

# X 光倒易空間圖譜技術分析矽鍺異質磊晶材料的應變

## Strain Studies of Silicon-Germanium Hetero-Epitaxial Layer by X-ray Reciprocal Space Mapping

鄭明欣、林宏旻、鍾明光

Ming-Hsin Cheng, Hung-Min Lin, Eddy Jones

近年來，為了提高金氧半場效電晶體的運算速度，作為載子通道的矽單晶材料已被形變矽鍺異質磊晶或形變矽磊晶材料所取代。因此，鑑定此類形變磊晶材料與矽單晶基材的晶體不匹配度與鬆弛程度，便成為一個很重要的課題。由於高解析度多晶三軸繞射儀具備良好的光學模組，有效地提高在倒易空間量測上的解析能力，進而使得二維 X 光倒易空間圖譜技術成為鑑定異質磊晶材料的重要研究工具。本文將介紹 X 光倒易空間圖譜分析原理，高解析度多晶三軸繞射儀光學模組構造與 X 光倒易空間圖譜的操作流程，應變數值分析原理，最後舉例應用 X 光倒易空間圖譜鑑定不同形變矽鍺異質磊晶薄膜的分析結果。

Recently, single crystal Si channels in metal-oxide-semiconductor field effect transistors (MOSFETs) have been replaced with strained Si, SiGe and Ge channels in order to enhance electron or hole mobility in channel direction. Therefore, it is a significant issue to evaluate the strain relaxation and lattice mismatch in these strained silicon-germanium hetero-epitaxial layers. However, two-dimensional reciprocal space mapping (2D-RSM) employing the triple axis X-ray diffractometry have been considered to be a powerful technology to characterize the strain status of these kinds of materials. In this article, we describe the principle of 2D-RSM, the optic components in triple axis X-ray diffractometry, experimental procedures in detail, the principle of strain calculation, and finally illustrate the experimental results of a variety of strained silicon-germanium hetero-epitaxial layers using two-dimensional reciprocal space mapping technology.

### 一、前言

材料微晶體結構的變異主導材料的物理性質，而晶體分析一直是材料科學領域中相當重要的一

環。常見的晶體分析法，藉由一束入射電磁波行經材料時，電磁波與晶體中原子的電子發生碰撞，當此碰撞為彈性碰撞時，電子的散射波波長會與入射波波長相同，且存在一定的相位差異時，彼此間的

散射波互相干涉後便產生所謂的繞射現象，藉由量測繞射訊號角度的位置與強度，可反推得晶體結構。波與物質要產生明顯的繞射，波長必須與晶體中周期排列的原子間距相當，也就是波長必須接近埃 (Å) 等級，而一般被用來量測晶體的波有 X 光、電子束、中子束等等可做選擇。相較之下，X 光有著非破壞性檢測與可在大氣下操作等優點，X 光繞射分析一直是最重要的材料晶體結構分析方法之一<sup>(1)</sup>。

X 光薄膜繞射分析儀以不同的量測模式，可得到多種薄膜晶體結構的特性，例如可利用 X 光反射率 (X-ray reflectivity) 量測薄膜之電子密度、表面及介面層間之粗糙度與薄膜厚度，而其鑑定薄膜厚度的解析度可達 Å 等級<sup>(2-3)</sup>。另外，利用 X 光雙晶繞射儀 (double-crystal diffractometer) 之  $\omega$ - $2\theta$  掃描，可量測磊晶薄膜材料與基材之間的晶體不匹配程度 (mismatch)，或利用  $\omega$  掃描之搖擺曲線 (rocking curve)，可量測結晶薄膜材料中晶塊排列的散漫度 (mosaic spread)<sup>(4)</sup>。這些薄膜結構上的變異間接影響薄膜的光電等物理特性，這對光電半導體界而言是相當重要的課題，進而使得 X 光薄膜繞射分析技術成了材料研究機構及光電半導體廠不可或缺、多方使用的一門技術。

除了三五族光電產業外，現今多數半導體研究都圍繞在矽材料上，其中最著名的莫過於藉由閘極控制下方單晶矽材料所形成載子通道開關 (on/off) 的金氧半場效電晶體 (metal-oxide-semiconductor field effect transistor, MOSFET)。然而，為了加速通道的操作速度，新一代的通道材料必須改選具有較高遷移率 (mobility) 而又能與既有半導體製程整合的材料，這使得形變鍺 (strained Ge)、形變矽鍺 (strained SiGe) 與形變矽 (strained Si) 成為熱門通道的新材料。當傳統的矽材料通道受應力伸張 (tensile strain) 而成形變矽材料通道，非等向晶體的伸張伴隨著能帶上的改變，原本矽材料導電能帶上的 6 個能量簡併能谷 (six-fold degeneracy) 轉變為能量上升的  $\Delta 4$  (four-fold degeneracy) 能谷與能量下降的  $\Delta 2$  (two-fold degeneracy) 能谷，而電子在能谷分布上的改變使得通道方向上的有效質量變小 (effective mass)，進而增加電子遷移率；另外，在

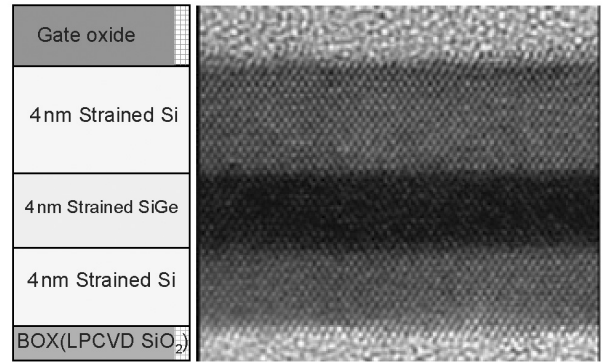


圖 1. IBM 公司最新發表在絕緣層製備形變矽鍺異質磊晶通道的電晶體。

適當的形變作用下也會減少電子在能谷間或能谷內的散射率 (scattering rate)，進而改善電子遷移率<sup>(5)</sup>。

圖 1 為 IBM 公司最新發表在絕緣層製備形變矽鍺異質磊晶通道 (heterostructure on insulator, HOI) 的電晶體<sup>(6)</sup>。另一方面，矽鍺異質磊晶材料除了可以應用於高速電子 (電洞) 移動率電晶體外，在光電偵測器 (photodetector) 也有極大的發展潛力。例如，磊晶純鍺於單晶矽基板的元件，可作為近紅外光感應器 (1.3–1.5  $\mu\text{m}$ )，其主要的機制是利用元件吸收光子後產生電子-電洞對，導致載子濃度增加，進而會使傳導係數增加，最後藉由輸出電流來偵測光的訊號<sup>(7)</sup>。

由於純鍺單晶基材價格昂貴而且機械強度不足以直接應用於製程技術中，所以這類形變異質磊晶材料都必須仰賴磊晶技術於矽晶片上磊晶成長，因此研究此類磊晶薄膜的上下層晶格不匹配與鬆弛程度成了半導體技術的一項重要課題。就目前量測技術來說，以高解析度 X 光繞射分析儀為量測磊晶薄膜品質優劣、晶格形變與鬆弛程度的主要研究工具。概述其量測方式，藉由偵測器在倒易空間的軸向 (on axial) 與非軸向 (off axial) 倒易晶格點附近做二維的掃描偵測，如此可以同時得到單晶基板與磊晶薄膜倒易晶格點附近的掃描圖譜。這種利用高解析度 X 光繞射分析儀偵測倒易空間中二維繞射強度分布來分析磊晶薄膜晶格結構特性的方法，就稱為二度空間 X 光倒易空間圖譜分析技術 (two-dimensional reciprocal space mapping, 2D-RSM)<sup>(8-9)</sup>。

在此也略提一下常見的磊晶成長技術，約略可分為二類。第一類是化學氣相沉積 (chemical vapor deposition, CVD)，主要是藉由氣體前驅物間的化學作用，而形成磊晶層的製程。簡單而言，就是前驅物氣體在基板上被吸附、分解，然後沉積於磊晶層中。第二類是分子束磊晶 (molecular beam epitaxy, MBE)，主要是在超高真空下 ( $10^{-8}$  Pa)，藉由一個或多個原子，或熱分子和晶體表面反應的磊晶製程。MBE 主要的特點是能夠非常精確的控制化學組成和摻雜側圖，所以能製備僅有幾層原子厚度的磊晶層。一般而言，為了使磊晶成長過程中的反應原子有足夠的移動率，使其可以找到在晶體表面適合的位置，所以磊晶成長須要有相當高的溫度<sup>(10)</sup>。

本文的重點將介紹 X 光倒易空間圖譜分析原理、PANalytical X'Pert MRD 高解析度多晶三軸繞射儀光學模組構造與 X 光倒易空間圖譜的操作流程、應變數值分析原理，最後介紹在國家奈米元件實驗室 (National Nano Device Laboratories, NDL) 應用 2D-RSM 鑑定形變矽鍺異質磊晶薄膜晶格不匹配、應變、晶格鬆弛程度 (relaxation) 的實驗結果。

## 二、X 光倒易空間圖譜分析原理

從 Ewald 於 1913 年提出倒易空間的概念以來，此理論被廣泛的應用於晶體繞射分析領域。就一簡單立方週期排列的原子而言，其倒易空間上的點陣結構亦為簡單立方，實空間與倒易空間的週期成倒數關係，將此原理推展至異質磊晶薄膜時，倒易空間將由單晶基板與磊晶薄膜的二組相似週期點陣所組成。

矽鍺磊晶成長過程中，為了維持矽與矽鍺界面原子鍵結完整與連續性，矽鍺磊晶層的晶格面間距必須形變去迎合基板的間距，因此產生了晶格匹配程度的問題。若以一層矽鍺異質磊晶薄膜為例，矽與鍺同屬鑽石結構，鍺晶格常數比矽晶格常數大 4.17%，而矽鍺亦屬鑽石結構，其晶格常數介於矽與鍺之間，端看兩成分的比例而定。在矽鍺磊晶層中晶格不匹配的情況又可以分成三類情形來討論。第一類是矽鍺磊晶層於磊晶過程中，基板與磊晶層之間的晶格不匹配並不影響磊晶層晶體結構，磊晶

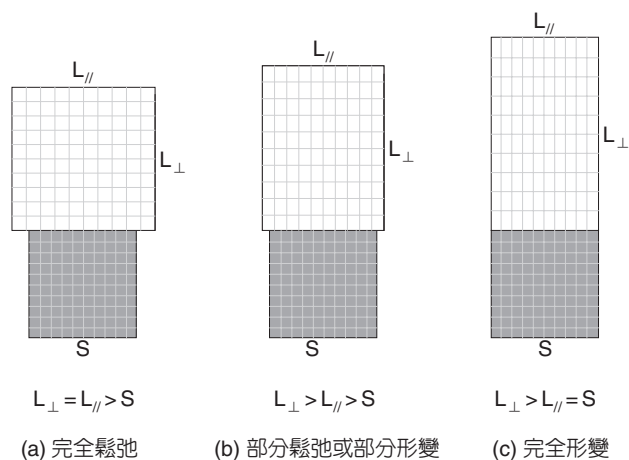


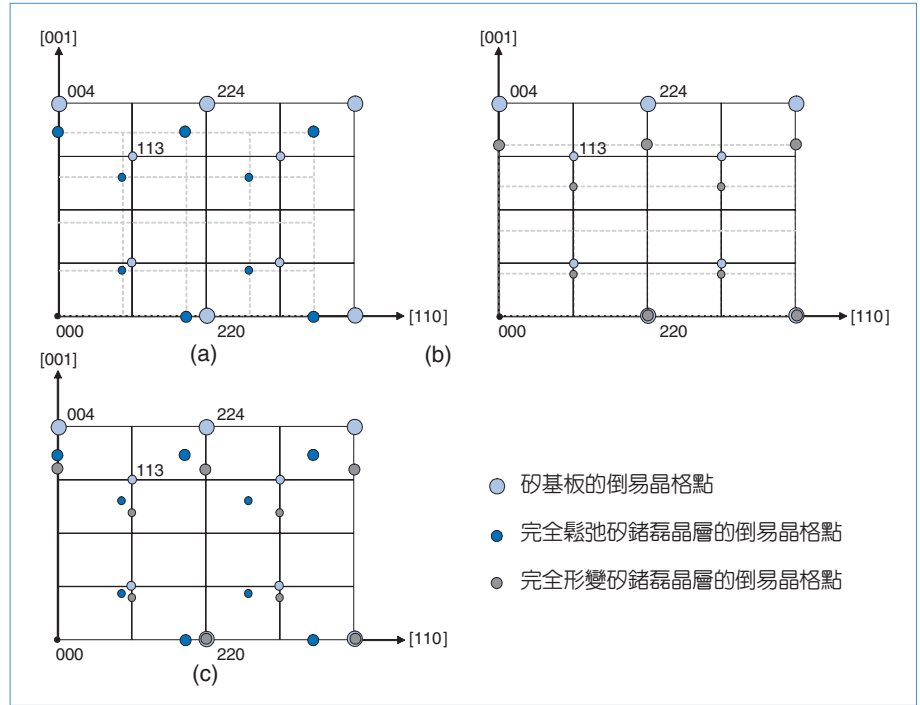
圖 2. (a) 為完全鬆弛矽鍺磊晶層 (L) 與矽基板 (S) 的實際晶格。(b) 為部分鬆弛矽鍺磊晶層的實際晶格。(c) 為完全形變矽鍺磊晶層與矽基板的實際晶格。(S：矽基板的晶格常數； $L_{\parallel}$ ：磊晶層水平的晶格常數； $L_{\perp}$ ：磊晶層垂直的晶格常數。)

層依舊為原先的三軸等效鑽石結構，水平與垂直方向的晶格常數大小相等，稱為完全鬆弛 (fully relaxed) 的矽鍺磊晶層，如圖 2(a) 所示。第二類是矽鍺磊晶層的水平方向晶體結構依照基板矽晶體結構排列，即矽鍺磊晶層的水平晶格產生壓縮的現象，根據晶體的彈性理論，水平晶格壓縮會導致垂直方向的彈性力，進而使得矽鍺磊晶層晶體結構沿垂直方向伸展，此種水平、垂直不對等的結構稱為完全形變 (fully strained) 的矽鍺磊晶層，如圖 2(c) 所示。最後一類是介於這兩極端之間的結構，我們稱為部分鬆弛或部分形變 (partial relaxed or strained) 的矽鍺磊晶層，如圖 2(b) 所示。

完全鬆弛的矽鍺磊晶層與矽基板於實空間中來看，磊晶層與基板具有一樣的原子排列結構，唯一的差異在於完全鬆弛的矽鍺磊晶層晶格常數大於矽基板晶格常數；在倒易空間中，磊晶層與基板各自成一組相似的週期倒易點陣，相較之下，磊晶層的倒易點陣間距較基板的倒易點陣間距小，即兩組週期倒易點陣有著相同排列方式，兩者只有等比例放大縮小的差異，如圖 3(a) 所示。完全形變的矽鍺磊晶層與矽基板於實空間中來看，兩者於水平方向上有相同晶格間距，矽鍺磊晶層於垂直方向上的晶

圖 3.

(a) 完全鬆弛矽鍺磊晶層與矽基板的倒易點陣。(b) 完全形變矽鍺磊晶層與矽基板的倒易點陣。(c) 部分鬆弛矽鍺磊晶層的倒易點介於相對應之完全鬆弛、完全形變矽鍺磊晶層倒易點之間。(倒易陣點的大小代表繞射訊號的強度)



格間距受形變影響而變大；在倒易空間中看來，磊晶層與基板各自成一組週期倒易點陣，相較之下，兩點陣上相對應的點位於同一垂直線上，即兩組倒易點陣具有相同水平間距，而磊晶層的垂直點陣間距較基板者小，即磊晶層倒易點陣為基板立方倒易點陣沿著垂直方向壓縮成長方形倒易點陣，如圖 3(b) 所示。部分鬆弛矽鍺磊晶層的倒易點則介於相對應之完全鬆弛、完全形變矽鍺磊晶層倒易點之間，如圖 3(c) 所示。不論磊晶成長的是形變層或鬆弛層，鬆弛程度的量測都相當重要，而唯有利用倒易空間圖譜分析技術才能精確地鑑定出異質磊晶薄膜的鬆弛程度。

理論上，完美的晶體結構在倒易空間中會形成一組類似迪拉克  $\delta$  函數所構成的點陣，就繞射觀點來看，只有與 Ewald 球相交的倒易點才会有繞射訊號。然而自然界中不存在有完美晶體，晶體缺陷、殘餘應力、晶面取向、薄膜晶體厚度、薄膜晶粒大小、缺陷密度都會造成繞射峰擴張而不再是類似迪拉克  $\delta$  函數，而不同晶體變化所造成的繞射峰擴張效應也有所不同，如圖 4 所示<sup>(11)</sup>。藉由 2D-RSM 對倒易空間掃描出圖譜，可描繪出晶體在二維倒易空間上的繞射強度分布情形，若僅對軸向

(on axial) 繞射峰作二維繞射訊號掃描，晶體不完美所造成的繞射效應會有耦合的現象，無法分辨各別效應對繞射訊號的影響；而當我們觀察非軸向 (off axial) 繞射峰時，各種不同晶體變化所造成繞射峰分布的改變，可以清楚地分離至不同方向上。故以 2D-RSM 在非軸向繞射點作區域掃描，藉由分析繞射峰強度分布並搭配倒易空間的概念，我們可以從中獲得多種磊晶結構特性。

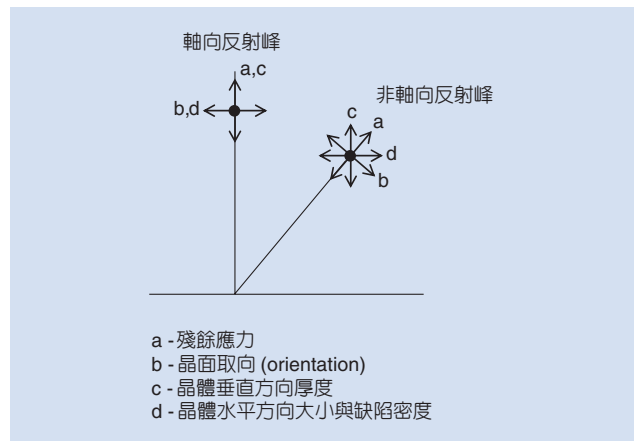


圖 4. 軸向與非軸向繞射點上，各種晶體變化所造成繞射峰分布的改變與其所對應的方向。

### 三、高解析度多晶三軸繞射儀與 X 光倒易空間圖譜的操作流程

進行 X 光倒易空間的圖譜分析時，要求單一波長 ( $\Delta\lambda/\lambda \sim 10^{-4}$ ) 和小角度發散 (a few arc second) 的 X 光束來提高倒易空間上的解析能力，而一般 X 光繞射儀的光學模組尚無法滿足此嚴苛的條件，故需要高解析度的多晶三軸繞射儀 (triple axis diffractometer)。圖 5 是 PANalytical X'Pert MRD 系統在量測 X 光倒易空間圖譜的光學模組構造。在入射光學模組 (incident optic modules) 部分，使用四次反射混合單光器 (4-bounce hybrid monochromator)，其是由拋物面人造多層膜鏡 (X-ray mirror) 與通道截止 (channel-cut) 鉻 (220) 單晶所組成，利用此特別的單光器，能過濾出小角度發散的  $K\alpha_1$  入射 X 光 (以銅靶為例)。此入射 X 光打到樣品產生的繞射束，在進入偵測器前，再經過二個以鉻 (220) 單晶構成的三次繞射 Bense-Hart 分析器 (analyzer)，此功用也是限制 X 光進入偵測器的發散角度，以提高偵測的解析度。傳統的雙晶繞射儀裝置是由兩塊晶體參與繞射，第一塊單晶通常用來做為單色光器，第二塊為被測之樣品，這種裝置的解析度只能用來獲取所謂之  $\omega-2\theta$  掃描或晶體搖擺曲線，並不能用於 X 光倒易空間的圖譜分析。其主要原因是倒易空間的繞射向量無法被精確地定義出來，由於缺少三次反射 Bense-Hart 分析器的存在，造成繞射束發散程度增加，進而導致在倒易空間圖譜量測時，探測單位成為沿 Ewald 球面的矩形區域，而

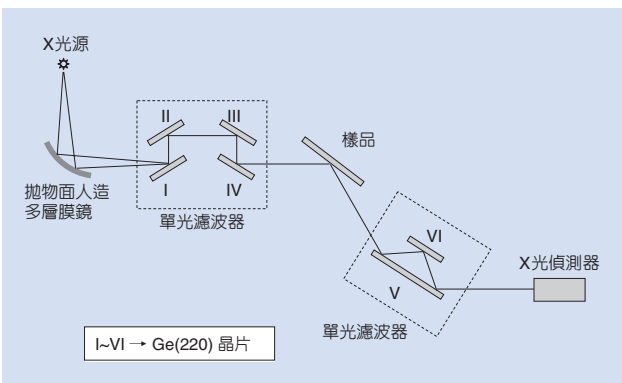


圖 5. PANalytical X'Pert MRD 高解析度多晶三軸繞射儀的光學模組構造。

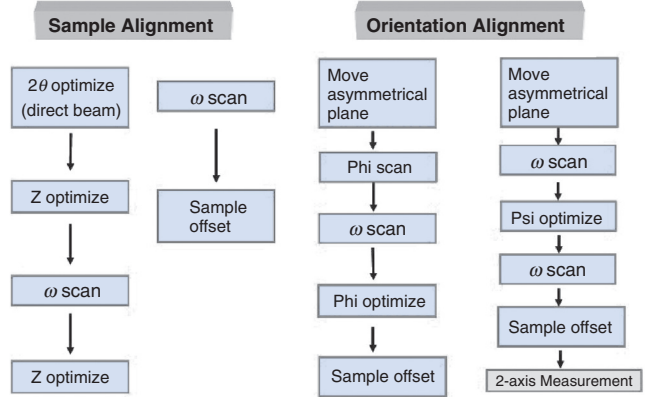


圖 6. PANalytical X'Pert MRD 高解析度多晶三軸繞射儀 2D-RSM 量測前的標準校正步驟。(ω 為入射 X 光與樣品平面的夾角，θ 為出射 X 光與繞射晶面的夾角)

不像以多晶三軸繞射儀成為近似點狀的探測，所以一般的雙晶繞射儀會造成倒易空間圖譜的發散失真，無法用於 X 光倒易空間的圖譜分析。

量測 X 光倒易空間圖譜之前，必須先了解此高解析度多晶三軸繞射旋角儀 (goniometer) 的各軸向方位，才能準確地校正軸向與非軸向的晶面。圖 6 為 2D-RSM 的標準校正步驟。此標準校正步驟包括兩部分，第一部分是樣品平面校正 (sample alignment)，目的是為了使入射 X 光、樣品中心平面與偵測器在同一平面上，真正地校正出樣品的平面。第二部分是樣品繞射晶面校正 (orientation alignment)，此繁複的校正步驟是為了分別要將偵測的軸向與非軸向晶面準確地校正出繞射晶面角度，這樣才能沿著此軸向與非軸向的晶面做高解析度的 X 光倒易空間的圖譜分析。所謂 2D-RSM，即是結合  $\omega-2\theta$  掃描與  $\omega$  掃描，將倒易空間上特定平面的繞射訊號描繪出來。 $\omega-2\theta$  掃描時，如圖 7 所示，偵測器於倒易空間中沿原點作放射狀單一特定軸向的掃描； $\omega$  掃描時，如圖 8 所示，偵測器以倒易空間原點為圓心、固定一特定半徑作圓周掃描；而 2D-RSM 掃描時，如圖 9 所示，則是每次改變些微  $\omega$  值 ( $\omega$  掃描) 的情況下，作一次  $\omega-2\theta$  掃描。利用此掃描方式，可以將倒易空間中之特定平面的單晶基板與磊晶薄膜某一繞射點強度分布描繪出來。

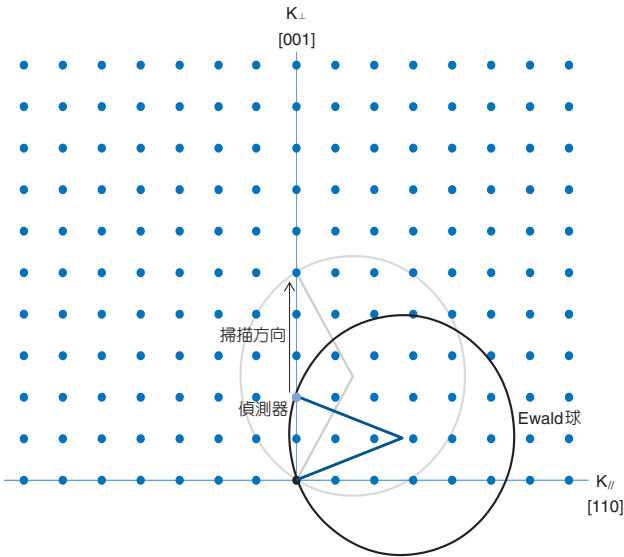


圖 7.  $\omega$ - $2\theta$  掃描，偵測器於倒易空間中沿原點作放射狀單一特定軸向的掃描。

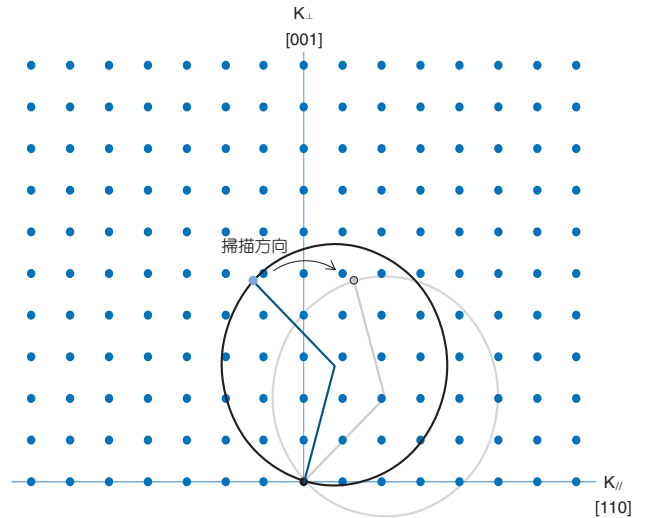


圖 8.  $\omega$  掃描，偵測器於倒易空間中以原點為圓心、固定一特定半徑作圓周掃描。

#### 四、應變數值分析原理

由於 2D-RSM 量測時記錄的訊號為不同角度下 X 光繞射強度的對應關係，座標軸為角度單位 (degree)，並非倒易空間的座標單位 (reciprocal lattice units, rlu)，因此量測結束後必須先做座標的轉換，才能得到實際倒易空間中某一特定平面上 X 光繞射強度的分布圖。以鑽石結構為範例，其倒易空間中兩點 (004) 與 (113) 所處的共平面如圖 10 所示，我們以 Ewald 球為角度座標，其半徑為倒易空間的參考座標單位，可推算出各繞射角度於倒易空間的座標值，而座標轉換公式如下：

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i$$

$$|\mathbf{K}_x| = |\mathbf{K}_{fx} - \mathbf{K}_{ix}|$$

$$= R \cos(2\theta - \omega) - R \cos(\omega) \rightarrow \text{倒空間上一點的 X 座標值}$$

$$|\mathbf{K}_y| = |\mathbf{K}_{fy} - \mathbf{K}_{iy}|$$

$$= R \sin(2\theta - \omega) + R \sin(\omega) \rightarrow \text{倒空間上一點的 Y 座標值}$$

其中  $K_i$ 、 $K_f$  與  $R$  分別代表入射波向量、散射波向量與 Ewald 球的半徑。圖 11 為座標轉換後之形變銻磊晶層與矽基板於倒易空間中非軸向 (113) 倒易晶格點附近的 2D-RSM 圖譜，基於晶格的不完美

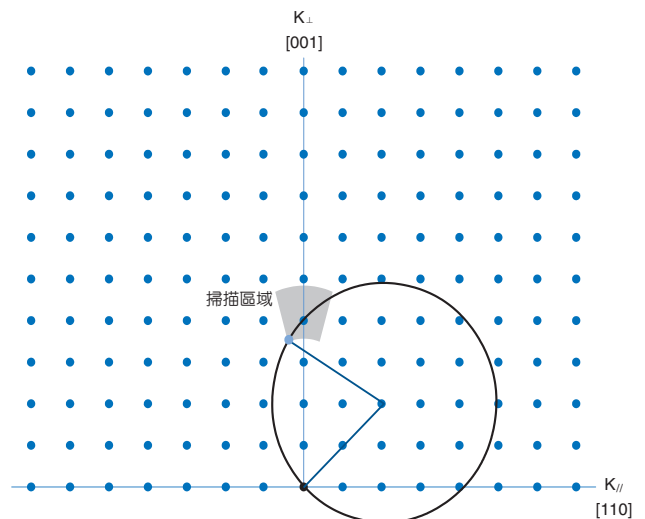


圖 9. 2D-RSM 掃描，偵測器在倒易空間特定平面上的某一繞射點附近掃描，灰色區域為掃描範圍。

與激發誤差，倒易空間上的繞射點呈現擴散狀，在圖中可明顯看出有兩繞射訊號較強的區域，分別對應至矽基板與形變銻磊晶層的繞射訊號。我們選擇繞射峰範圍內強度最強的點，作為基板與形變銻磊晶層繞射的代表點，進而可以得知形變銻磊晶層與基板的倒空間坐標值。如此一來，兩者之間的晶格不匹配率就可由下列式子算出<sup>(12)</sup>：

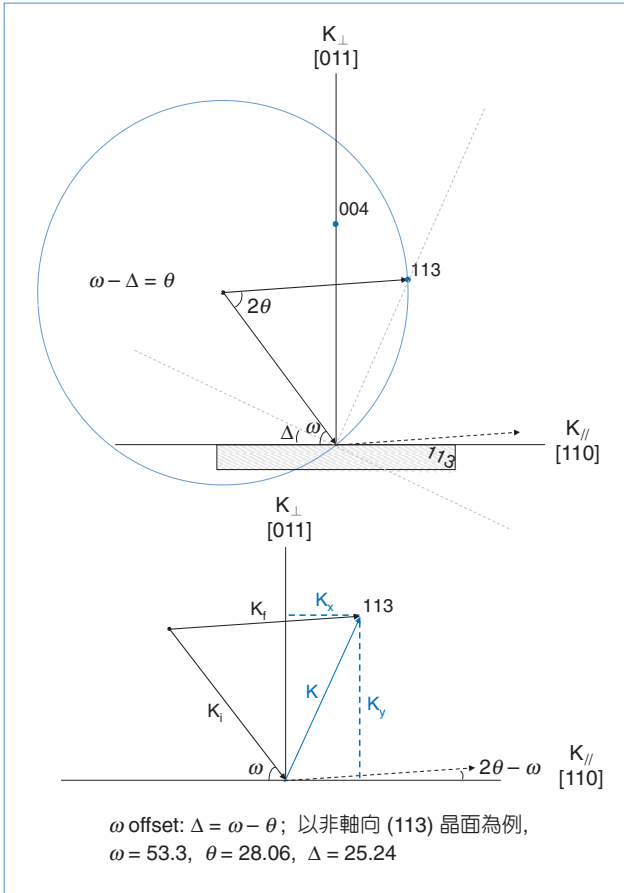


圖 10. 2D-RSM 圖譜的真實空間角度坐標轉換成倒易空間座標。

$$f_{\perp} = \frac{\Delta_{\perp}}{A_s} = \frac{A_{l\perp} - A_s}{A_s} = \frac{\frac{1}{K_{l\perp}} - \frac{1}{K_{s\perp}}}{\frac{1}{K_{s\perp}}} = \frac{K_{s\perp} - K_{l\perp}}{K_{l\perp}}$$

$$f_{\parallel} = \frac{\Delta_{\parallel}}{A_s} = \frac{A_{l\parallel} - A_s}{A_s} = \frac{\frac{1}{K_{l\parallel}} - \frac{1}{K_{s\parallel}}}{\frac{1}{K_{s\parallel}}} = \frac{K_{s\parallel} - K_{l\parallel}}{K_{l\parallel}}$$

$f$  代表晶格不匹配率， $\perp$ 、 $\parallel$  分別代表垂直、平行磊晶面方向， $A$ 、 $K$  分別代表實空間、倒易空間點距， $s$ 、 $l$  分別代表基板與磊晶層， $\Delta$  代表實空間基板與磊晶層點距差異。我們只要將倒易空間上同區域之基板與磊晶層繞射代表點的 X、Y 座標帶入上式，即可求得垂直、平行磊晶面方向的晶格不匹配率 (磊晶層 X、Y 座標分別是  $K_{l\parallel}$ 、 $K_{l\perp}$ ，基板 X、Y 座標等於  $K_{s\parallel}$ 、 $K_{s\perp}$ )。將  $f_{\perp}$ 、 $f_{\parallel}$  代入下列式子可算出等效晶格不匹配率 (equivalent lattices mismatch)<sup>(13)</sup>：

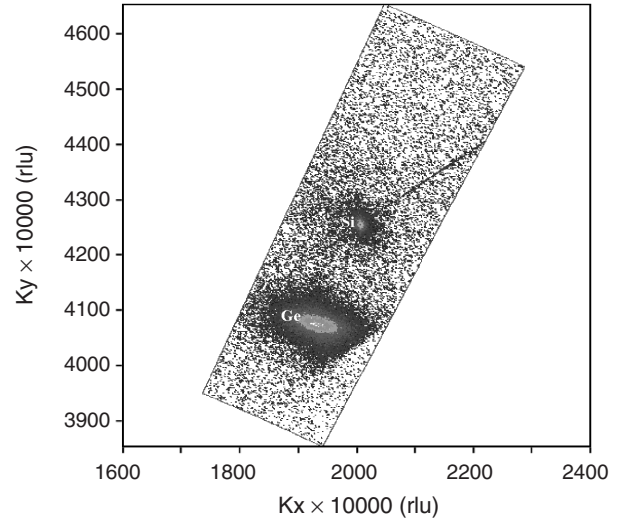


圖 11. 座標轉換後之形變鍺晶層與矽基板於倒易空間中，倒易晶格點 (113) 附近的 2D-RSM 圖譜。

$$f = (f_{\perp} - f_{\parallel}) \frac{1 - \nu}{1 + \nu} + f_{\parallel}$$

$\nu$  為 Poisson's ratio，不同材料與晶面方向有不同  $\nu$  值，以矽與鍺為例，矽 (004) 為 0.278，鍺 (004) 為 0.273，矽鍺則端看組成比例而定  $\nu$  值，依線性比例計算。磊晶層、基板之間的鬆弛度可藉由比較待測物與完全鬆弛磊晶層的晶格不匹配率而計算出來，其表示法如下：

$$\text{鬆弛程度} : R = \frac{A_{l\parallel} - A_s}{A_{\text{relaxed}} - A_s} = \frac{f_{\parallel}}{f}$$

故作完 2D-RSM 量測後，從圖譜中我們可以直接推算出水平與垂直晶格不匹配率，再藉由組成計算有效 Poisson's ratio，有效晶格不匹配率就可以推導出來，最後就可以算出磊晶層的鬆弛程度。

理論上我們只要量測非軸向繞射強度的分布，即可求得垂直或水平晶格不匹配程度與磊晶層組成比例 ( $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ )，進而推算出其鬆弛程度。但是實際磊晶過程中，磊晶層與基板常會有水平磊晶面角度偏差產生，如圖 12 所示，而這偏差會導致僅以非軸向繞射推算鬆弛程度時的誤差。為了除去量測上的誤差，我們必須藉由軸向繞射分布求得水平晶面

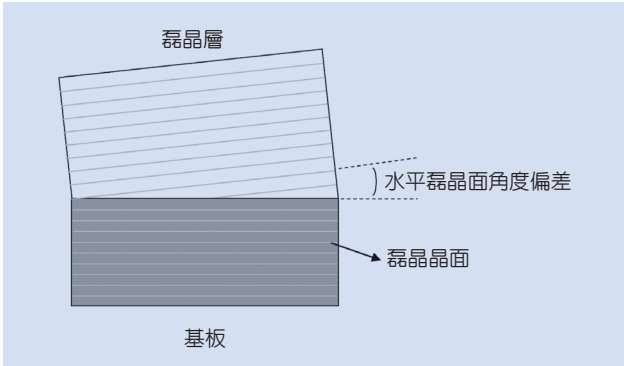


圖 12. 磊晶層與基板之間的磊晶晶面角度偏差。

偏差角度，修正磊晶層繞射於倒空間上的角度誤差。因此，以 2D-RSM 量測基板與磊晶層之間的晶格不匹配與鬆弛程度時，一般都會量測兩組繞射區域，軸向與非軸向各一組，如此搭配以求得較精確的磊晶層參數。

## 五、2D-RSM 鑑定形變矽鍺異質磊晶薄膜的實驗結果

圖 13 是以超高真空化學氣相沉積系統 (ultra high vacuum chemical vapor deposition, UHVCVD) 成長高品質 40 nm  $\text{Si}_{0.85}\text{Ge}_{0.15}$  異質磊晶薄膜的 2D-RSM 圖譜。由此非軸向倒易晶格點 (224) 的 X 光倒易空間圖譜中，可以發現單晶矽基材與矽鍺磊晶

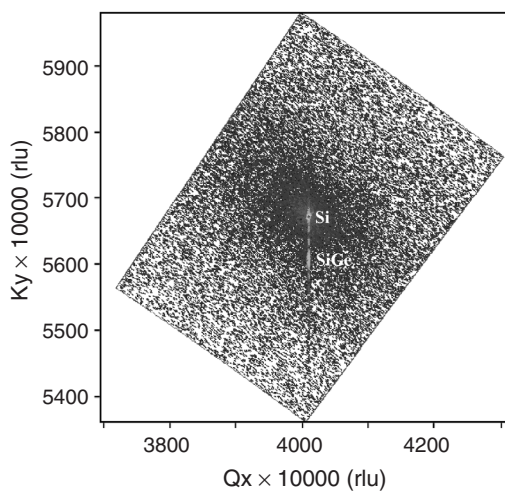


圖 13. 完全形變矽鍺異質磊晶於倒易空間中，倒易晶格點 (224) 附近的 2D-RSM 圖譜。

表 1. 利用 2D-RSM 圖譜鑑定不同形變鍺磊晶薄膜的晶格參數、相對晶格不匹配率與晶格應變鬆弛的程度。

樣品	$f_{\perp}$ (%)	$f_{\parallel}$ (%)	$f$ (%)	$R$ (%)
合成態鍺磊晶薄膜－厚度 15 nm	4.66	2.43	3.7	66
合成態鍺磊晶薄膜－厚度 30 nm	4.67	3.23	4.05	80
退火後鍺磊晶薄膜－厚度 15 nm	4.35	3.69	4.07	91
退火後鍺磊晶薄膜－厚度 30 nm	4.28	3.89	4.11	95

薄膜在水平方向倒空間繞射峰訊號值  $K_x$  幾乎相同，這證明此磊晶薄膜與單晶矽基材有高度的匹配程度。

另外，我們還可以在主要繞射峰訊號以外看到有數個條紋 (fringes) 的訊號，這證明此磊晶薄膜具有良好的結晶性。進一步以 PANalytical X'Pert Epitaxy 軟體直接分析此圖譜，可以得到此矽鍺磊晶薄膜的鬆弛程度約為 1%，我們幾乎可以將此樣品視為完全形變的矽鍺磊晶薄膜。另外，我們也嘗試在矽基材上製備高品質鍺磊晶薄膜，不同鍺磊晶薄膜厚度與退火處理 (RTA, 680 °C, 10 min) 後，以 2D-RSM 圖譜進行一系列的分析鑑定，結果如表 1 所示。

方向晶格常數與水平方向晶格不匹配率 ( $f_{\parallel}$ ) 將逐漸增大，進而使鬆弛程度 ( $R$ ) 從 66% 上升到 80%。此外，一般觀念認為退火處理後會造成磊晶薄膜完全鬆弛，事實上，此現象並不一定會發生，會造成這樣的誤解，主要是因為一般鑑定磊晶鬆弛程度的方式是採用簡單的雙晶繞射儀的搖擺曲線判斷。因此，唯有藉由 X 光倒易空間圖譜才能真正鑑定出磊晶鬆弛程度，從我們實驗結果證明，經退火處理後的鍺磊晶薄膜依然沒有達到完全鬆弛的程度。相關研究成果已發表於春季歐洲材料研討會 (European Materials Research Society, E-MRS 2006 Spring Meeting, 地點：法國尼斯)<sup>(15)</sup>。

## 六、結論

本文簡要介紹利用二維 X 光倒易空間圖譜技術 (2D-RSM) 鑑定形變矽鍺異質磊晶薄膜材料的原



理，包括為何需要利用高解析度多晶三軸繞射儀來完成 X 光倒易空間圖譜的原因與操作流程，另外也介紹應變數值分析的原理，包括在實空間中所量測到的角度單位如何轉換成倒易空間的座標單位，進而計算出平行與垂直基板的晶格常數、相對晶格不匹配率與晶格應變鬆弛的程度。最後以筆者在國家奈米元件實驗室應用 2D-RSM 鑑定不同形變矽鍺異質磊晶薄膜材料的實驗結果為例說明。期望能對有志從事形變矽鍺異質磊晶薄膜材料的研究人員，提供更精確的量測鑑定方式，不再只是利用傳統簡單的雙晶繞射儀來鑑定異質磊晶薄膜的材料。

## 誌謝

筆者感謝國立清華大學材料系徐統教授的指導與校正。

## 參考文獻

1. 余樹楨, 晶體之結構與性質, 渤海堂文化公司, 461 (1989).
  2. A. van der Lee, *Solid State Sci.*, **2**, 257 (2000).
  3. M. H. Cheng, T. C. Cheng, M. N. Chang, W. J. Huang, and M. K. Chung, *J. Vac. Sci. Technol. B.*, **25** (1), 147 (2007).
  4. 汪建民, 材料分析, 中國材料科學學會, 43 (1999).
  5. M. L. Lee, E. A. Fitzgerald, M. T. Bulsara, M. T. Currie, and A. Lochtefeld, *J. Appl. Phys.*, **97**, 011101 (2005).
  6. D. A. Antoniadis, I. Aberg, C. N. Chleirigh, O. M. Nayfeh, A. Khakifirooz, and J. L. Hoyt, *IBM J. Res. & Dev.*, **50**, 4 (2006).
  7. S. Fama, L. Colace, G. Masini, G. Assanto, and H. C. Luan, *Appl. Phys. Lett.*, **81**, 586 (2002).
  8. E. Koppensteiner, G. Bauer, H. Kibbel, and E. Kasper, *J. Appl. Phys.*, **76** (6), 3489 (1994).
  9. G. Bauer, J. Li, and E. Koppensteiner, *J. Crystal Growth*, **157**, 61 (1995).
  10. 施敏原著, 黃調元譯, 半導體元件物理與製作技術, 交大出版社, 537 (2002).
  11. 林文智, 科儀新知, **22** (2), 14, (2000).
  12. W. X. Ni, K. Lyutovich, J. Alami, C. Tengstedt, M. Bauer, and E. Kasper, *J. Crystal Growth.*, **227-228**, 756 (2001).
  13. J. Hornstra, and W. J. Bartels, *J. Crystal Growth.*, **44**, 513 (1978).
  14. M. H. Cheng, S. L. Hsu, T. C. Cheng, Y. P. Chang, H. M. Lin, W. J. Huang, and M. N. Chang, *The Research of High Quality Strain-relaxed Ge Thin Films by HRXRD*, European Materials Research Society (E-MRS 2006 Spring meeting), France: Nice (2006).
- 
- 鄭明欣先生為國立清華大學化學所碩士，現任國家奈米元件實驗室助理研究員。
  - 林宏旻先生為國立師範大學化學所碩士，現任國家奈米元件實驗室助理研究員。
  - 鍾明光先生畢業於國立海洋大學輪機工程系，現任 PANalytical 台灣分公司業務專案經理。
  - Ming-Hsin Cheng received his M.S. in chemistry from National Tsing Hua University. He is currently an assistant researcher o at National Nano Device Laboratories.
  - Hung-Min Lin received his M.S. in chemistry from National Taiwan Normal University. He is currently an assistant researcher at National Nano Device Laboratories.
  - Eddy Jones graduated from National Taiwan Ocean University. He is currently a manager in the PANalytical Company.