

学校编码: 10384

分类号\_\_\_\_\_密级\_\_\_\_\_

学 号: 19820071152287

UDC\_\_\_\_\_

厦 门 大 学

硕 士 学 位 论 文

**Si 基 Ge/SiGe 异质结构设计、外延及发光性质研究**

**Design and epitaxy of Si-based Ge/SiGe heterostructures  
and their optical properties**

陈阳华

指导教师姓名: 李 成 教 授

专业名称: 凝 聚 态 物 理

论文提交日期: 2010 年 5 月

论文答辩日期: 2010 年 6 月

学位授予日期: 2010 年 月

答辩委员会主席: \_\_\_\_\_

评 阅 人: \_\_\_\_\_

2010 年 月

## 厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下,独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果,均在文中以适当方式明确标明,并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范(试行)》。

另外,该学位论文为( )课题(组)的研究成果,获得( )课题(组)经费或实验室的资助,在( )实验室完成。(请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称,未有此项声明内容的,可以不作特别声明。)

声明人(签名):

年 月 日

## 厦门大学学位论文著作权使用声明

本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文（包括纸质版和电子版），允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于：

1. 经厦门大学保密委员会审查核定的保密学位论文，  
于 年 月 日解密，解密后适用上述授权。

2. 不保密，适用上述授权。

（请在以上相应括号内打“√”或填上相应内容。保密学位论文应是已经厦门大学保密委员会审定过的学位论文，未经厦门大学保密委员会审定的学位论文均为公开学位论文。此声明栏不填写的，默认为公开学位论文，均适用上述授权。）

声明人（签名）：

年 月 日

## 摘 要

Si 基 Ge 材料具有高的载流子迁移率、在光通信波段大的吸收系数，与成熟的 Si 微电子工艺兼容等特点，被认为是集成光电子器件和下一代微电子器件的重要材料之一。然而，Ge 材料的间接带特性成为光子器件，特别是发光器件所面临的巨大挑战。本论文希望通过研究应变调控和低维量子限制效应人工裁剪能带结构，结合调制掺杂技术和载流子填充效应，设计制备高效发光的 Si 基 Ge/SiGe 异质结构材料，为实现 Si 基发光器件打下基础。

本文采用低温 Ge 缓冲层技术在 UHV/CVD 系统上外延出高质量的 Si 基 Ge 薄膜及 Ge/SiGe 量子阱结构，通过对 Ge/SiGe 异质结构能带分析，设计并制备出 Si 基张应变 Ge/SiGe 量子阱结构、调制掺杂 Ge/SiGe 异质结构及谐振腔结构，以提高 Ge 直接带发光效率。本论文的主要工作和创新点包括：

1. 采用低温 Ge 缓冲层技术在 Si 衬底上外延出高结晶质量 Ge 薄膜。较系统地研究了低温 Ge 缓冲层和 Ge/SiGe 多层结构在降低 Ge 外延层的位错密度、提高其表面平整性和抑制 Si-Ge 互扩散等方面的作用机理。制备的 Si 基 Ge 薄膜表面粗糙度约为 1nm，1 $\mu$ m 厚的 Ge 薄膜 XRD 峰值半高宽为 94 arc sec。

2. 设计并外延出 Si 基张应变 Ge 薄膜以及 Ge/Si<sub>0.15</sub>Ge<sub>0.85</sub> I 型多量子阱结构，测试结果表明外延的 Ge 薄膜及其 Ge/SiGe 多量子阱具有良好的结晶质量。研究了张应变对 Ge 能带结构的调制效应，通过对不同厚度 Ge 量子阱室温光致发光谱的测试，首次直接证实了 Ge 量子阱直接带跃迁的量子限制效应。

3. 设计并外延出 Si 基调制掺杂 Ge/SiGe 异质结构，比较了 p 型掺杂和 n 型掺杂对 Ge 直接带发光的增强效果，发现当 n 型掺杂浓度为  $5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$  时，Ge 的直接带隙发光强度提高了 1.5 倍。制备了基于 SOI 衬底的张应变 Ge 薄膜谐振腔结构，观测到谐振腔对 Ge 直接带光致发光的调制效应，将其发光峰值强度提高了 4 倍以上，积分强度提高了 1.5 倍，发光峰的峰值半高宽从 200nm 减小到 76nm，与模拟结果符合的很好。

关键词：低温 Ge 缓冲层技术；Si 基 Ge 外延材料；Si 基 Ge/SiGe 异质结构；室温光致发光

## Abstract

Si-based Ge is considered to be one of the promising materials for integration of photonic devices and the next-generation of microelectronic devices, due to its high carrier mobility, large absorption coefficient in optical communication band and compatible with silicon microelectronic technology. However, it is a great challenge to realize Si-based Ge photonic devices, especially for light emitting applications, due to its nature of indirect band gap. With tailoring the band structure artificially by strain engineering and low-dimensional quantum confinement effect, combined with modulated-doping and carrier filling effect, high efficiency light-emitting Si-based Ge/SiGe heterostructures are expected, which may be benefit for the monolithic integration of Si-based photonic devices.

In this thesis, high-quality Ge films and Ge/SiGe quantum wells are prepared with low-temperature Ge buffer technique in UHV/CVD system. Based on the analysis and simulation of the band structures, the Ge/SiGe heterostructures including Ge/SiGe quantum wells, modulated-doping Ge/SiGe and resonator are designed and prepared to improve the direct bandgap photoluminescence of Ge. The main works are summarized as follows:

1. High crystal quality Si-based Ge films are epitaxially grown using low-temperature (LT) Ge buffer techniques. The surface root-mean-square (RMS) of the Si-based Ge film is about 1nm, and the X-ray diffraction peak of 1 $\mu$ m-Ge is symmetric with a full width at half maximum (FWHM) of 94 arc sec. The role of LT Ge buffer in reducing dislocation density, flattening the surface and inhibiting Si-Ge inter-diffusion is systematically studied.

2. Si-based tensile-strained Ge/Si<sub>0.15</sub>Ge<sub>0.85</sub> Type I multi-quantum wells (MQWs) with uniform periodicity and good crystal quality are designed and prepared. The effects of tensile strain on the band structure reconstruction and direct band transition

enhancement in Ge has been studied. Quantum confinement direct bandgap photoluminescence has been demonstrated at room temperature for the first time.

3. The enhancement of Ge direct bandgap photoluminescence in the  $\delta$ -doped Ge/SiGe heterostructure on Si substrate is demonstrated with n-type and p-type doping in the SiGe layers. The peak intensity of Ge direct bandgap photoluminescence is enhanced by 1.5 times with n-doping concentration of  $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . Resonant cavity with tensile-strained Ge is constructed based on SOI substrate, and the modulation of Ge direct bandgap photoluminescence is observed. The luminescence peak intensity with Ge on SOI substrate as compared to the Si substrate case is enhanced by 4-fold and the FWHM of the maximum peak is reduced from 200nm to 76nm. More interesting, the absolute amount of emitted light is enhanced by a factor of 1.5.

Key words: low-temperature Ge buffer layer; Si-based Ge epilayer; Si-based tensile-strained Ge/SiGe heterostructures; room temperature photoluminescence

# 目 录

<b>第一章 绪论</b> .....	<b>1</b>
1.1 研究背景和意义 .....	1
1.2 Si 基 Ge/SiGe 异质结构发光性质的研究进展.....	2
1.3 本论文主要工作 .....	7
参考文献 .....	8
<b>第二章 Si 基 Ge/SiGe 薄膜材料外延及表征技术</b> .....	<b>12</b>
2.1 Si 基 Ge 薄膜材料外延生长方法与技术 .....	12
2.2 超高真空化学气相沉积 (UHV/CVD) 系统.....	15
2.3 Si 基 Ge 异质结构材料表征技术 .....	17
参考文献 .....	22
<b>第三章 Si 基 Ge/SiGe 异质结构设计</b> .....	<b>26</b>
3.1 基于直接带跃迁的 Ge 发光材料设计 .....	26
3.2 Si 基 Ge/Si <sub>0.15</sub> Ge <sub>0.85</sub> I 型量子阱结构设计 .....	30
3.3 Si 基调制掺杂 Ge/SiGe 异质结构设计.....	32
3.4 基于 SOI 衬底的谐振腔结构设计 .....	34
3.5 本章小结 .....	37
参考文献 .....	38
<b>第四章 Si 基 Ge/SiGe 异质结构外延及发光性质</b> .....	<b>40</b>
4.1 Si 基 Ge/SiGe 异质结构材料外延 .....	40
4.1.1 低温 Ge 缓冲层在 Si 基 Ge 外延过程中的作用.....	40
4.1.2 Si 基 Ge/SiGe 量子阱外延生长及结构表征.....	46
4.2 Si 基 Ge/SiGe 异质结构发光性质 .....	50
4.2.1 Ge 材料的间接带跃迁和直接带跃迁发光 .....	50
4.2.2 张应变作用下的 Ge 直接带跃迁发光 .....	52
4.2.3 Ge 直接带跃迁的量子限制效应.....	53

4.2.4 调制掺杂异质结构增强 Ge 直接带跃迁发光 .....	58
4.2.5 谐振腔结构对 Ge 直接带跃迁发光的调制 .....	60
<b>4.3 本章小结</b> .....	<b>63</b>
<b>参考文献</b> .....	<b>64</b>
<b>第五章 总结与展望</b> .....	<b>66</b>
<b>附录 硕士期间科研成果</b> .....	<b>67</b>
<b>致 谢</b> .....	<b>68</b>

厦门大学博硕士论文摘要库



# Contents

<b>Chapter 1 Introduction</b> .....	<b>1</b>
1.1 Background and motivation .....	1
1.2 Progress of luminescence in Si-based Ge/SiGe heterostructures .....	2
1.3 Main works in this thesis .....	7
References .....	8
<b>Chapter II Epitaxy and characterization of Si-based Ge film</b> .....	<b>12</b>
2.1 Growth methods of Si-based Ge film .....	12
2.2 Ultra-high vacuum chemical vapor deposition (UHV/CVD) system .....	15
2.3 Characterization techniques of Si-based Ge heterostructures .....	17
References .....	22
<b>Chapter III Design of Si-based Ge/SiGe heterostructures</b> .....	<b>26</b>
3.1 Si-based Ge luminescence due to direct band transitions .....	26
3.2 Design of Si-based Ge/Si <sub>0.15</sub> Ge <sub>0.85</sub> Type I quantum wells .....	30
3.3 Design of Si-based $\delta$ -doped Ge/SiGe heterostructures .....	32
3.4 Design of SOI-based resonator .....	34
3.5 Conclusions .....	37
References .....	38
<b>Chapter IV Growth and luminescence of Si-based Ge/SiGe heterostructures</b> .....	<b>40</b>
4.1 Epitaxy of Si-based Ge/SiGe heterostructures .....	40
4.1.1 Role of low-temperature Ge buffer in the epitaxy of Si-based Ge film .....	40
4.1.2 Epitaxy and characterization of Si-based Ge/SiGe quantum wells .....	46
4.2 Photoluminescence of Si-based Ge/SiGe heterostructures .....	50
4.2.1 Indirect and direct bandgap photoluminescence from Ge .....	50
4.2.2 Direct bandgap photoluminescence in Si-based tensile-strained Ge .....	52

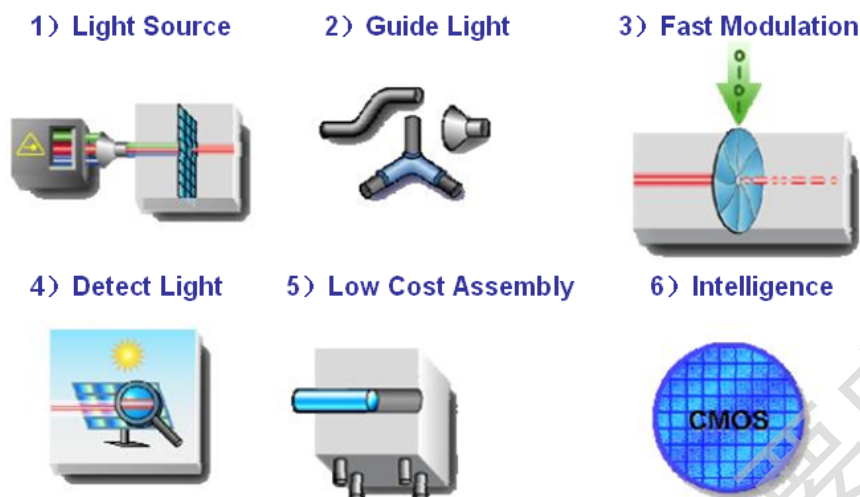
4.2.3 Quantum confinement effect of Ge direct band transition .....	53
4.2.4 $\delta$ -doping enhanced direct bandgap photoluminescence from Ge .....	58
4.2.5 Modulation of direct bandgap photoluminescence from Ge on SOI substrate.....	60
<b>4.3 Conclusions .....</b>	<b>63</b>
<b>References .....</b>	<b>64</b>
<b>Chapter V Summary and prospects .....</b>	<b>66</b>
<b>Appendix Awards and publication list .....</b>	<b>67</b>
<b>Acknowledgment.....</b>	<b>68</b>

## 第一章 绪论

### 1.1 研究背景和意义

Si 基微电子技术的发展是 20 世纪最引人注目的高新技术成就之一。根据 Moore 定律：集成电路可容纳的晶体管数目，约每隔 18 个月便会增加一倍，同时性能也将提升一倍。目前，以 32nm 为特征线宽的深亚微米集成电路工艺已经进入了工业化阶段，随着集成电路特征线宽的进一步减小，微电子技术的发展遇到了诸多限制和挑战。一方面，微电子器件性能的不断提高依赖于按比例不断缩小器件的尺寸，特征线宽已经越来越接近其物理极限；另一方面，金属导线互连引起的信号延迟、器件的功耗和散热也制约着器件尺寸的进一步缩小。与此同时，随着信息技术向数字化、网络化的迅速发展，超大容量信息传输、超快实时信息处理和超高密度信息存储已成为信息技术追求的目标，而单纯采用微电子器件已无法完全满足这些要求。Si 基光子学有望打破微电子学所面临的诸多局限并扩展其性能，在光互连、光计算和光通信领域展现出巨大的商业应用前景，引起了世界范围内学术界和产业界的特别关注<sup>[1-6]</sup>。

Si 基光子学的研究内容如图 1-1 所示，主要包括光发射、光传输、光调制、光探测、光耦合与封装等，其最终目标是实现 Si 基光子器件集成。近几十年来，Si 基光子学的研究得到了广泛开展，一些关键器件如光波导<sup>[7]</sup>、光调制器<sup>[8]</sup>、光探测器<sup>[9]</sup>等已经取得重大突破，如 Si 基 Mach-Zehnder interferometer (MZI) 电光调制器的带宽已达 40 GHz 以上<sup>[8]</sup>，Si 基 Ge p-i-n 光电探测器的带宽可达 40 GHz 以上<sup>[9]</sup>，在波长 1.55 $\mu\text{m}$  处的响应度高达 1A/W，可与 III-V 族材料制备的器件相比拟。然而，Si 基发光器件的发展却相对缓慢，其最主要的原因是 Si 属于间接带隙材料，发光效率比直接带隙化合物半导体小 5~6 个数量级，实现高效发光器件面临着巨大的挑战。

图 1-1 Si 基光电子器件与集成<sup>[10]</sup>

为了实现 Si 基光源这一伟大梦想，全球科学家开展了长期而深入的研究工作，已经取得了一些令人鼓舞的成就。2000 年，意大利科学家 L. Pavesi 在离子注入  $\text{SiO}_2$  基质所形成的纳米硅结构中观察到了光增益<sup>[11]</sup>。2005 年，英特尔公司采用基于低损耗单模光波导结构，实现了光泵浦全硅喇曼连续激光<sup>[12]</sup>。2006 年，英特尔公司和美国加州大学圣芭芭拉分校的研究人员采用 AlGaInAs-silicon 电泵混合激光器结构，实现了 Si 激光器在室温下的连续工作<sup>[6]</sup>。另外，多孔硅<sup>[13]</sup>、掺铟硅<sup>[14]</sup>、纳米硅<sup>[15]</sup>以及  $\beta\text{-FeSi}_2$ <sup>[16]</sup>也表现出良好的光致发光及电致发光特性，但是高效的电泵激光依然无法完全实现。国内的中科院半导体所、厦门大学、北京大学、南京大学、浙江大学、南开大学等单位在纳米硅、多孔硅、掺铟硅、硅基杂质材料和缺陷、硅基化合物材料、SiGe/Si 量子阱材料等的制备及发光特性的研究等方面也开展了大量工作并取得一定进展。然而，目前硅基光源问题依然没有完全解决。

## 1.2 Si 基 Ge/SiGe 异质结构发光性质的研究进展

近年来，有关 Si 基 Ge 薄膜发光器件的理论与实验工作得到了广泛而深入的开展。Ge 虽然与 Si 同属于间接带材料，然而其室温下直接带带隙为 0.8 eV，仅比间接带隙大 0.136eV，而且 Ge 的能带结构容易通过张应变和 n 型掺杂来调控，

使其变为准直接带材料，极大地提高辐射复合几率，将发光波长调制在光通信和光互连波段（ $1.55\mu\text{m}$ ），具有准直接带特性的 Ge 材料有望成为增益介质，实现光激射<sup>[17]</sup>；此外，Ge 器件的制作工艺几乎与 Si CMOS 工艺完全兼容，不仅易于与其它光电器件实现片上集成，而且制作成本低。鉴于以上几个优点，Si 基外延 Ge 薄膜被认为是未来 Si 基片上集成激光器最有希望的材料之一。

理论计算表明<sup>[18]</sup>对 Ge 材料施加张应变和高浓度的载流子注入可以达到与 III-V 材料相比拟的增益系数。法国的 Kurdi 小组<sup>[19]</sup>在研究体 Ge 和绝缘体上 Ge 的光致发光现象时发现，发光峰来源于 Ge 的直接带跃迁，n 型掺杂能够增强光致发光峰的强度，并且掺杂浓度越高，发光峰越强。基于在外延 Ge 薄膜中引入张应变和 n 型掺杂，麻省理工学院 Kimerling 小组报道了 Si 基 Ge 薄膜室温下直接带跃迁的光致发光谱<sup>[20]</sup>和电致发光谱<sup>[21]</sup>。与此同时，中国科学院半导体研究所的成步文小组<sup>[4]</sup>报道了  $p^+ \text{-Ge}/i\text{-Ge}/n^+ \text{-Si}$  异质结电致发光管，东京大学的 Lim<sup>[22]</sup>采用微环结构实现了室温下 Ge 直接带跃迁的共振增强，斯坦福大学的 Cheng<sup>[23]</sup>报道了  $n^+ \text{-Ge}/p\text{-Ge}$  同质结电致发光器件，如图 1-2。这些开创性的成果照亮了通往 Si 基光电集成的光辉道路。

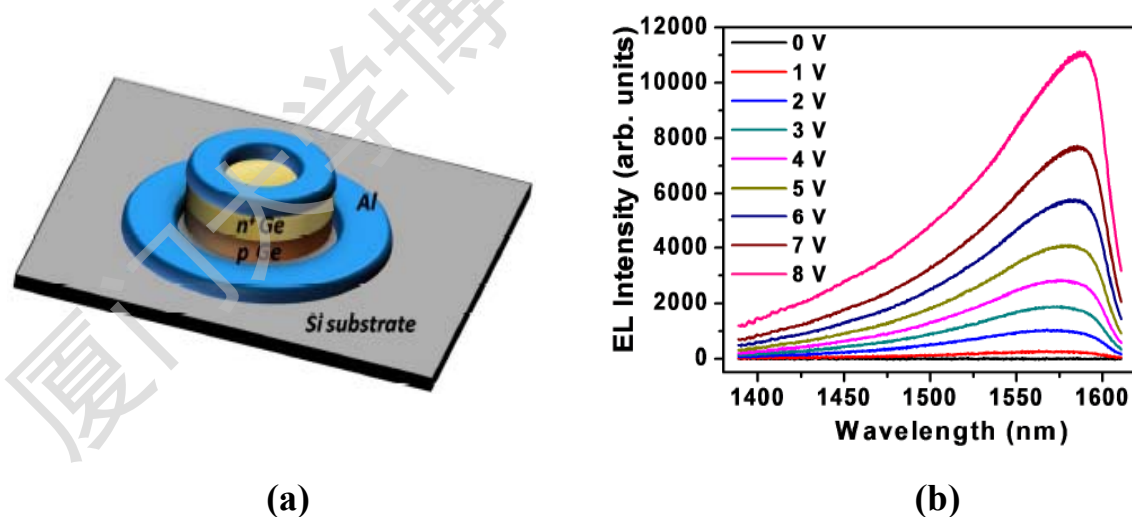


图 1-2  $n^+ \text{-Ge}/p\text{-Ge}$  同质结 LED<sup>[23]</sup>

(a) 器件结构示意图 (b) 器件的室温 EL 谱

2010年3月,麻省理工学院 Kimerling 小组<sup>[2]</sup>在 Opt.Lett.上报道了 Si 基 Ge 薄膜的光致激射。这一鼓舞人心的结果表明张应变 Ge 薄膜是极具前景的 Si 基片上集成光源材料,遗憾的是 Si 基 Ge 电致激光器依然未研制成功,主要原因是尽管采用张应变和 n 型掺杂对能带结构进行了调制,得到了 Ge 的直接带跃迁发光,但是发光效率依然偏低,加之自由载流子吸收损耗严重,难以产生足够大的增益。Si 基高效 Ge 激光器的相关工作还需要深入研究,发掘出更加高效的结构。

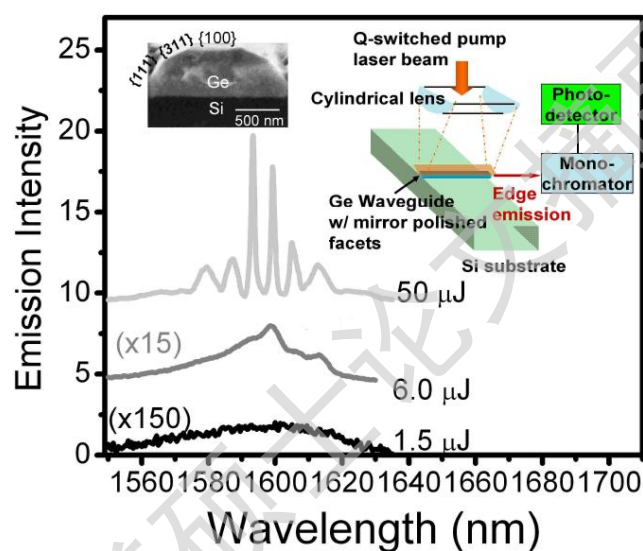


图 1-3 光波导结构的室温光致激射<sup>[2]</sup>

众所周知,异质结以其独特的电学和光学性能,在光电子器件的诸多领域发挥了关键性的作用。追溯 III-V 族半导体激光器的发展史,异质结在半导体激光器发展历程中起到了极其重要的作用。世界上第一台半导体激光器诞生于 1962 年,当时采用的结构是 GaAs 同质 p-n 结<sup>[24]</sup>,这种结构的激光器阈值电流密度达  $10^5 \text{ A/cm}^2$ ,因此只能在 77K 的液氮温度和脉冲状态下工作。1967 年出现的单异质结激光器凭借其异质结势垒的阻挡作用,使得阈值电流降低了一个量级,实现了室温下的脉冲工作。1970 年,双异质结激光器结构的出现将阈值电流密度又降低了一个量级,并实现了室温下的连续工作<sup>[25]</sup>。此后不久,在 1978 年研制出量子阱激光器。量子阱激光器通过将窄带隙超薄层夹在两个宽带隙势垒薄层之间,有源层的厚度减少到同电子德布罗意波长相比拟的量级(约为 10 nm),使得载流子在量子阱中高度局域化而形成自由电子气,提高了注入有源层内载流子的利用

率，进一步降低了阈值电流密度<sup>[26]</sup>。如此观之，Si基高效光源乃至激光器的实现，异质结构极有可能成为关键性的突破口。

量子阱是异质结中最具代表性的一种结构。对于SiGe材料形成的量子阱，其能带结构主要有两种：一种是电子和空穴被束缚在同一层材料中的I型量子阱；另一种是电子和空穴被束缚在不同的材料中的II型量子阱<sup>[27]</sup>，如图1-4所示。

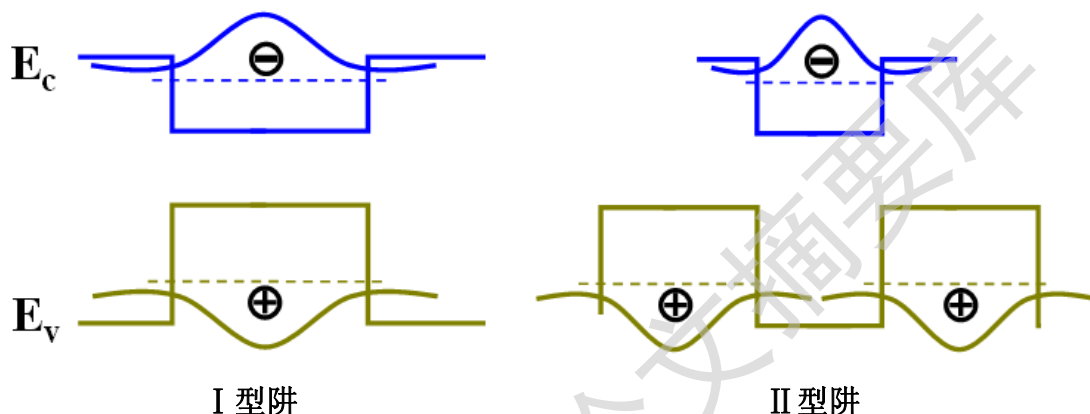


图 1-4 I 型和 II 型量子阱能带示意图

I型量子阱比II型量子阱有着更大的波函数交叠率和振子强度<sup>[28,29]</sup>，因而更有利于发光效率的提高。在Si衬底上外延的Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>量子阱结构，当Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>层的Ge组份 $x < 0.3$ 时，量子阱结构为I型。这种量子阱的光致发光虽然取得一定的成效<sup>[30][31]</sup>，但突破不大，主要原因是：一方面，该异质结带阶主要集中在价带，对空穴限制作用较强，而导带的带阶一般都小于30meV，对电子的限制作用很弱，对于靠局域激子发光的量子阱结构，其效率受到严重的制约；另一方面，理论上对于在Si衬底上生长低Ge组份的SiGe量子阱，其能带结构存在争议，因此很难完全阐释其发光机理<sup>[32-34]</sup>。在Ge衬底上外延的Ge/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>量子阱结构，当Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>层的Ge组份 $x > 0.7$ 时，量子阱结构为I型<sup>[35]</sup>。这种量子阱的异质结带阶较为平均地分布于导带和价带，可以同时电子和空穴形成有效的限制作用，因而近年来，高Ge组份弛豫缓冲层上的Ge/SiGe I型量子阱结构逐渐引起各国研究人员的广泛关注。

2005年，Yu-Hsuan Kuo等人<sup>[36]</sup>及S.Tsujino等人<sup>[37]</sup>的研究小组在Si<sub>0.15</sub>Ge<sub>0.9</sub>的弛豫衬底上制备出Ge/Si<sub>0.1</sub>Ge<sub>0.85</sub> I型多量子阱，观测到Ge量子阱的直接带跃迁电吸收谱，并制作出电光调制器。2008年，M.Bonfanti等人<sup>[39]</sup>采用Ge/Si<sub>0.1</sub>Ge<sub>0.85</sub>

I 型多量子阱结构, 实现了 Ge 量子阱直接带隙的低温光致发光。2009 年, C.Lange 等人<sup>[39]</sup>在 Ge/SiGe I 型多量子阱结构中, 观测到飞秒级的载流子粒子数反转。然而, 目前对于 Ge/SiGe I 型量子阱室温发光特性的研究却相对缓慢, 其主要原因是能带优化和材料制备的难度较高。本文将从理论上设计出高发光效率的张应变 Ge/SiGe I 型量子阱结构, 从实验上实现高质量 Ge/SiGe I 型量子阱的外延, 提高 Si 基 SiGe 材料的发光效率。我们相信, 开展关于 Ge/SiGe I 型量子阱结构的研究工作, 对探索高效 Si 基发光器件具有重要的学术价值和现实意义。

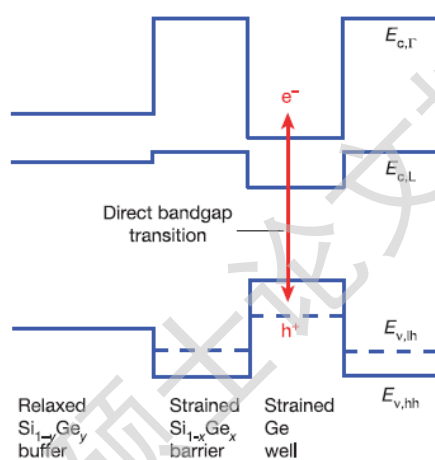


图 1-5  $\text{Si}_{0.15}\text{Ge}_{0.85}$  虚衬底上外延 Ge/SiGe I 型量子阱的能带示意图<sup>[36]</sup>

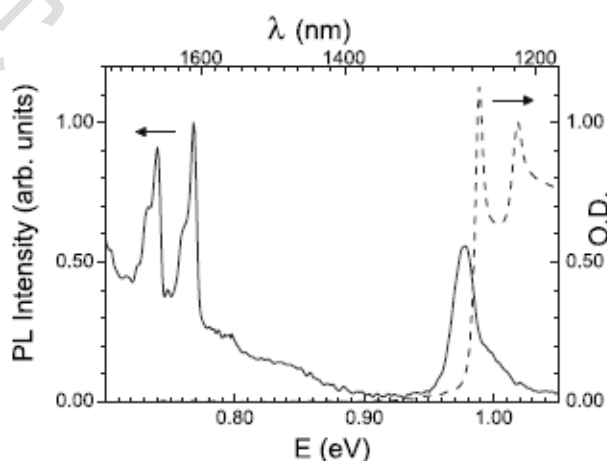


图 1-6  $\text{Si}_{0.15}\text{Ge}_{0.9}$  虚衬底上外延 Ge/Si<sub>0.1</sub>Ge<sub>0.85</sub> I 型多量子阱在温度为 2K 时的光致发光谱<sup>[38]</sup>



Degree papers are in the "[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)". Full texts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to [etd@xmu.edu.cn](mailto:etd@xmu.edu.cn) for delivery details.

厦门大学博硕士学位论文摘要库