

# 图形衬底上应变 SiGe/Si 超晶格的结构及光致发光研究

司俊杰 杨沁清 高俊华 滕 达 王启明

(中国科学院半导体研究所 北京 100083)

郭丽伟 周均铭

(中国科学院物理研究所 北京 100080)

**摘要** 本文研究了在 Si 的图形衬底上生长应变 SiGe/Si 超晶格的结构和其光致发光性质。图形衬底由光刻形成的类金字塔结构组成。发现在组成倒金字塔结构的 (111) 面的交界处有富 Ge 的 SiGe 量子线出现。对相同条件下图形衬底和平面衬底上的应变 SiGe 层的光致发光谱进行了比较, 图形衬底上总的发光强度相对提高了 5.2 倍。认为这种提高同富 Ge 的 SiGe 量子线的产生相关。

**PACC:** 7855, 6116, 6855

## 1 引言

能够在 Si 衬底上以同现有的大规模集成电路工艺相兼容的方式, 制作出发光器件, 是光电集成领域中的重要研究课题。这将使我们实现硅单片光电集成, 完成由微电子向光电子的转变<sup>[1]</sup>。硅材料的能带属于间接带隙结构, 所以它的光跃迁复合效率比起直接带隙材料要低很多。量子结构利用能带工程的方法, 提供了改善其发光效率的一种手段。

应变 SiGe/Si 量子结构中, 尽管 SiGe 材料仍具有间接带隙的特点, 但 SiGe 价带与 Si 价带间较大的带边偏移, 提高了对空穴载流子的限制。不规则分布的 Ge 在 SiGe 应变层中加强了电子与空穴波函数的交叠, 使得无声子辅助光跃迁几率大大增加<sup>[2]</sup>。平面衬底上生长应变 SiGe/Si 量子阱结构的无声子参与的 NP 峰跃迁已经得到证实和广泛研究<sup>[3]</sup>。为了增加 SiGe/Si 应变量子阱的发光效率, 我们曾在选择性腐蚀构造的 Si 的非平面衬底上生长应变 SiGe/Si 结构, 并得到了发光效率的明显改善<sup>[4]</sup>, 预期这种改善同 SiGe 的低维量子结构相关。事实上, 低维量子结构是提高 Si 基材料发光性能的重要手段之一。Ohno 及 Sanders 等人报道了对 Si 量子线结构, 当尺度小于 0.8nm 时, 由于 X 带和 L 带的混合, 可使材料变为准直接带隙材料<sup>[5,6]</sup>。而量子点的形成, 更由于打破了光跃迁需要动量守恒的限制, 将使光跃迁几率有明显提高。为了进一步核实低维量子结构对发光的贡献, 我们采用光刻工艺, 制作

司俊杰 男, 1963 年出生, 博士, 现从事硅基低维半导体材料和结构的光学性质研究  
杨沁清 男, 1938 年出生, 研究员, 现从事硅基光电子器件研究  
郭丽伟 女, 1962 年出生, 博士, 现从事硅基薄膜材料生长研究  
1998-07-17 收到, 1998-12-29 定稿

了 Si 衬底上规则均匀分布的倒金字塔结构,期望在这样的结构里,由晶面交界处得到均匀的低维结构,并观察其对发光性能的影响

## 2 实验

取 n 型(100)CZ-Si 为衬底,直径为 50.8mm,电阻率为  $3\sim 5\Omega\cdot\text{cm}$ . 在 1050 °C 下热氧化生成约 150nm 厚的  $\text{SiO}_2$ ,光刻掩膜后由 Plasma Therm 520/540 型反应离子刻蚀机(RIE)干法腐蚀得到均匀分布的  $2\times 2\mu\text{m}^2$  的窗口.再由碱性各向异性腐蚀剂湿法腐蚀得到倒金字塔结构.为对比测量的需要,同一衬底上一部分为图形衬底,另一部分为平面衬底.去除  $\text{SiO}_2$  后用 MBE 在 700 °C 下生长标称值为 200nm Si 缓冲层/ $11\times(2.5\text{nm Ge}_{0.3}\text{Si}_{0.7}/3\text{nm Si})/30\text{nm Si}$  盖帽层的结构,用 Shimadzu SPM 9500 型原子力显微镜(AFM)和 JEM 200 CX 型透射电镜(TEM)观察其形貌.测试了该结构在平面衬底和图形衬底上的低温光致发光(PL)谱,测试是在低温(10K)下进行的,用  $\text{Ar}^+$  激光器复合谱线激发, SPEX 1404 双光栅单色仪分光,低温 Ge 探测器探测信号,以常规锁相技术放大后采集处理

## 3 结果与讨论

图 1 为由 AFM 测得的所构造的倒金字塔结构.它近似为四个(111)晶面和上、下两个(100)晶面构成.控制腐蚀时间可控制倒金字塔的高度,即下底面的大小.腐蚀时间足够长可达到自终止极限,此时为四个(111)面相交,底面为点状.在我们的结构中,底面未腐蚀到终点,下底面宽为 550nm,上底面宽为  $3.95\mu\text{m}$ .结构示意图由图 1 中的插图所示.上底面比掩膜图形的增宽是由于湿法腐蚀中的横向钻蚀所致

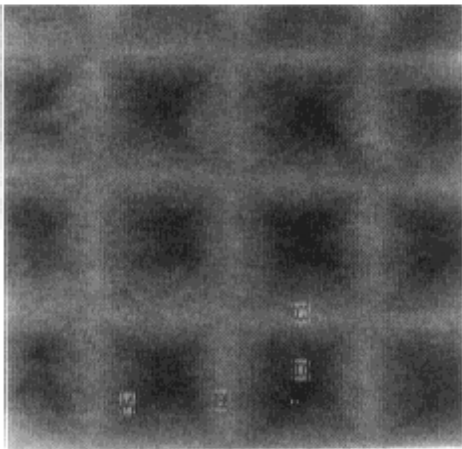


图 1 AFM 所测非平面衬底的表面像  
插图为单个倒金字塔结构示意图

图 2 为同一 Si 晶片上图形衬底区域及平面衬底区域上的 SiGe/Si 应变层的 PL 谱图.由图中可以清楚地看到,当激发功率相同(均为  $20\text{mW}/\text{mm}^2$ )时,图形衬底区域上的应变 SiGe/Si 量子结构较相应平面衬底区域上的应变 SiGe/Si 量子结构发光效率有明显提高.由积分强度的计算得出,总的发光强度提高了 5.2 倍.这种提高显然同发光面积的增加相关,然而由简单的几何关系可知,面积增加最多为  $\sqrt{3}$  倍,故发光强度的提高显然还同其它增强机制相关

这种增强机制应是同 SiGe/Si 低维量子结构相关.图 3 给出了由 TEM 得到的图形衬底上 SiGe/Si 结构的俯视图和截面图.首先由俯视图可以看出,在(111)晶面的交界处,衬底图像显示有量子线结构出现.这种衬底上的差别有两种可能来源,一是交界处 SiGe 层厚度增大,结果是产生几何上的量子线结构.另一个可能是交界处的 Ge 含量增大,结果是产生组分上的量子线结构.尽管有大量 V 形槽中生长几何形量子线的报道<sup>[7,8]</sup>,

但这里我们倾向于该量子线结构主要还是以组分量子线为主。它是由(111)面和(100)面上 SiGe 阱层中 Ge 组分向量子线内扩散所致。Hartmann 曾报道过相似观察结果<sup>[9]</sup>。有两个理由支持我们的看法。第一,如果是几何上的量子线,衬度像上从阱到线之间应是单调变化,而不应该有极值出现。但若是组分量子线,则由于阱中的 Ge 向线内扩散的缘故,紧靠量子线区域内的 Ge 含量减小,出现 Ge 的耗尽区,故在晶面上阱的中部和晶面交界处量子线内的 Ge 含量较高,导致这种衬度变化的出现。第二,AFM 的测量也显示,晶面交界处外延层的厚度相对于晶面上外延层的厚度,差别在 2% 以内。显然,衬度像上的变化不会由此厚度上的不一致所造成。

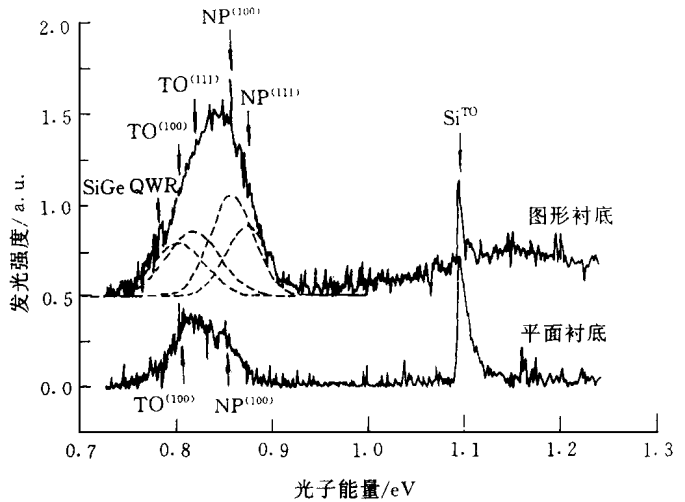


图 2 同一晶片上图形衬底区域及平面衬底区域应变 SiGe/Si 超晶格的 PL 谱  
虚线为由 Gaussian 线型模拟的(100)面与(111)面的 PL 发光峰

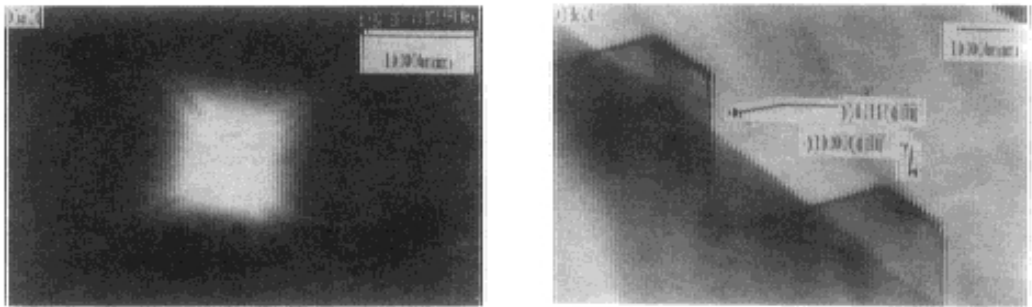


图 3 图形衬底上 SiGe/Si 的 TEM 像  
(a) 俯视图; (b) 截面图

这种 SiGe 阱层中 Ge 扩散形成量子线是由平面生长 SiGe 合金的生长动力学所决定的。理论和实验均已表明,在相同生长条件下,表面上 Ge 原子的迁移速率大于 Si 原子的迁移速率;而晶面凹形交界处无疑是台阶密集处,可提供给入射原子更多同衬底结合生长的机会,所以该处表面自由能最小。这两点决定了 Ge 原子更倾向于在晶面交界处富集,形成富 Ge 量子线。

PL 谱图中也可观察到 SiGe 量子线的贡献。在 PL 谱的低能端有一个小的峰位,由上述应变 SiGe 结构中存在富 Ge 量子线的分析知,尽管(111)面与(111)面和(111)面与(100)面的交界都会有量子线产生,但由于(111)面与下底面(100)面的交界通常较短,在量子线中所占比例小,可以指认此低能端的发光峰为来源于(111)面交界处富 Ge 量子线的发光。显然,在(111)面与(100)面的交界处也会有富 Ge 量子线产生,在下底面的四边形顶点,还会有富

Ge 量子点出现 它们都会对光生载流子的俘获及光复合跃迁几率的增加有作用

值得注意的是,在图形衬底上测得的 PL 谱上, SiGe 量子线的发光峰强度相对较低 但我们认为总发光强度 5.2 倍的提高同量子线的存在相关 一种可能的解释是, SiGe 量子线

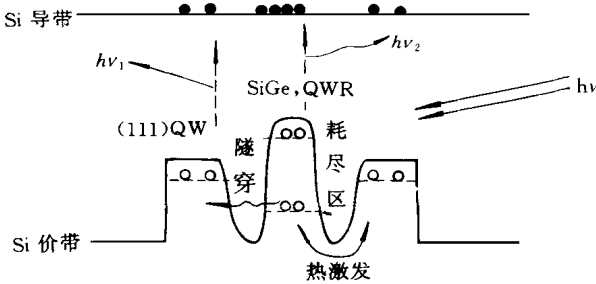


图 4 图形衬底上应变 SiGe 层中光生载流子的激发和能量转移图

图中:  $h\nu$  为激发光,  $h\nu_1$  为阱区发光,  $h\nu_2$  为线区发光

由于实际所占几何尺寸比例相对于 SiGe 阱层很小, 它的发光峰并不占主导地位 但它的存在对阱层中的载流子俘获和复合有增强作用 图 4 给出了量子线和量子阱结构中, 光生载流子被激发和复合时能量转移的示意图 量子线中的光生载流子由于隧穿和热激发作用, 会再进入阱层中复合, 从而明显提高了 SiGe 量子阱层的发光强度

来自 (100) 面和来自 (111) 面的发光峰位与通常 GSiMBE 生长的材料的带边峰相比处于低能位置, 它可能是由

于生长时 Ge 含量与标称值偏离所致, 也可能是如 Noel 所述<sup>[10]</sup>, 来自每一 SiGe 层中富 Ge 的相互间隔的圆盘状结构 由截面图可以看出, (100) 面 SiGe 层的厚度比 (111) 面上 SiGe 层的厚度要大, 约为后者的 1.4 倍 说明 (100) 面 SiGe 层生长速率高于 (111) 面 SiGe 层的生长速率 这种生长速率的差别来源于入射原子在不同晶面上迁移速率的差别, 即在 (100) 面的原子迁移速率慢, (111) 面上的原子趋于迁移到 (100) 面而使 (100) 晶面外延层增加 这个结论同 Nakagawa 的推论不同<sup>[11]</sup>, 而同本文作者之一以前的研究结果相符<sup>[12]</sup>.

在图 2 中, 平面衬底上可分辨来自 SiGe 层的无声子辅助光跃迁峰 (NP 峰) 和由横向光学声子辅助的光跃迁峰 (TO 峰). 而在图形衬底上, 由于存在 (100) 和 (111) 两种晶面取向的 SiGe 应变层, 且 (111) 面上 SiGe 层厚度较小, 故 (111) 面 SiGe 的 NP 峰和 TO 峰相对于 (100) 面的 NP、TO 峰, 处于高能端 两种晶面上 SiGe 层的发光使得峰位较难辨认, 形式上, 我们对四个峰 ((100) 面的 NP、TO 峰和 (111) 面的 NP、TO 峰) 进行了线形模拟, 组成最终的 PL 谱线形 Christen 和 Binberg 曾对量子阱中激子复合的线形进行了详细的研究<sup>[13]</sup>, 指出 PL 谱峰的展宽存在寿命展宽和统计展宽两种机制 前者同声子散射和载流子散射相关, 在高温时占主导地位, 谱线符合 Lorentz 线形 后者同界面起伏和合金无序相关, 低温时占主导作用, 谱线符合 Gaussian 线形 我们模拟时采用 Gaussian 线形得到了来自 (100) 面和 (111) 面 SiGe 层对 PL 谱峰贡献如图 2 所示 虽然用四个 Gaussian 线形来模拟实测所得的发光峰数学上可有多种形式, 但我们模拟时遵循了: (1) 非平面衬底上的 (100) 面的 NP、TO 峰和平面衬底上的 NP、TO 峰峰位一致; (2) NP 峰和 TO 峰的峰位间隔固定, 即相差一个硅 TO 声子的能量 (57.8 meV); (3) (111) 面的 NP 峰相对于 (100) 面的 NP 处于高能端位置

#### 4 结论

我们在所构造的倒金字塔结构的图形衬底上生长了应变 SiGe/Si 超晶格, 得到了明显增加的发光效率, 总的发光强度提高了 5.2 倍 图形衬底上生长的 SiGe/Si 应变结构主要由

组成倒金字塔的(111)晶面和(100)晶面上的量子阱层和它们交界处的量子线所组成。发光强度的提高同量子线对发光的贡献相关。该量子线是富 Ge 的, 由其周围阱区中 Ge 向量子线中扩散所致。

**致谢** 作者感谢吴巨副研究员在透射电镜测量上给予的帮助

### 参 考 文 献

- [ 1 ] K. D. Hirschman, L. Tsybeskov, S. P. Duttagupta *et al* , Nature, 1996, **384**: 338~ 341.
- [ 2 ] J. Weber and M. I Alonso, Phys. Rev. B, 1989, **40**: 5683~ 5693.
- [ 3 ] U. Menczgar, J. Brunner, E. Friess *et al* , Thin Solid Film, 1992, **222**: 227~ 234.
- [ 4 ] 杨沁清, 钱毅, 董文甫, 等, 半导体学报, 1997, **18**: 10~ 12.
- [ 5 ] T. Ohno, K. Shiraishi and T. Ogawa, Phys. Rev. Lett. , 1992, **69**: 2400~ 2403.
- [ 6 ] G. G. Sanders and Y. C. Chang, Appl. Phys. Lett. , 1992, **60**: 2525~ 2527.
- [ 7 ] V. Higgs, E. C. Lightowers, N. Usami *et al* , J. Cryst. Growth, 1995, **150**: 1070~ 1073.
- [ 8 ] J. Zhang, X. M. Zhang, A. Matsumura *et al* , J. Cryst. Growth, 1995, **150**: 950~ 954.
- [ 9 ] A. Hartmann, L. Vescan, C. Dieker *et al* , J. Appl. Phys. , 1995, **77**: 1959~ 1963.
- [ 10 ] J. -P. Noel, N. L. Rowell, D. C. Houghton *et al* , Appl. Phys. Lett. , 1992, **61**: 690~ 692.
- [ 11 ] K. Nakagawa and M. Miyao, Thin Solid Film, 1989, **183**: 315~ 322.
- [ 12 ] 郭丽伟, “Si/SiGe 应变外延的生长机理研究及 Si/SiGe 量子线的研制”, 博士论文, 中国科学院物理研究所, 1996 年 7 月.
- [ 13 ] J. Christen and D. Bimberg, Phys. Rev. B, 1990, **42**: 7213~ 7218.

## Photoluminescence and Structure of Strained SiGe/Si Superlattices on Si Patterned Substrate

Si Junjie, Yang Qinqing, Gao Junhua, Teng Da, Wang Qiming

(State Key Laboratory on Integrated Optoelectronics, Institute of Semiconductors,  
The Chinese Academy of Sciences, 100083 Beijing)

Guo Liwei, Zhou Junming

(MBE Laboratory, Institute of Physics, The Chinese Academy of Sciences, 100080 Beijing)

Received 17 July 1998, revised manuscript received 29 December 1998

**Abstract** Photoluminescence spectrum and structure of strained SiGe/Si superlattices grown on Si patterned substrate are investigated. The patterned substrate is composed of inverse pyramid-like structures produced by photolithography. SiGe quantum wires with rich Ge content are found at the crosses of two (111) planes which are facets of inverse pyramid-like structure. Comparative photoluminescence of strained SiGe layer on patterned substrate and planar substrate under same condition are performed. The total luminescence intensity of strained layer on patterned substrate is 5.2 times larger than on planar substrate. It is believed that this increase is related to the Ge-rich SiGe quantum wires.

**PACC:** 7855, 6116, 6855