

直接键合微腔结构的光谱特性*

劳燕锋 吴惠桢[†] 黄占超 刘成 曹萌

(中国科学院上海微系统与信息技术研究所 信息功能材料国家重点实验室, 上海 200050)

摘要: 采用直接键合方法制备了法布里-珀罗共振微腔结构,并用传输矩阵方法对其反射光谱进行了理论模拟.通过构造键合界面两侧多层薄膜材料的光学厚度呈现指数规律变化的模型,分析了键合效应对微腔结构光学特性的影响.结果表明:在较低退火温度下(如 580℃)进行直接键合有利于高光学性能微腔结构的制备,而提高退火温度则需要在键合结构中加入缺陷阻挡层以提高键合质量.

关键词: 晶片直接键合; 界面缺陷; 反射光谱

PACC: 7280E; 7210F; 4225G

中图分类号: TN405

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2006)S0-0304-05

1 引言

近年来,键合技术在光电子和微电子器件的研制中发挥了极大的作用.首先,它作为传统外延材料生长技术的拓展,可以进行高质量的异质材料集成,如 InP 和 Si 的异质集成^[1].其次,利用键合技术可以将已研制的器件转移到特殊材料上,从而拓展该器件的应用范围,如将 AlGaInP 发光二极管键合到对可见光透明的 GaP 衬底上,可拓宽其发光波段到黄绿和红色^[2].

键合是指经过一定的处理将两种材料结合成为一个整体,按处理方法,可以分为不经任何粘接材料的直接键合^[1,3,4]和采用中间层的媒介键合^[5].键合技术由于不会在材料中产生位错线的延伸,而保证了键合后材料的晶格质量;然而,键合界面上仍有大量的以释放异质材料应力的边位错群产生^[4].此外,为了达到材料的完好键合,一般需要对材料表面进行特殊处理,如表面活化,以及制备中施加压力和退火处理.这些外界过程会导致异质界面上产生缺陷,如材料原子的空位和集体等^[6],这些界面缺陷在退火过程以及器件使用过程向两侧材料扩散,从而对器件的性能产生影响.分析和掌握界面缺陷扩散影响键合结构物理特性的规律对于研制高性能器件显得很重要.

本文采用直接键合方法制备了由 InP 基材料和 GaAs 基材料构成的法布里-珀罗(Fabry-Perot, F-P)共振微腔结构,通过实测其反射光谱与理论模拟曲线的比较,总结出高温直接键合影响器件光学

性能的规律,该 F-P 腔是一种垂直腔型面发射激光器件结构,因此所得结果对于实际器件的研制具有指导意义.

2 实验

InP 基材料由分布布拉格反射镜(distributed Bragg reflector, DBR)和工作在 $\lambda = 1310\text{nm}$ 的量子阱分别作为共振腔的一个腔镜和有源区, DBR 由 InP 和匹配 InGaAsP 两种材料组成; GaAs 基材料为 GaAs 和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0.78$)组成的 37 周期 DBR;这两种类型 DBR 中每单层材料光学厚度均为 $\lambda/4$,所有材料均由气态源分子束外延得到^[7].材料片经过清洗处理^[8]后面对面地进行直接叠合,并在压强为 2MPa,退火温度为 580~600℃下键合,退火时间均为 35min.键合后的样品通过化学腐蚀方法将 InP 衬底进行选择性地腐蚀.反射光谱由 NICO-LET 860 傅里叶变换红外光谱仪测试得到.

3 结果与讨论

3.1 理论模型

F-P 腔结构反射谱模拟由传输矩阵方法得到^[9].计算过程中分别考虑 InP 基和 GaAs 基材料的折射率色散关系^[10,11];量子阱有源区简化成单层材料,并考虑其折射率为复数:

$$\tilde{n}_{\text{ow}} = n_{\text{ow}} + i\kappa_{\text{ow}} \quad (1)$$

其中 n_{ow} 为组成量子阱的各层材料的平均折射

* 国家重点基础研究发展计划资助项目(批准号:2003CB314903)

[†] 通信作者. Email: hzww@mail.sim.ac.cn

2005-11-10 收到

率; κ_{OW} 是由于量子阱的吸收引起,计算中考虑其形式如下^[12]:

$$\kappa_{\text{OW}} = k_{\text{OW}} \frac{\Gamma/2\pi}{(E_T - \hbar\omega)^2 + (\Gamma/2)^2}, \quad \Gamma = \frac{\hbar}{\tau} \quad (2)$$

其中 $\hbar\omega$ 为入射光子能量; Γ 为线宽; τ 为电子寿命; E_T 为量子阱跃迁能量; k_{OW} 为比例系数,作为模拟中的调节参数.

进行材料键合后,键合界面主要引入了光学损耗,因而对微腔结构的光学特性产生影响.一方面,由于异质界面材料组分不同,在外界压强和退火过程驱动下,原子组分沿着界面两侧体内分别存在浓度梯度分布^[13],同时由二次离子质谱(secondary ion mass spectroscopy, SIMS)发现了氧原子以及材料中掺杂剂浓度在界面两侧的分布^[13];原子扩散导致了界面无序,产生光学损耗.另一方面缺陷如非辐射复合中心,在键合过程产生并在界面两侧存在一个梯度分布^[14],实验发现,键合压强可能是产生这种缺陷的主要因素,随着压强的增大,这种缺陷数量以及其在界面附近分布范围急剧增加,这可能与界面应力随着键合压强的增大而增大有关^[14];缺陷的引入导致材料的微结构发生变化,从而影响折射率、吸收系数等光学特性.在我们的键合微腔结构中,键合界面两侧是分层介质,因此键合过程使其界面附近的每单层材料折射率和几何厚度均发生变化,为简单考虑起见,我们归结为光学厚度的变化.基于前述两方面考虑,假设键合界面附近第 i 单层材料的光学厚度变化为:

$$\Delta L_i = k_{L1} \int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{e^{K_{L2}(z-z_\infty)} - 1}{e^{K_{L2}(z_0-z_\infty)} - 1} \times dz \quad (3)$$

假定键合界面在 z_0 位置,上式表示了由 z_0 向 z_∞ 的衰减.式中, K_{L1} 和 K_{L2} 是两个系数, K_{L1} 表示单位光学长度上的变化量, K_{L2} 代表了变化快慢程度,表示键合影响结构特性的程度, z_∞ 在计算中取为一个足够大的值,积分是因为考虑到光学厚度变化量与该层材料的厚度成正比.

模拟中,将(3)式表示的光学厚度变化量叠加在直接外延结构参数上, k_{OW} , E_T , K_{L1} 和 K_{L2} 为调节参数,这些参数代表了键合过程对键合后结构的影响,通过模拟不同条件下制备的键合微腔结构反射谱,得到了这些参数的变化规律.

3.2 实验与理论模拟结果

图 1 是直接键合后的三种微腔结构的折射率轮廓示意图,为清楚起见对折射率数值进行了增减,有源区具体结构未在图中画出.图 1 中, InP 基和 GaAs 基材料分别位于键合界面的左侧和右侧.结构 I 中有源区两侧均是 10 对 InP/InGaAsP DBR; 结构 II 中 35.5 对 InP/InGaAsP DBR 在有源区与

键合界面之间,而与有源区左侧接触的是空气层;结构 III 中有源区直接与 GaAs 基材料键合,其左侧则是 35.5 对 InP/InGaAsP DBR;其中所有 GaAs 基材料是 37 对 GaAs/AlGaAs DBR,由于外延生长的不同,这三种结构中的量子阱有源区跃迁波长存在着一些小的差别.

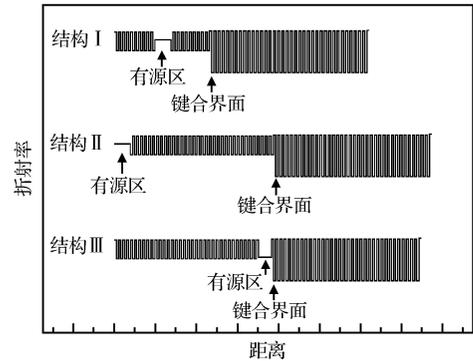


图 1 三种直接键合 F-P 微腔结构的折射率轮廓示意图
Fig.1 Refractive index profile of three directly wafer-bonded F-P micro-cavity structures

为检验实验与理论模拟反射光谱的符合程度,我们首先对结构 I 中直接外延的 InP 基材料进行了反射光谱计算,如图 2 所示.从图中看出,两条谱线基本是相符的,其边峰的差别可能是由于 DBR 中相邻 InP 和 InGaAsP 材料界面原子互扩散使界面的陡峭型下降引起的,此外计算中采用波长大于 1200nm 的 InGaAsP 折射率色散关系以及未考虑其光学吸收,故而导致了短波边峰较大的差别,但这不影响对实验曲线的分析.

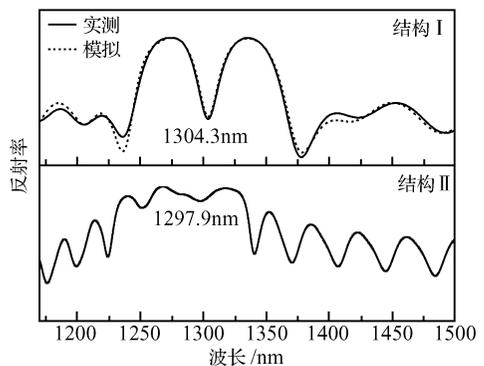


图 2 结构 I 和 II 中直接外延生长的 InP 基材料结构的反射光谱及理论模拟曲线
Fig.2 Measured and simulated reflectivity spectra of epitaxial InP-based materials for structures I and II

如上叙述,界面缺陷会在键合过程中产生并向体内扩散,从器件研制角度而言,不希望缺陷扩散效应改变键合前后结构的物理特性.分别直接键合 F-P 腔结构 I 和 II,由于有源区与键合界面之间分别

存在着 10 对和 35.5 对 InP/InGaAsP DBR, 从键合前后微腔共振模式的变化, 及从实验中观察直接键合对器件的光学特性的影响. 这两种结构均在 600°C 下进行键合, 实测反射光谱如图 3(a) 所示. 与直接外延结构相比, 结构 I 的光学共振腔模式蓝移了 11.7 nm, 而结构 II 的模式基本不变, 如图 2 所示. 图 3(a) 中虚线是这两种结构的反射光谱模拟结果. 可以看出, 实测与模拟曲线各峰的位置基本是符

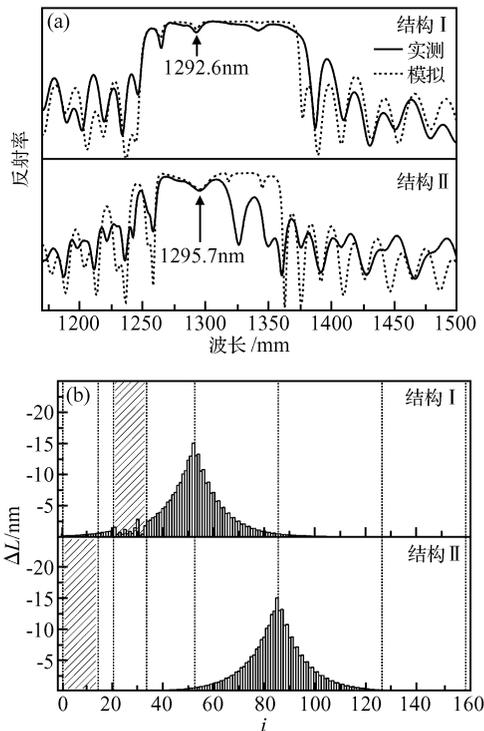


图 3 (a) 直接键合结构 I 和 II 的实测与模拟反射光谱; (b) 模拟得到的微腔结构光学厚度损失情况 k_{L2} 均为 0.001, 其中阴影部分为量子阱有源区.

Fig. 3 (a) Measured and simulated reflectivity spectra of directly wafer-bonded structures I and II; (b) Optical losses for wafer-bonded micro-cavity by simulation ($k_{L2} = 0.001$) in which the shadow represents quantum-well regions

合的, 高反射率带以及外区域边峰强度上的差别可能来源于未考虑键合退火后界面的无序化^[15] 以及键合界面附近材料的光学吸收. 在模拟过程中, 假定微腔结构具有如图 3(b) 所示的光学厚度损失, 其中横坐标以层数为单位, 损失情况在键合界面附近为最大, 而向两侧体内逐渐变小, 我们认为结构 I 中缺陷扩散穿过有源区而影响到了其左侧的 DBR, 结构 II 中由于 InP/InGaAsP DBR 有 71 层材料, 缺陷扩散效应未影响到位于最外测量量子阱有源区作为共振腔. 模拟得到表示衰减快慢程度的系数 k_{L2} 均为

0.001, 说明直接键合过程影响微腔光学特性的程度仅与键合温度、键合压强及退火时间有关. 若以光学厚度变化衰减到 $1/e$ 表示键合影响范围, 从图 3(b) 容易得到该范围为 $D = 1 \mu\text{m}$, 而要使材料光学特性完全不受键合过程的影响, 须与界面相距 $4 \mu\text{m}$. 文献[16]中报道了在 600°C 退火温度下 InGaAsP 光荧光强度与远离键合界面距离的关系以及其受键合压强影响情况. 他们发现, 在 5.6 kPa 外界压强下, 当 InGaAsP 层与键合界面之间 InP 层的厚度为 $0.6 \mu\text{m}$ 时, InGaAsP 发光强度才基本不受到影响, 但当键合压强增大到 9.8 kPa 时, InGaAsP 的发光效率被极大地减弱了, 加入 $1 \mu\text{m}$ 厚度的 InP 阻挡层只能得到原来 40% 的发光强度. 对比我们实验中采用了高达 2 MPa 的键合压强, 我们得到图 3(b) 的模拟结果是合理的. 应用于实际器件的制作, 对于 600°C 温度下的样品键合, 若在键合界面加入 20 对 InP/InGaAsP DBR 则可有效地抑制键合过程带来的影响.

很明显, 不同键合温度下, 直接键合影响微腔结构特性的规律会有所不同, 采用图 1 中的结构 III, 分别在 580, 620, 和 650°C 进行直接键合. 在结构 III 中, 有源区是直接和 GaAs 基材料键合的, 一方面这样一种结构安排可以观察到明显的腔模移动, 另一方面这是常用的直接键合垂直腔面发射激光器件结构, 实验与模拟结果均可以作为对器件研制的优化. 图 4(a) 是三个键合温度下实测曲线与理论模拟的比较, 图 4(b) 是光学厚度变化在界面两侧的分布, 模拟结果得到在 InP 基材料中 $K_{L2}(580^\circ\text{C}) = 0.002$, $K_{L2}(600^\circ\text{C}) = 0.0006$ 和 $K_{L2}(650^\circ\text{C}) = 0.0004$, 说明随着键合温度的升高结构受影响的程度逐渐加大, 这与图 4(a) 中实测到的光学腔模式的变化是一致的. 由图 4(b) 分别计算得到直接键合的影响 InP 基材料的范围: $D(580^\circ\text{C}) = 0.4 \mu\text{m}$, $D(620^\circ\text{C}) = 1.6 \mu\text{m}$ 以及 $D(650^\circ\text{C}) = 2.5 \mu\text{m}$. 键合温度影响有源区光学特性的规律也可用其光致发光强度变化来表征, 这在文献[17]已给出, 与我们反射谱测试结果是一致的. 从我们的模拟结果来看, 在 580°C 退火温度下不需要在有源区与键合界面之间加入缺陷阻挡层, 而仍可得到较好的键合结构, 这样一种键合方式可以方便地使用化学腐蚀方法来调节光学共振腔长, 以使其光学共振模式与有源区光增益范围相匹配, 这对于垂直腔面发射激光器件结构是非常重要的, 因此使用较低温度键合有利于制备光学性能优化的键合激光器件结构. 然而, 较高的键合温度有利于键合质量的提高, 但为了保证材料完好的光学特性, 须在键合结构与界面之间加入一层缺陷阻挡层, 如 620°C 下键合, 加入 $1.6 \mu\text{m}$ 厚的 InP 材料可以有效降低键合带来的影响.

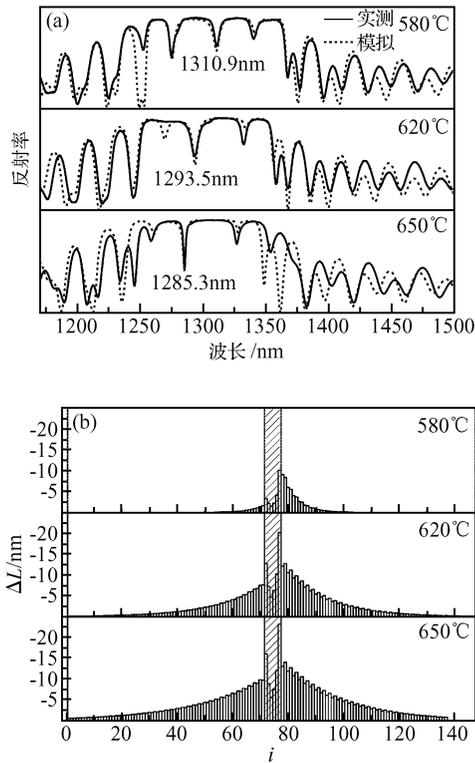


图4 (a)不同退火温度下直接键合结构Ⅲ的实测与模拟反射光谱;(b)模拟得到的微腔结构光学厚度损失情况 K_{L2} (580°C) = 0.002, K_{L2} (600°C) = 0.0006 以及 K_{L2} (650°C) = 0.0004, 其中阴影部分为量子阱有源区。

Fig. 4 (a) Comparison of measured and simulated reflectivity spectra of structure III bonded at different temperatures; (b) Optical losses for wafer-bonded micro-cavity by simulation (K_{L2} (580°C) = 0.002, K_{L2} (600°C) = 0.0006 and K_{L2} (650°C) = 0.0004) in which the shadow represents quantum-well regions

4 结论

本文采用传输矩阵方法对直接键合方法制备的F-P微腔结构反射光谱特性进行了理论模拟,提出了键合界面两侧多层薄膜材料的光学厚度呈现指数规律变化的模型,来表示直接键合过程对微腔结构光学性能的影响.对两种不同键合结构分析发现,采用20对InP/InGaAsP DBR作为缺陷阻挡层可有效抑制键合过程带来的影响.而对不同退火温度下键合结构反射光谱的理论模拟表明,在较低温度下(如580°C)进行直接键合有利于制备光学性能优良的微腔结构,提高退火温度则需要在键合结构与界面之间加入缺陷阻挡层,以提升所制备结构的光学性能。

参考文献

- [1] Mori K, Tokutome K, Nishi K, et al. High-quality InGaAs/InP multi-quantum-well structures on Si fabricated by direct bonding. *Electron Lett*, 1994, 30: 1008
- [2] Pan Jiaoqing, Huang Baibiao. Application of wafer bonding in AlGaInP high brightness LED diodes. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2003, 40: 50 (in Chinese) [潘教青, 黄柏标. 晶片键合在 AlGaInP 发光二极管中的应用. *激光与光电子学进展*, 2003, 40: 50]
- [3] Liao Z L, Mull D E. Wafer fusion: a novel technique for optoelectronic device fabrication and monolithic integration. *Appl Phys Lett*, 1990, 56: 737
- [4] Sagalowicz L, Rudra A, Kapon E, et al. Defects, structure, and chemistry of InP-GaAs interfaces obtained by wafer bonding. *J Appl Phys*, 2000, 87: 4135
- [5] Lin H C, Cheng K Y. Fabrication of substrate-independent hybrid distributed Bragg reflectors using metallic wafer bonding. *IEEE Photonics Technol Lett*, 2004, 16: 837
- [6] Jin-Phillipp N Y, Sigle W, Black A, et al. Interface of directly bonded GaAs and InP. *J Appl Phys*, 2001, 89: 1017
- [7] Huang Z C, Wu H Z, Lao Y F, et al. GSMBE growth and characterizations of AlInP/InGaAsP strain-compensated multiple-layer heterostructures. *J Cryst Growth*, 2005, 281: 255
- [8] Lao Yanfeng, Wu Huizhen, Li Ming. Observations of interfaces in direct wafer-bonded InP-GaAs structures. *J Vac Sci Technol B*, 2005, 23: 2351
- [9] Born M, Wolf E. *Principles of optics*. New York: Pergamon Press, 1970
- [10] Broberg B, Lindgren S. Refractive index of $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$ layers and InP in the transparent wavelength region. *J Appl Phys*, 1984, 55: 3376
- [11] Gehrsitz S, Reinhart F K, Gourgon C, et al. The refractive index of $Al_xGa_{1-x}As$ below the band gap: accurate determination and empirical modeling. *J Appl Phys*, 2000, 87: 7825
- [12] Chuang S L. *Physics of optoelectronic devices*. New York: Wiley, 1995
- [13] Salomonsson F, Streubel K, Bentell J, et al. Wafer fused p-InP/ p-GaAs heterojunctions. *J Appl Phys*, 1998, 83: 768
- [14] Ohiso Y, Amano C. Thin-film wafer fusion for buried-heterostructure InP-based lasers fabricated on a GaAs substrate. *J Appl Phys*, 2000, 87: 2857
- [15] Ram R J, Dudley J J, Bowers J E, et al. GaAs to InP wafer fusion. *J Appl Phys*, 1995, 78: 4227
- [16] Ohiso Y, Amano C, Itoh Y, et al. Long-wavelength (1.55- μ m) vertical-cavity lasers with InGaAsP/InP-GaAs/AlAs DBR's by wafer fusion. *IEEE J Quantum Electron*, 1998, 34: 1904
- [17] Lao Yanfeng, Wu Huizhen, Huang Zhanchao. Luminescent properties of annealed and directly wafer-bonded InAsP/InGaAsP multiple quantum wells. *Semicond Sci Technol*, 2005, 20: 615

Optical Properties of Direct Wafer Bonded Micro-Cavity Structures^{*}

Lao Yanfeng, Wu Huizhen[†], Huang Zhanchao, Liu Cheng, and Cao Meng

(*State Key Laboratory of Functional Materials for Informatics, Shanghai Institute of Microsystem and Information Technology, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200050, China*)

Abstract: Fabry-Perot micro-cavity resonator structures are directly wafer bonded. Their optical properties of reflectivity are measured using Fourier-transform infrared spectroscopy and simulated theoretically using transfer matrix method. An exponential variation of optical thickness for multi-layers at the both sides of the bonding interface is constructed to analyze the effects of wafer-bonding on the micro-cavity structures. Results show that lower-temperature bonding is advantageous for the fabrication of high-optical quality structures. But a defect-blocking layer should be involved into the wafer-bonded structures for the improvement of bonding quality when a higher annealing temperature is used.

Key words: direct wafer bonding; interface defect; reflectivity spectrum

PACC: 7280E; 7210F; 4225G

Article ID: 0253-4177(2006)S0-0304-05

^{*} Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China(No.2003CB314903)

[†] Corresponding author. Email: hzww@mail.sim.ac.cn

Received 10 November 2005