

文章编号: 1673-2812(2009)01-0146-04

Si_{0.75}Ge_{0.25} 虚衬底上应变补偿 Si/Si_{0.62}Ge_{0.38} 量子阱发光

廖凌宏¹, 周志文¹, 李 成¹, 陈松岩¹, 赖虹凯¹, 余金中², 王启明²

(1. 厦门大学物理系, 福建 厦门 361005; 2. 中国科学院半导体研究所集成光电子学国家重点实验室, 北京 361005)

【摘要】 由于 Si/SiGe 异质结构的带阶差主要发生在价带, 为实现高效率的发光, 本文从理论上设计了在硅基 Si_{1-x}Ge_x 虚衬底上外延应变补偿的 Si/Si_{1-y}Ge_y ($y > x$) 量子阱的能带结构, 将量子阱对电子的限制势垒提高到 100meV 以上。在实验上, 采用 300℃ 生长的 Ge 量子点插入层, 制备出薄的 SiGe 弛豫缓冲层(虚衬底), 表面 Ge 组份达到 0.25, 表面粗糙度小于 2nm, 弛豫度接近 100%。在我们制备的 SiGe 缓冲层上外延了应变补偿 SiGe/Si 多量子阱结构, 并初步研究了其发光特性。

【关键词】 低维无机非金属材料; 量子阱; 光致发光谱; 弛豫缓冲层

中图分类号: O472 文献标识码: A

Luminescence of Strain Compensated Si/Si_{0.62}Ge_{0.38} Quantum Well Grown on Si_{0.75}Ge_{0.25} Virtual Substrate

LIAO Ling-hong¹, ZHOU Zhi-wen¹, LI Cheng¹, YU Jin-zhong², WANG Qi-ming²

(1. Xiamen University, Xiamen 361005, China; 2. State Key Laboratory of Integrated Optoelectronics, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China)

【Abstract】 In this paper, band structures of strain compensated Si/Si_{1-y}Ge_y ($y > x$) quantum well grown on Si_{1-x}Ge_x virtual substrate was design to enlarge the conduction band offset up to 100meV for improving luminescence. The fully strain-relaxed Si_{0.75}Ge_{0.25} virtual substrate was prepared by inserting a low-temperature Ge islands layer in ultra-high vacuum chemical deposition. The root-mean-square surface roughness of the virtual substrate is less than 2nm. The luminescence of the strain compensated Si/SiGe quantum well on the virtual substrate was investigated.

【Key words】 low dimensional inorganic nonmetallic material; quantum well; luminescence; relaxed buffer layer

1 引言

硅基 SiGe 异质结构因其优良的物理性质, 与成熟的硅工艺相兼容, 成为制备高性能 Si 微电子和光电子器件的重要材料。低位错高弛豫度 SiGe 缓冲层衬底的制备, 对 Si 基器件的电学和光学特性至关重要。在 SiGe 弛豫缓冲层上生长的应变 Si 层, 可以极大提高电子迁移率^[1], 也可以得到比较好的发光特性^[2]。

由于 Si/SiGe 异质结构的带阶差主要发生在价带, 因而对电子的束缚作用较弱, 为了实现高效率的发光, 在硅基 Si_{1-x}Ge_x 虚衬底上外延应变补偿的 Si/Si_{1-y}Ge_y ($y > x$) 量子阱结构, 可以进一步增强量子阱对电子和空穴的限制, 在理论上能够提高发光效率^[3], 但在实验方面的证实较少^[4]。在本文中, 利用低温 Ge 缓冲层的生长条件, 制备出薄的表面

平整高弛豫度 SiGe 弛豫缓冲层(虚衬底), 并在其上生长应变补偿量子阱结构, 用光致发光谱对这种结构做初步的发光特性研究。

2 能带设计理论^[5,6]

在硅基 Si_{1-x}Ge_x 虚衬底上外延应变补偿 Si/Si_{1-y}Ge_y ($y > x$) 量子阱结构, Si 层处于张应变, Si_{1-y}Ge_y 层处于压应变, 这种应变补偿结构, 一方面通过增大导带阶和价带阶, 来增强对电子和空穴的限制, 提高发光效率; 另一方面又可以增大量子阱生长的临界厚度, 通过增加有源层的厚度来进一步增强发光。

在 Si_{1-x}Ge_x 弛豫衬底上的量子阱处于双轴张(或者压)应力的作用, 根据 Van de Walle 理论^[5,6]可知, 这个生长平面内的双轴应力可分解为流体静应力和单轴应力, 引起两

收稿日期: 2008-06-14; 修订日期: 2008-09-02

基金项目: 国家重点基础研究发展计划资助项目 2007CB613400, 国家自然科学基金资助项目(60676027, 50672079)

作者简介: 廖凌宏(1983-), 男, 硕士研究生, 从事 Si 基光电子材料及器件研究。通讯作者: 李 成, 博士, 教授。E-mail: lich@xmu.edu.cn.

个主要效应: 流体静应力使能带位置偏移; 单轴应力使简并能带分裂。以(001)生长平面为例, 在弛豫衬底上生长的应变 Si_c 处于双轴张应力作用之下, 其带边分裂情况如图 1 所示。而在 Si 衬底生长的应变 SiGe, 则处于双轴压应变状态, 其带边分裂情况恰与图 1 所示相反。

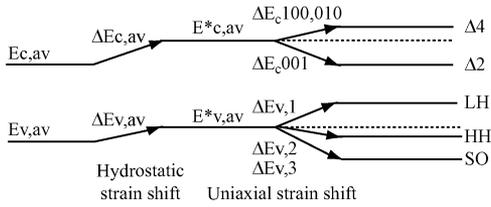


图 1 在张应力作用下应变 Si 带边分裂示意图

Fig. 1 Schematic bandgap of tensile strained Silicon

2.1 导带带阶设计

当 Si 或 SiGe 处于应变状态时, 流体静应力使得导带的平均位置 $E_{c,av}$ 偏移至 $E_{c,av}^*$, 偏移量 $\Delta E_{c,av}$ 可表示为:

$$\Delta E_{c,av} = a_c (\Delta V/V) = a_c (2\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp})$$

式中 a_c 为导带最低处的绝对形变势能; $\Delta V/V$ 相对体积变化; 水平应变 $\varepsilon_{\parallel} = (a_0 - a_1)/a_1$ (a_0 衬底晶格常数, a_1 外延层晶格常数); 垂直应变 $\varepsilon_{\perp} = -2(C_{12}/C_{11})\varepsilon_{\parallel}$ (C_{11} 、 C_{12} 为弹性模量)。

[001] 方向单轴应力使得导带底简并态 $\Delta(6)$, 分裂为垂直于生长平面的二重简并态 $\Delta(2)$ 和平行与生长平面的四重简并态 $\Delta(4)$, 它们相对于 $E_{c,av}^*$ 位置的分裂能差分别为 ΔE_c^{001} 和 $\Delta E_c^{100,001}$ 可以表示为:

$$\Delta E_c^{001} = 2/3 \Xi_u^{\Delta} (\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{\parallel}); \Delta E_c^{100,001} = -1/3 \Xi_u^{\Delta} (\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{\parallel})$$

式中 Ξ_u^{Δ} 表示 Δ 带同轴应变的形变势能。

2.2 价带带阶设计

流体静应力使得价带的平均位置 $E_{v,av}$ 偏移至 $E_{v,av}^*$, 偏移量为 $\Delta E_{v,av}$:

$$\Delta E_{v,av} = a_v (\Delta V/V) = a_v (2\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp})$$

式中 a_v 为价带最高处的绝对形变势能。

[001] 方向单轴应力对价带使得简并的价带发生退简并, 同时考虑到自旋轨道的影响, 三个价带相对于 $E_{v,av}^*$ 位置的分裂能差分别为:

轻空穴带:

$$\Delta E_{v,1} = -1/6 \Delta_0 + 1/4 \delta E + 1/2 [(\Delta_0)^2 + \Delta_0 \delta E + 9/4 (\delta E)^2]^{1/2}$$

重空穴带:

$$\Delta E_{v,2} = 1/3 \Delta_0 - 1/2 \delta E$$

自旋轨道:

$$\Delta E_{v,3} = -1/6 \Delta_0 + 1/4 \delta E - 1/2 [(\Delta_0)^2 + \Delta_0 \delta E + 9/4 (\delta E)^2]^{1/2}$$

对于 [001] 方向应变: $\Delta E^{001} = 2b(\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{\parallel})$

式中 Δ_0 为自旋分裂能; b 为四方应变同轴形变势能。

由于 Van de Walle 理论, 过高估计了能带偏移, 所以在计算过程中对 Si 和 Ge 之间的参考电势差做一修正^[7], 取 0.58eV。从上述能带设计可以看出, 应变度 ε 在整个设计

过程中是一个最关键的参数, 它与所设计的量子阱厚度有密切关系。

2.3 临界厚度

如果一个量子阱周期中 Si 的厚度为 d_1 , SiGe 组分 x_2 , 厚度 d_2 。则量子阱的平均组分^[3] $y = (x_2 d_2)/(d_1 + d_2)$ 。本文设计的样品是生长在锗组分为 0.25 的弛豫衬底之上的应变补偿量子阱, 根据以上能带的计算, 我们选择量子阱周期数为 10, 每一周期中 Si 的厚度为 5nm, SiGe 组分 0.38, 厚度 10nm, 则量子阱平均组分为: $y = 0.254$ 。根据 MB 模型计算临界厚度^[7] h_c :

$$h_c = (1 - 0.25V)(b/\varepsilon) [1/(4\pi(1 + V))] \ln(ah_c/b)$$

式中取泊松比 $\nu = 0.279$; Burgers 矢量 $b = 0.39\text{nm}$; ε 为外延层和衬底之间的晶格失配; a 为核心能量参数, 其典型值 $a = 1$ 。计算出量子阱的临界厚度为 1150nm, 而设计的量子阱的总厚度 150nm, 因此理论上量子阱是完全应变的。由于上述设计的量子阱厚度在量子尺寸, 因此在能带计算上还必须考虑到量子效应。

2.4 量子效应

在求解一维 Schrödinger 方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi = E \psi$$

过程中, 对于势能 $V(x)$ 作处理, 仅取一项, 即量子阱的带阶, 忽略了 Hartee^[8] 等势能。根据 Van de Walle 理论可计算得, 张应变 Si 与弛豫衬底 Si_{0.75}Ge_{0.25} 之间的导带势垒为 126meV, 价带势垒为 69meV; 压应变 Si_{0.62}Ge_{0.38} 与弛豫衬底 Si_{0.75}Ge_{0.25} 之间的导带势垒为 3meV, 价带势垒为 96meV。

对于 Schrödinger 方程中的有效质量 m , 必须考虑到应变对其的影响。对于应变 Si 层而言, 电子有效质量几乎不受衬底锗组分和双轴应变的影响^[9]。应变 Si [001] 方向的有效质量为 $m^*(\text{Si}) = 0.9m_0$ (m_0 为电子静止质量)。而压应变对 SiGe 空穴有效质量影响较大, 利用六带 $k \cdot p$ 理论, 通过价带顶的色散关系来求解压应变 Si_{0.62}Ge_{0.38} 重空穴的有效质量, 可以得到重空穴 [001] 方向有效质量表达式^[10]:

$$\frac{m_{HH,\perp}^*}{m_0} = \frac{1}{\gamma_1 - 2\gamma_2}$$

对于锗组分为 0.38 的 SiGe 合金, 其 Luttinger 参数^[11] $\gamma_1 = 5.3$, $\gamma_2 = 0.6$ 。通过求解 Schrödinger 可得: 张应变 Si 的基态能量 $E = 11\text{meV}$; 压应变 Si_{0.62}Ge_{0.38} 的基态能量 $E = 11\text{meV}$ 。计算过程中选用的参数^[7] 如表 1 所示。设计的样品能带结构如图 2 所示 (单周期)。可以看出, 通过在弛豫缓冲衬底上应变补偿量子阱的能带设计, 得到对电子和空穴同时限制的 II 型量子阱结构。锗组分为 0.25 弛豫衬底的带隙为 1075meV^[13], 故最终可以计算出张应变 Si 与压应变 Si_{0.62}Ge_{0.38} 之间的 II 型阱跃迁能量 $E = 1075 - 126 - 96 + 11 + 11 = 875\text{meV}$ 。

表 1 计算过程用的参数^[7]

Table 1 Parameters used in calculation

Parameter	Unit	Si	Ge
a	nm	0.54309	0.56575
a _c	eV	4.18	2.55
Ξ _{ii} ^Δ	eV	9.16	9.42
a _v	eV	2.46	1.24
b	eV	-2.35	-2.55
Δ ₀	eV	0.04	0.3
C ₁₁	GPa	165.8	128.5
C ₁₂	GPa	63.9	48.3

附注: Si_{1-x}Ge_x 晶格常数(单位埃): a(x) = a(Si) + 0.200326x(1-x) + [a(Ge) - a(Si)]x²[12], 表格中 Si_{1-x}Ge_x 其它参数用线性内插来计算。

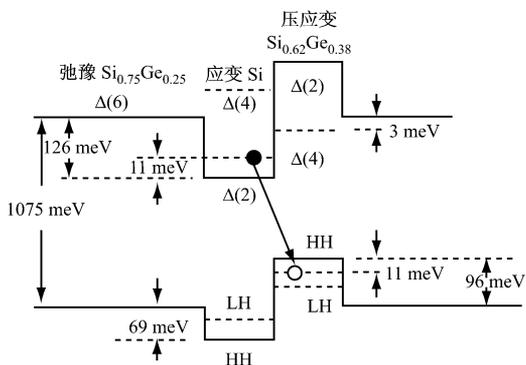


图 2 应变补偿量子能带示意图

Fig. 2 Schematic bandgap of strain-compensated quantum wells

3 实验结果与讨论

3.1 弛豫缓冲层的制备

利用超高真空化学汽相淀积(UHV-CVD)设备,以Si₂H₆和GeH₄为源气体,在4英寸硅衬底上插入一低温Ge层,外延出薄的SiGe弛豫缓冲层(虚衬底),缓冲层的总厚度仅380nm。弛豫衬底的XRD(X-ray diffraction)谱如图3所示。弛豫衬底AFM(atomic force microscope)如图4所示。通过XRD(004)和(224)方向的扫描峰位,得到SiGe弛豫缓冲层表面Ge组份达到0.25,弛豫度高达99%。分析AFM图得到表面粗糙度小于2nm,表面没有由于失配位错引入的布纹,有效压制了失配位错引入的表面起伏。

3.2 量子阱的生长

对弛豫缓冲层进行标准清洗后,进行二次外延。先后在400℃和500℃下分别同质外延1小时和0.5小时,然后在500℃下,生长10个周期Si/SiGe。每个周期中,Si的厚度约为5nm,SiGe组分在0.38左右,厚度约10nm。

3.3 光致发光谱测试与分析

利用FL920瞬态荧光光谱仪,在激发波长632.8nm,激

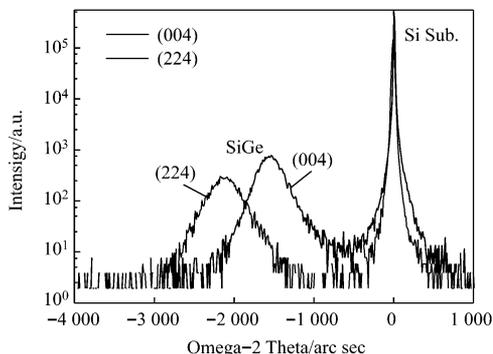


图 3 弛豫衬底(004)面和(224)面 XRD 图谱

Fig. 3 XRD curves both in 004 and 224 scans of strain-relaxed buffer layer

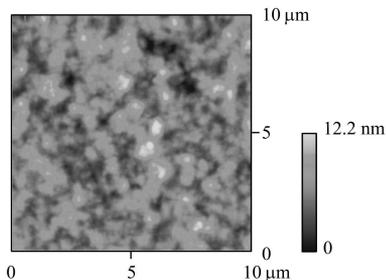


图 4 弛豫衬底 AFM 图

Fig. 4 AFM image of strain-relaxed buffer

发功率5mw情况下,测得样品光致发光谱强度随温度变化关系,如图5所示。在低温下PL谱有多个峰位,其中1.097eV为Si衬底的TO峰,1.075eV是错组分为0.25的弛豫衬底自由激子NP峰^[13]。生长Si_{0.75}Ge_{0.25}弛豫衬底上的应变Si带隙1.005eV附近^[12],考虑量子效应,故1.019eV为应变Si的NP峰。0.805eV是位错峰,由于在二次外延清洗后采用700℃脱氢,此温度高于弛豫衬底生长的最高温度500℃,可能引起衬底结晶质量变差,使得二次外延引入较多的位错。0.907eV对应的是张应变Si与压应变Si_{0.62}Ge_{0.38}之间的II型阱跃迁,这与理论值875meV还有32meV的差值,其他小组^[2,14]报道结果也有相当的差值。造成这种差值的原因在于:一方面在理论上,应变Si以及应变SiGe的能带结构计算与参数选择有很大的关系,同时在

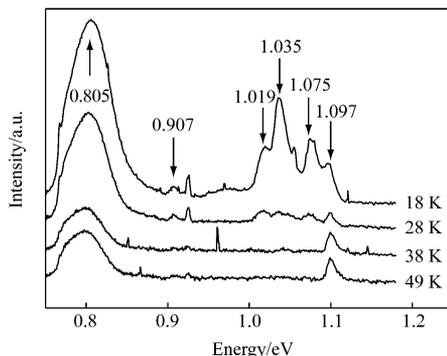


图 5 光致发光谱强度随温度变化关系图

Fig. 5 Photoluminescence as a function of the temperature

计算过程中忽略了能带弯曲效应^[14], 在量子效应的势能考虑方面作了简单的处理; 另一方面在实验上, 理论设计的组分和厚度与实际生长存在一定的偏差, 也会引起理论与实验值的偏离。

4 结 论

本文从理论上设计了在硅基 SiGe 虚衬底上外延应变补偿的 Si/SiGe 量子阱的能带结构, 优化了低温 Ge 缓冲层的生长条件, 在 4 英寸硅衬底上制备出薄的 $\text{Si}_{0.72}\text{Ge}_{0.28}$ 弛豫缓冲层(虚衬底), 在其上外延了应变补偿 $\text{Si}/\text{Si}_{0.62}\text{Ge}_{0.38}$ 多量子阱结构, 并初步研究了其发光特性。

参 考 文 献

- [1] K. Ismail, M. Arafa, K. L. Saenger, J. O. Chu, B. S. Meyerson. Extremely high electron mobility in Si/SiGe modulation-doped heterostructures [J]. Appl. Phys. Lett, 1995, 66: 1077~ 1079.
- [2] J. Munguía, G. Bremond, O. Marty, J.-M. Bluet, M. Mermoux. Optical characterization of a strained silicon quantum well on SiGe on insulator [J]. Appl. Phys. Lett, 2007, 91: 122108~ 122110.
- [3] N. Sfina, J.-L. Lazzari, F. Ben Zid, A. Bhourri, M. Said. Wave function engineering in W designed strained compensated $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ type II quantum wells for 1.55 μm optical properties [J]. Optical Materials, 2005, 27: 859~ 863.
- [4] N. Usami, Y. Shiraki, S. Fukatsu. Role of heterointerface on enhancement of non-phonon luminescence in Si -based neighboring confinement structure [J]. Appl. Phys. Lett, 1996, 68: 2340~ 2342.
- [5] Chris G. Van de Walle, Richard M. Martin. Theoretical calculations of heterojunction discontinuities in the Si/Ge system [J]. Phys. Rev. B, 1986, 34: 5621~ 5634.
- [6] Chris G. Van de Walle. Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory [J]. Phys. Rev. B, 1989, 39: 1871~ 1883.
- [7] Erich Kasper, 余金中, 王杏华, 夏永伟. 硅锗的性质[M]. 国防工业出版社, 2002, 19~ 132.
- [8] N. L. Rowell, G. C. Aers, H. Lafontaine, R. L. Williams. Photoluminescence in UHV-CVD-grown $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ quantum wells on $\text{Si}(100)$: band alignment variation with excitation density and applied uniaxial stress [J]. Thin Solid Films, 1998, 321: 158~ 162.
- [9] Martin M. Rieger, P. Vogl. Electronic band parameters in strained $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ alloys on $\text{Si}-\gamma\text{Ge}$ substrates [J]. Phys. Rev. B, 1993, 48: 14276~ 14287.
- [10] Y. P. Chao, S. L. Chuang. Spin-orbit-coupling effects on the valence band structure of strained semiconductor quantum wells [J]. Phys. Rev. B, 1992, 46: 4110~ 4122.
- [11] T. Fromherz, E. Koppensteiner, M. Helm, G. Bauer, J. F. Nutzel, G. Abstreiter. Hole energy levels and intersubband absorption in modulation-doped $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ multiple quantum wells [J]. Phys. Rev. B, 1994, 50: 15073~ 15085.
- [12] Lianfeng Yang, Jeremy RWatling, et al. Si/SiGe heterostructure parameters for device simulations [J]. Semicond. Sci. Technol, 2004, 19: 1174~ 1182.
- [13] J. Weber, M. I. Alonso. Near-band-gap photoluminescence of Si-Ge alloys [J]. Phys. Rev. B, 1989, 40: 5683~ 5693.
- [14] P. Boucaud, M. El Kurdi, J. M. Hartmann. Photoluminescence of a tensilely strained silicon quantum well on a relaxed SiGe buffer layer [J]. Appl. Phys. Lett, 2004, 85: 46~ 48.
- (上接第 156 页)
- [3] Hejun Yu, Jinzhong Yu, Zhongchan Fan, Shaowu Chen. Realization of an ultracompact low-loss photonic crystal corner mirror [J]. IEEE Photonics Technology Letters, 2007, 19: 1042~ 1044.
- [4] Qingzhong Huang, Jinzhong Yu, Shaowu Chen, et al. High Q microring resonator in silicon-on-insulator rib waveguides [C]. SPIE Photonics Asia, 14-15 November, 2007, 6838-123, Beijing, China.
- [5] Hejun Yu, Jinzhong Yu, Yude Yu, Shaowu Chen. Design and fabrication of a photonic crystal channel drop filter based on an asymmetric silicon-on-insulator slab [C]. China Nano 2007-the 2nd International Conference on Nanoscience and Nanotechnology, 30-002, June 4-6, 2007, Beijing, China.