材料的吸收逐渐增强, 用色散公式的拟合效果不佳, 采用逐点拟合算法^[8]更为合适. 评价分析方法及模型好坏的重要参数为:

$$\chi^2 = \min \sum_{i=1}^n \left[\frac{(t_{th} - t_{exper})^2}{\sigma_i^2} + \frac{(r_{th} - r_{exper})^2}{\sigma_i^2} \right] \quad (1)$$

其中: n 为实验测量的 (t, r) 的对数; t_{exper} 和 r_{exper} 为实验测量值, t_{th} 和 r_{th} 为理论计算值, σ_i 为第 i 次测量误差的标准偏差. 拟合结果的 χ^2 越小, 所用方法和模型越合理.

对带隙以下的椭圆偏振光谱, 分别采用了 Sellmeier, 经典振荡和 Cauchy 吸收色散公式. 最常用的 Sellmeier 公式为:

$$n^2(\omega) = A + B \frac{\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2} \quad k(\omega) = 0 \quad (2)$$

其中, A 和 B 为拟合参数.

基于光与物质的相互作用原理经典色散公式为:

$$n(\omega) = n_\infty + \frac{(\epsilon_s - n_\infty)^2}{\omega^2 - \omega_0^2 + i\gamma_0} \quad (3)$$

其中: n_∞ 为高频介电常数; ϵ_s 指振荡频率为零时的介电常数; ω_0 为振荡的共振频率; γ_0 为振荡峰的半高宽, 也称为衰减因子.

考虑吸收效应的 Cauchy 经验公式为:

$$n(\omega) = A + \frac{B \times 10^4}{\omega^2} + \frac{C \times 10^9}{\omega^4}, \quad k(\omega) = D \times 10^{-5} + \frac{E \times 10^4}{\omega^2} + \frac{F \times 10^9}{\omega^4} \quad (4)$$

其中: A, B, C, D, E 和 F 均为拟合参数.

表 1 给出了不同色散公式拟合所得的参数, 其中, Cauchy 吸收公式的 χ^2 值最小, 而且其拟合得到的

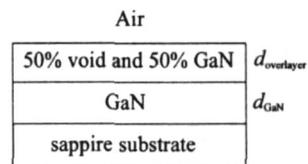


图 2 样品的物理结构模型

Fig 2 The structure model of the sample

厚度与 SEM 的测量结果非常接近, 相对误差仅为 0.4%。Sellmeier 公式没有考虑吸收效应, 虽然在许多情况下可以得到较好的拟合结果^[2, 5], 但由于通常 GaN 外延层中穿透位错密度较高, 吸收较强, 因此, 考虑吸收效应对 GaN 光学常数的研究更合理。

表 1 不同色散公式最佳拟合结果

Tab 1 Best - fit data of different dispersion formulas

色散公式	$d_{\text{overlayer}} / \text{nm}$	$d_{\text{GaN}} / \text{nm}$	χ^2
Cauchy 吸收公式	3.1	2894.3	0.50
经典色散公式	3.4	2928.8	1.98
Sellmeier 公式	3.6	3014.4	9.04

由式 (4) 可知, 当时, $n^2 = A^2$. 因此, 使用 Cauchy 吸收公式拟合参数值, 可以进一步得到 GaN 材料的高频介电常数 $\epsilon = 5.36$, 与 Kawashima^[7] 等人报道的数值 5.37 一致。

为了进一步确定表面覆盖层是否存在及其影响的大小, 采用三相 (空气 / GaN / 衬底 /) 模型和 Cauchy 色散公式模拟计算. 结果为 d_{GaN} 为 2899.7 nm, 与 SEM 的测量结果相差较大; χ^2 为 5.49, 比四相模型和 Cauchy 色散公式模拟计算结果大. 可见表面覆盖层确实存在且其影响不可忽略, 同时表明了所采用的四相模型及 Cauchy 色散表式较合理。

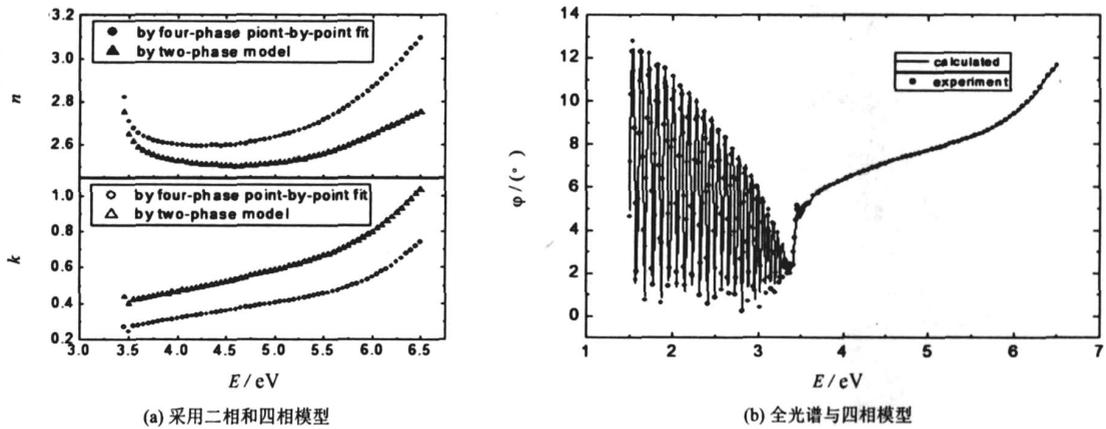


图 3 模型逐点拟合曲线 (实线)

Fig 3 Four - phase (circles) models, respectively

对近带边及带隙以上的椭偏光谱采用逐点拟合算法, 计算和比较四相与二相^[8] (空气 / GaN) 模型的差异, 结果如图 3 (a) 所示. 可见, 四相模型所得消光系数较小、折射系数较大. 由图 3 (b) 可知, 四相模型模拟计算值与实验谱线吻合得很好。

上述二相、三相与四相模型拟合结果的对比表明, 四相模型最为合理可靠. 因此, 分别采用 Cauchy 吸收公式和四相逐点拟合算法模拟计算 1.5 ~ 3.3 eV 和 3.3 ~ 6.5 eV 波段的色散谱线. 结果如图 4 所示。

图 4 给出了全波段折射率 n 和消光系数 k 的数值, 并与文献报道结果进行比较. 可见带隙以下二者基本一致, 带隙以上折射率 n 和消光系数 k 有差别. 这可能是由样品表面状态和所用测量方法不同所致。

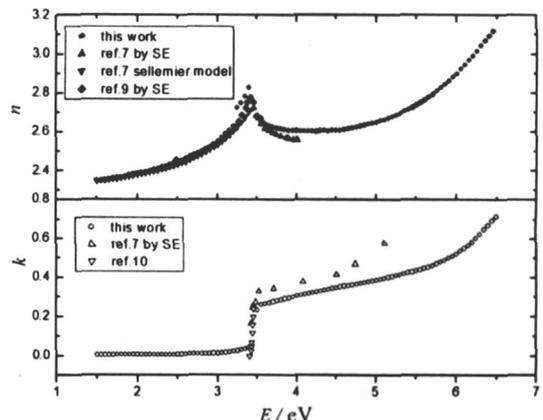


图 4 GaN 薄膜的折射系数 n 和消光系数 k 的数值
Fig 4 The refractive index n and extinction coefficient k of the GaN thin film

3 结语

采用椭圆偏振光谱法,在 1.5~6.5 eV 光谱范围研究了纤锌矿结构 GaN 外延薄膜.通过物理模型建立和光谱拟合得到了 GaN 外延薄膜的厚度和光学常数.所得厚度值与扫描电子显微镜测量的结果相差仅为 0.4%,所得材料高频介电常数与其它文献报道的一致.表明所采用的模型和 Cauchy 吸收色散表式适用于 GaN 薄膜.进一步采用四相逐点拟合算法得到更全面更准确的 GaN 薄膜光学常数.

参考文献:

- [1] Shokhovets S, Goldhahn R, Gobsch G, *et al* Reflectivity investigations as a method for characterizing group III nitride films [J]. *J Appl Phys*, 1999, 86(5): 2 602 - 2 610
- [2] Lian C X, Li X Y, Liu J. Study on refractive index of GaN by spectroscopy ellipsometry[J]. *J Infrared Millim Waves*, 2004, 23(4): 262 - 264
- [3] Yu G, Ishikawa H, Egawa T, *et al* Polarized reflectance spectroscopy and spectroscopic ellipsometry determination of the optical anisotropy of gallium nitride on sapphire[J]. *J Appl Phys*, 1997, 36: L1 029 - L1 031
- [4] Yu G, Ishikawa H, Umeno M, *et al* Optical properties of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ heterostructures on sapphire by spectroscopic ellipsometry[J]. *Appl Phys Lett*, 1998, 72(18): 2 202 - 2 204
- [5] Kawashima T, Yoshikawa H, Adachi S, *et al* Optical properties of hexagonal GaN [J]. *J Appl Phys*, 1997, 82(7): 3 528 - 3 535
- [6] Amano H, Watanabe N, Koide N, *et al* Room - temperature low - threshold surface - stimulated emission by optical pumping from $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}/\text{GaN}$ double heterostructure[J]. *J Appl Phys*, 1993, 32: L1 000 - L1 002
- [7] Schmidt T J, Song J J, Chang Y C, *et al* Large optical nonlinearities near the band gap of GaN thin films[J]. *Appl Phys Lett*, 1998, 72(12): 1 504 - 1 506
- [8] Liu Y C, Hsieh J H, Tung S K, *et al* Extraction of optical constants of Zinc Oxide thin films by ellipsometry with various models[J]. *Thin Solid Film*, 2006, 510: 32 - 38
- [9] 穆全全, 刘永军. 光谱型椭偏仪对各向异性液晶层的测量 [J]. *物理学报*, 2006, 55(3): 1 055 - 1 059
- [10] Deineka A G, Tarasenko A A, Jastrabik L, *et al* An ellipsometric study of W thin films deposited on Si[J]. *Thin Solid Film*, 1999, 339: 216 - 219

(责任编辑: 郑美莺)