

文章编号:1001-9014(2004)04-0262-03

GaN 折射率的椭圆偏振光谱研究

连传昕^{1,2}, 李向阳¹, 刘 骥²

(1. 中国科学院上海技术物理研究所 传感技术国家重点实验室, 上海 200083;
2. 山东大学 信息科学与工程学院, 山东 济南 250100)

摘要:利用 400~1200nm 波段的椭圆偏振光谱对生长在蓝宝石衬底上的非故意掺杂纤锌矿氮化镓(GaN)外延薄膜进行了研究. 通过拟合实验数据获得了 GaN 薄膜的厚度和在可见-近红外区域的折射率色散关系, 即 $n^2(\lambda) = 2.26^2 + 330.1^2 / ((\lambda/\text{nm})^2 - 265.7^2)$. 利用这一公式研究了 GaN 紫外-可见波段的反射光谱, 计算得到的 GaN 薄膜厚度, 与椭圆偏振光谱结果一致, 两者偏差仅为 0.68%.

关键词:氮化镓; 椭圆偏振光谱; 折射率; 反射光谱
中图分类号: O433.4 **文献标识码:** A

STUDY ON REFRACTIVE INDEX OF GaN BY SPECTROSCOPIC ELLIPSOMETRY

LIAN Chuan-Xin^{1,2}, LI Xiang-Yang¹, LIU Ji²

(1. State Key Laboratories of Transducer Technology, Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China;
2. School of Information Science and Engineering, Shandong University, Jinan 250100, China)

Abstract: Unintentionally doped wurtzite GaN grown on (0001) sapphire was studied by spectroscopic ellipsometry (SE) in the wavelength range of 400~1200nm. Both the thickness and dispersion of the refractive index of GaN, i. e. $n^2(\lambda) = 2.26^2 + 330.1^2 / (\lambda^2 - 265.7^2)$, were obtained by fitting the experimental data. With this formula, the reflection spectrum of GaN in the UV-VIS range was studied and the thickness of GaN was calculated. The two values of the thickness obtained by these two different methods are in good agreement and the deviation is found to be 0.68%.

Key words: GaN; spectroscopic ellipsometry; refractive index; reflection spectrum

引言

氮化镓(GaN)是一种直接宽带隙半导体材料, 具有优良的光学、电学和机械性质, 且耐高温不易受腐蚀, 被广泛用于制造各种光电子器件如发光二极管、紫外探测器和激光二极管等^[1,2]. GaN 在相应波段光学常数的色散关系对于制备和分析基于 GaN 的光电子器件是十分重要的. 目前, 有部分研究人员对 GaN 吸收边以下折射率的色散关系做了研究^[3-7]. 但是这些研究大多集中在 800nm 以下的可见波段, 而且不同研究者得到的结果也有所不同. 因此, GaN 吸收以下折射率的色散关系有待进一步研究. 本文报道了生长在蓝宝石衬底上的非故意掺杂纤锌矿 GaN 外延薄膜 400~1200nm 波段的椭圆偏

振光谱, 通过拟合获得了 GaN 薄膜的厚度和可见-近红外区域的折射率. 另外, 还报道了 GaN 紫外-可见波段的反射光谱, 利用椭圆偏振光谱得到的 GaN 折射率再根据反射光谱中相邻干涉峰的位置计算得到 GaN 薄膜的厚度, 与椭圆偏振光谱结果一致.

1 实验

实验样品是在单面抛光的蓝宝石衬底的 (0001) 面上, 采用金属有机化学汽相沉积 (MOCVD) 方法制备的非故意掺杂纤锌矿结构 GaN 外延薄膜. 纤锌矿结构 GaN 的 c 轴沿生长方向, 垂直于衬底表面. 椭圆偏振光谱实验是在美国 J. A. Woollam 公司制作的型号为 V-VASE with AutoRetarder 的光谱仪上进行的. 入射光角度为 68°, 光斑

直径 1mm, 波长范围 400 ~ 1200nm. 紫外-可见波段的反射光谱是在 Varian Cary500 紫外-可见分光光度计上进行的, 光线接近垂直入射, 扫描范围是 200 ~ 800nm.

2 结果与讨论

一束原来线偏振或椭圆偏振的非正入射光, 经由半导体表面反射后, 其电矢量振幅和偏振状态(相位)都会改变. 椭圆偏振光谱测量的基本公式是^[8]

$$\rho = \frac{R_p}{R_s} = \tan(\psi) e^{i\Delta}. \quad (1)$$

其中, R_p 和 R_s 分别是 p 偏振光(平行于入射面)和 s 偏振光(垂直于入射面)的复振幅反射系数. $\tan\psi$ 给出了 E_p 矢量反射波和 E_s 矢量反射波的相对振幅衰减, Δ 给出了反射引起的两个电矢量间的相位移之差. 椭圆偏振光谱测量得到的两个参数 ψ 和 Δ 是光波长(或光子能量)和入射角度的函数. 通过测量不同波长下的 ψ 和 Δ , 就可以得到相应波段被测样品的光学常数谱, 而不必引用 K-K 变换. 虽然在 400 ~ 1200nm 波段, GaN 和蓝宝石都是透明的, 入射光可以到达蓝宝石的背面. 但是一方面由于受到反射、吸收和散射作用, 光到达蓝宝石背面时能量有了很大衰减; 另一方面由于蓝宝石背面是没有抛光的, 所以光入射到蓝宝石背面时发生漫反射, 由此反射的光被探测器接受到的几率很小, 所以蓝宝石背面的影响可以忽略. 同时忽略 GaN 表面层的影响, 采用三相结构(空气/GaN/衬底)模型^[9]对实验数据进行拟合. 虽然纤锌矿 GaN 是单轴晶体, 但是 Yu 等人^[6]的研究发现在 400 ~ 800nm 的透明波段, GaN 的 o 光和 e 光折射率的差别小于 3%, 所以在拟合过程中, 忽略 GaN 折射率色散关系的各向异性, 采用 Sellmeier 模型^[10]

$$n^2(\lambda) = A_0 + \frac{A_1^2}{\lambda^2 - A_2^2}, \quad k = 0 \quad (2)$$

其中, A_0, A_1, A_2 是拟合参数, λ 是光波长. 拟合的最佳结果是使 σ 的值达到最小^[11]:

$$\sigma = \frac{1}{N - P - 1} \sum_{j=1}^N [(\tan\Psi_j^{\text{exp}} - \tan\Psi_j^{\text{calc}})^2 + (\cos\Delta_j^{\text{exp}} - \cos\Delta_j^{\text{calc}})^2]. \quad (3)$$

其中, N 是拟合时采用的实验数据点的数目, P 是拟合过程中模型参数的数目. 图 1 给出了椭圆偏振光谱的实验数据(圆点)和拟合曲线(实线), 可以看出实验数据与理论计算结果基本吻合, 但是在 400nm 附

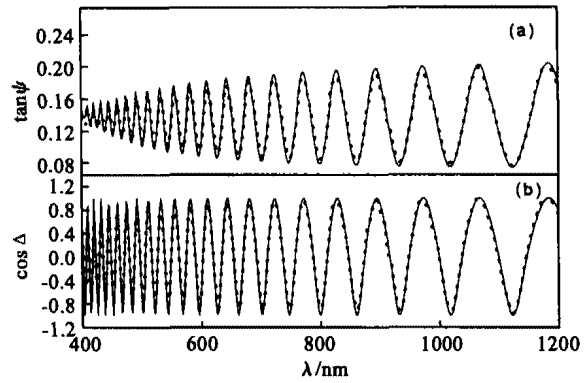


图 1 GaN 薄膜椭圆偏振光谱的实验数据(圆点)和理论拟合曲线(实线)

Fig. 1 Experimental (dotted) and fitted (solid) ellipsometric spectra of GaN

近, 理论计算得到的干涉峰比实验结果尖锐. 这是因为, 理论模型假设入射光是单色光, 每个测量波长只得到一对 ψ 和 Δ . 但实际上, 入射光频率有一定的展宽使得每一次测量得到的 ψ 和 Δ 也不是唯一值, 而是有一定的范围, 最终得到的实验结果实际上是一个平均的结果. 如果 ψ 和 Δ 变化比较慢, 平均的结果就与单色光测量的结果比较一致, 入射光的非单色性的影响就不是很明显. 但是对于我们的样品而言, ψ 和 Δ 的变化比较快, 而入射光的非单色性则减弱了 ψ 和 Δ 干涉峰的尖锐程度, 即降低了 ψ 和 Δ 干涉峰相邻极大值和极小值之间的高度, 从而使得理论模型极大值-极小值的高度大于实验结果. 尤其是在 400nm 附近, 由于这个区域波长较短, 干涉更为明显, 所以拟合的效果不如长波部分. 拟合得到的理论模型的参数如表 1 所列.

表 1 拟合得到的 GaN 折射率的各个参数及薄膜厚度的数值

Table 1 The best-fit parameters of the refractive index and thickness of GaN

A_0	A_1 (nm)	A_2 (nm)	Thickness d (nm)
2.26	330.1	265.7	2560.2

图 2 是 GaN 折射率的色散关系, 圆点数据是我们通过拟合得到的, 实线数据取自文献[5].

为了验证椭圆偏振测量的结果, 我们做了 GaN 紫外-可见波段的反射光谱, 如图 3 所示. 由于蓝宝石衬底的厚度(约为 0.4mm)远大于 GaN 外延薄膜的厚度, 所以对反射光谱中的干涉起主要作用的是 GaN 薄膜. 光垂直入射的情况下, 反射光谱中干涉部分相

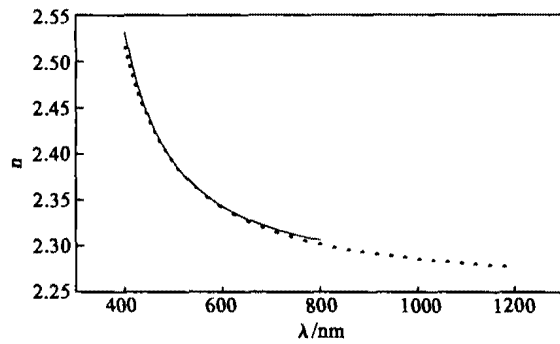


图2 拟合得到的 GaN 在波段的折射率(圆点)和文献[5]的结果(实线)

Fig.2 Refractive index of GaN obtained by fitting (dotted) and that taken from reference[5](solid)

邻极大值对应的波长 λ_1, λ_2 由下式决定:

$$\begin{aligned} 2n_1d &= m\lambda_1, \\ 2n_2d &= (m+1)\lambda_2. \end{aligned} \quad (4)$$

其中, n_1, n_2 分别是 GaN 在 λ_1, λ_2 处的折射率, m 是干涉峰的级数, 则由式(4)可以得到薄膜厚度的计算公式:

$$d = \left| \frac{\lambda_1\lambda_2}{2(n_1\lambda_2 - n_2\lambda_1)} \right|. \quad (5)$$

根据上式, 利用椭圆偏振光谱得到的折射率, 由反射光谱 400 ~ 800nm 波段每两个相邻极大值的位置分别计算 GaN 薄膜厚度, 取平均得 2542.8nm, 与椭圆偏振光谱得到的结果几乎一致, 两者偏差仅为 0.68%, 考虑到反射光谱中入射光不是完全垂直于 GaN 表面, 我们认为实际误差可能小于这一数值.

3 结论

利用 400 ~ 1200nm 波段的椭圆偏振光谱对生长在蓝宝石衬底上的非故意掺杂纤锌矿 GaN 外延薄膜进行了研究, 通过拟合获得了 GaN 薄膜的厚度和可见-近红外区域的折射率色散关系, 即 $n^2(\lambda) = 2.26^2 + 330.1^2 / ((\lambda/\text{nm})^2 - 265.7^2)$, 分析了造成

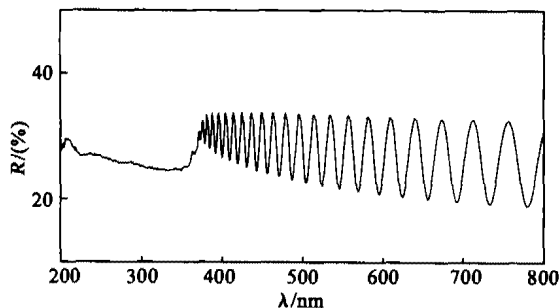


图3 GaN 紫外—可见波段的反射光谱

Fig.3 Reflection spectrum of GaN

理论结果和实验数据差别的原因是椭圆偏测量中入射光的非单色性. 利用椭圆偏测量得到的折射率公式研究了 GaN 紫外-可见波段的反射光谱, 计算得到 GaN 薄膜的厚度, 与椭圆偏光谱结果一致, 两者偏差为 0.68%.

致谢 作者非常感谢与中科院上海技术物理研究所红外物理国家重点实验室的黄志明博士及美国 J. A. Woollam 公司的 Tom Tiwald 博士进行的有益讨论.

REFERENCES

- [1] Monemar B, III-V Nitrides-Important future electronic materials[J]. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 1999, **10**: 227—254.
- [2] Rzeghi M, Rogalski A. Semiconductor ultraviolet detectors [J]. *J. Appl. Phys.*, 1996, **79**(10): 7433—7473.
- [3] Shokhovets S, Goldhahn R, Cimalla V, et al. Peflectivity study of hexagonal GaN films grown on GaAs: Surface rough, interface layer and refractive index [J]. *J. Appl. Phys.*, 1998, **84**(3): 1561—1566.
- [4] Tao Yang, Shigeo Goto, Masahiko Kawata. et al. Optical properties of GaN thin films on sapphire substrates characterized by variable-angle spectroscopic ellipsometry [J]. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 1998, **37**: L1105—1108.
- [5] Yu G, Wang G, Ishikawa H, et al. Optical properties of wurzite structure GaN on sapphire around fundamental absorption edge (0.78 ~ 4.77 eV) by spectroscopic ellipsometry and the optical transmission method [J]. *Appl. Phys. Letter*, 1997, **70**(24): 3209—3211.
- [6] 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]. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 1997, **36**: L1029—1031.
- [7] Muth J F, Brown J D, Johnson M A L, et al. Absorption coefficient and refractive index of GaN, AlN and AlGaN Alloys [J]. *MRS Internet J. Nitride Semicond. Res*, 1999, **4S1, G5.2**.
- [8] SHEN Xue-Chu. *Optical Spectroscopy and Properties of Semiconductors (2nd Edition)* [M]. Beijing: Second edition, Science Press (沈学础. 半导体光谱和光学性质. (第二版). 北京: 科学出版社); 2002.
- [9] Azzam R M A, Bashara N M. *Ellipsometry and Polarized Light* [M]. North-Holland: Amsterdam, 1977, 283—288.
- [10] Palik E D. *Handbook of Optical Constants of Solids* [M]. Orlando Academic, F1, 1985.
- [11] Takahiro Kawashima, Hisashi Yoshikawa, Sadao Adachi, et al. Optical properties of hexagonal GaN [J]. *J. Appl. Phys.*, 1997, **82**(7): 3528—3535.