

# Si 非平面衬底上 SiGe/Si 量子阱 的光致发光特性 \*

杨沁清 钱毅 董文甫 王启明 崔堑 黄绮 周钧铭

(中国科学院半导体研究所 北京 100083) (中国科学院物理研究所 北京 100080)

**摘要** 采用一种晶向性腐蚀方法, 在(100)Si 平面衬底上腐蚀得到一种非平面结构, 经 SiGe MBE 外延后, 从 SEM 照片上可以看出, SiGe 外延层是一种量子点、线和阱的混合结构。非平面结构上的 SiGe 层的发光强度为平面结构上的 8~10 倍。从 SiGe 层内发出的发光强度占样品总发光强度的 96%, 且  $m \approx 1.1$  的值表明外延层的质量及对载流子的收集效率是高的。随着激发功率的增加, 可以看到 PL 谱的蓝移。

PACC: 3130J, 8120, 3250F, 6855

## 1 引言

长期以来, 在光电子技术发展和器件产品方面, GaAs, InP 基材料占支配地位。然而由于这些材料和器件在成本、成品率、集成度和工业化生产方面远不及 Si 材料和器件成熟, 尤其它不能与 Si 电路工艺兼容集成, 所以各国研究人员已把注意力转向对 Si 基光电子材料和器件方面的发展研究, 期望在这一领域能有所突破。关键是探索有效的 Si 基发光材料和器件。在这方面涉及到的研究内容较多, 如多孔 Si 发光、SiGe 量子材料发光、纳米 Si 发光, 掺 Er 硅发光以及硅化物材料发光研究等。以 SiGe 材料的发光研究报道较多。由于硅的间接带特性, 发光效率比 III-V 族材料低三个量级以上, 所以研究硅基发光材料和器件是一个难度很大的前沿课题。目标首先是提高发光效率。SiGe/Si 量子点或量子线的制备及其发光特性的研究, 是当前热点课题之一<sup>[1~5]</sup>。开展这一研究要利用外延生长(如 MBE 生长)的特性, 要利用精细光刻及腐蚀技术。如用电子束成像技术来光刻并腐蚀出精细的 W 型或 V 型槽, 然后在槽内外延生长 SiGe/Si 量子线材料就是一个实例<sup>[3]</sup>。

本文报告了一种既有 V 型槽, 又有“金字塔”尖顶的非平面结构衬底上外延 SiGe/Si 量子阱材料的发光特性。

## 2 实验方法

在 Si 衬底的不同晶面上, 由于其原子面密度不同, 相应的腐蚀速率也不同。对于一定类

\* 本研究项目得到国家“863”计划光电子主题的资助

杨沁清 男, 1938 年生, 副研究员, 从事 III-V 族化合物 OEIC 的研制。现在从事硅基光电子器件的研制  
董文甫 男, 1959 年生, 博士, 从事 SiGe 发光器件的研究。现在中科院微电子中心从事 SiGe 基区 HBT 的研制  
王启明 男, 1934 年生, 中国科学院院士, 博士生导师, 现从事 III-V 族基、硅基光电子器件研究

1995 年 10 月 24 日收到初稿, 1996 年 11 月 8 日收到修改稿

型的化学腐蚀液,显示出一定的晶向选择性. 我们选用一种具有晶向选择性的腐蚀液,在 60~100°C 范围内对(100)Si 片进行腐蚀,可以得到一个由大量“金字塔”型的尖峰组成的非平面形貌. 我们称这类形貌为非平面结构. 图 1(见图版 I)给出非平面结构的扫描电子显微镜(SEM)俯视照片. 图 2(见图版 I)给出了断面及侧视 SEM 照片. 得到这种非平面结构的 Si 衬底后,用固体源 MBE 系统(VG80S)生长 Si 和 SiGe 层. 衬底经常规工艺清洗后,进入生长系统,再进行生长前的预处理. 预处理后无需生长 Si 的缓冲层,直接生长 SiGe 层. 生长温度为 850°C. 生长过程中,对 SiGe 层的 Ge 含量设定为  $x=0.3$ , 厚度设定为  $W=3.6\text{nm}$ . SiGe 层生长后,再生长不掺杂的 Si 层作覆盖层,厚度为 500nm. 生长完所需结构之后,取出样品,进行光致发光测量.

### 3 非平面结构的特征

#### 3.1 腐蚀后 Si 衬底表面的特征

如前所述,经选择性腐蚀后的(100)Si 表面,出现大量的随机排列的“金字塔”型的尖峰,这些尖峰大小有异,每一个尖峰是 4 个(111)面组成,这四个(111)面相交形成四个棱,棱的晶向是(110). 尖峰高低不等,在 5~10 $\mu\text{m}$  范围内,尖峰的谷底(沟槽)是(100)面,有宽有窄,最小宽度约为 1 $\mu\text{m}$ . 如图 3 所示(见图版 I). “塔尖”不一定是全尖的,有些呈“平台”状,宽度约 1 $\mu\text{m}$ ,如图 4 所示(见图版 I).

#### 3.2 外延后的特征

图 5(见图版 I)给出外延层的断面 SEM 照片. 从照片上可清晰地看出 Si 衬底, SiGe 外延层和 Si 的覆盖层的结构.

a (111)面上(坡面), SiGe 层的厚度约 3nm, Si 覆盖层的厚度约 439nm. 在(100)面上(谷底面), SiGe 层的厚度约 6nm, Si 覆盖层的厚度约 450nm. 这是由于在(111)面上的生长速率与(100)面上的生长速率不同引起的.

b 不论在(111)面还是(100)面上, SiGe 量子阱层有些区域是不连续的,是断开的. 断开的 SiGe 段长度约 12~15nm. 很可能有大约  $15 \times 15\text{nm}$  大小的 SiGe 的小区域存在. 我们样品所观察的长度为文献[5]中给的长度的 1/10, 阵宽为 1/3~1/5. 可以认为这是 SiGe 量子点.

c 图 2 和 6(见图版 I)的照片中除可以清晰地看到外延结构外,还可以看到“塔顶”平台已在 Si 覆盖层上生成“尖顶”,这些尖顶是由 4 个(113)面组成的.

### 4 PL 谱的特征

由 Strum 等人第一个证明 SiGe/Si 量子阱的带边光发射以来<sup>[6]</sup>, 光致发光(PL)测量一直是用来鉴别硅基材料质量及发光特性的有效手段. 我们也采用 PL 谱的测量来了解非平面衬底上 SiGe 层的发光特性. 样品固定在一个低温变温系统中,该系统可使样品温度在 10~300K 范围内改变. 激发光源是 488nm 的 Ar<sup>+</sup>激光器. 样品发出的荧光会聚到单色仪上,再由液 N<sub>2</sub> 冷却的 Ge 探测器探测,经锁相放大后由记录仪记录测得的 PL 光谱.

在 PL 谱特性上同样反映了表面结构和外延层结构的多样性. 图 7 是在 10K 下用不同的激发功率测到的一组 PL 谱. 从中可以判别出四类发光峰. 高能量一边的 TOSi 峰. 这是由

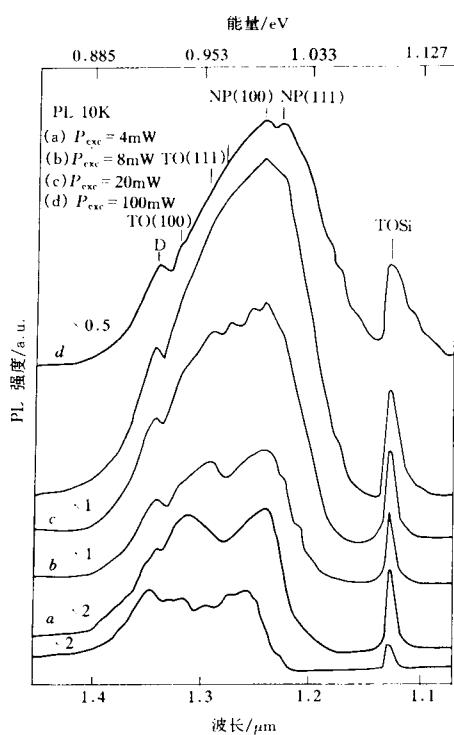


图 7 非平面衬底上 SiGe 样品 #036 的一组 PL 谱线

衬底发出的有 TO 声子参与的发光峰(1100meV). 它的位置不随激发功率的变化而变化. 低能量一边 D 峰, 与文献上报道的  $D_3$  峰相近<sup>[7]</sup>, 是一个深能级峰(925meV). D 峰的峰位也不随激发功率的变化而变化. NP(111), TO(111) 和 NP(100), TO(100) 两组发光峰分别对应于(111)面, (100)面的 SiGe 量子阱内发出的无声子参与(NP)和有 TO 声子参与(TO)的发光谱线. 这两组 NP 峰与 TO 峰的能量差约 53~58meV, 与 Si-Si 键的 TO 声子的能量相当. 在低激发功率的条件下( $<1\text{mW}$ ), PL 谱线的高能边缘偏移低能量一侧. 随着激发功率的增加, PL 谱线的高能边缘偏移向高能量一侧(即蓝移), 发光强度较快增加. 这一现象可以作这样的解释, 在非平面衬底上, (100)面, (111)面等多个部位的 SiGe 量子

阱(或量子线、量子点)都能发出光致荧光. (100)面的量子阱宽度为 6nm, 阵内的子能级相对较低; (111)面的量子阱宽度约 3nm, 阵内的子能级相对较高. 在低激发功率的条件下, 聚集在(100)面量子阱中的光生载流子, 除由(100)面上光激发产生的以外, 还有从(111)面上迁移来的. 这一条件下的发光, 主要是(100)面的发光. 在高激发功率的条件下, 不论是(100)面或(111)面的量子阱的子能带中, 有着更高密度的载流子填充, 由量子限制效应贡献的 NP 峰的跃迁几率增加很快. 因此 NP(100), NP(111)的增大比 TO(100), TO(111)峰增加更快, 从而发生了由于子带填充效应产生的蓝移现象. 由 NP 峰的变化可明显地看出来. 随着激发功率的增加, D 峰的增加则较缓慢, 可以理解为在一定的深能级密度下, 深能级有逐渐饱和的趋势.

表 1 给出了不同激发功率的条件下, SiGe 量子阱区发光强度的积分  $P_1$  与 SiGe 量子阱区及 Si 衬底区总发光强度积分  $P_T$  之比  $\eta = P_1/P_T$  的数据. 这一数据可以看出, 仅约 3~6nm 厚的 SiGe 层的发光占总发光强度的 96%, 而 Si 衬底的发光仅占 4%. 激发光功率大于 100mW 时, SiGe 量子阱区的发光所占的比例有所下降. 可能有两个原因, 一是 SiGe 量子阱内的能带在大激发功率下, 趋于填满. 二是大激发功率下 PL 谱线的展宽和延伸, 一部分与 TO Si 重叠, 提高了 TO Si 峰值及面积. 所以在计算发光强度积分时, 会引入一定的误差.

表 1 不同激发功率下 SiGe 量子阱区发光所占的比例

激发功率 $P_{\text{ex}}$	2mW	4mW	8mW	20mW	40mW	100mW
$\eta$	0.976	0.96	0.964	0.959	0.969	0.918

日本东京大学 S. Fukatsu 等人的研究结果<sup>[8]</sup>表明可以通过调节 SiGe 量子阱的宽度  $W$  和  $x$  值, 以使阱内有一个子能级与 Si 衬底的价带顶对齐, 并产生能级的共振作用, 由此可以提高 SiGe 量子阱对光生载流子(指空穴)的收集效率, 进而提高量子阱内的发光比例。我们通过计算得出, 当  $W = 3\text{nm}$ ,  $x = 0.28$  时, SiGe 量子阱内的价带顶与 Si 衬底的价带顶的能量差为  $\Delta E_V = 0.2352\text{eV}$ , 在阱内的子能级有三个, 它们离价带顶的能量差分别为  $\Delta E_1 = 0.0638\text{eV}$ ,  $\Delta E_2 = 0.2126\text{eV}$ ,  $\Delta E_3 = 0.2352\text{eV}$ , 即第三个子能级与 Si 价带对齐。这些数据可以阐明在我们的样品中 SiGe 层对光生载流子的收集效率高, 其发光所占的比例高达 96% 以上的原因。这一能级共振作用是设计 SiGe 发光器件所必需考虑的重要因素。

## 5 非平面结构与平面结构的 SiGe 量子阱发光特性的比较

为了对比, 我们按非平面结构上生长 SiGe 量子阱的生长参数, 生长了平面结构的 SiGe 量子阱材料, 并在相同的条件进行 PL 谱测量。图 8 中对比了两种结构的 PL 谱线。非平面结构的 PL 谱的峰值强度约为平面结构的 PL 谱的峰值强度的 8~10 倍, 而强度积分的比为 11.6 倍。同时很清楚看到在非平面衬底 PL 谱中  $\text{NP}(111)/\text{TO}(111)$  比值显著大于平面衬底的比值。它说明了量子限制效应的作用得到了增强。图 9 给出平面结构样品 #033 和非平面结构样品 #036 在相同的激发强度下, 发光强度随温度变化的比较。由图可以看出平面结构的量子阱的发光强度随温度的升高而下降趋势略快些, 非平面结构的量子阱的发光强度随温度的升高而下降的趋势要慢些。实验表明 #036 样品在 200K 下仍能观察到 PL 峰。由这两图可以看出, 不论是发光特性还是温度特性, 非平面结构的 SiGe 量子阱要比平面结构的 SiGe 量子阱有较大的改善。据结晶结构的简单几何学计算可知, 4 个(111)面的面积(金字塔的侧面积)为它下面的(100)面的面积(塔底的面积)的 1.22 倍。所以, 非平面结构量子阱的

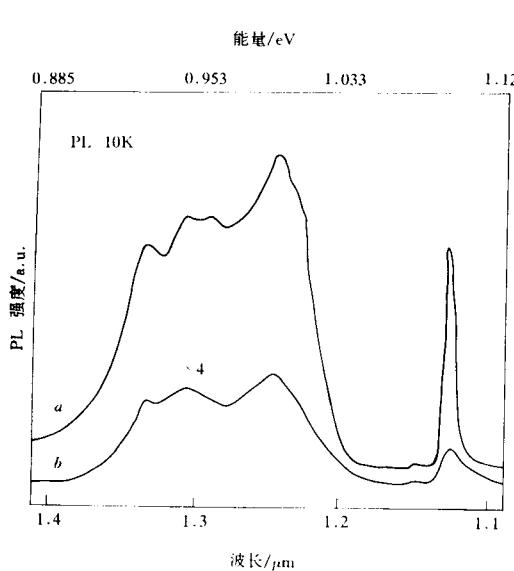


图 8 平面与非平面衬底上 SiGe 样品  
#033、#036 的 PL 谱线的对比

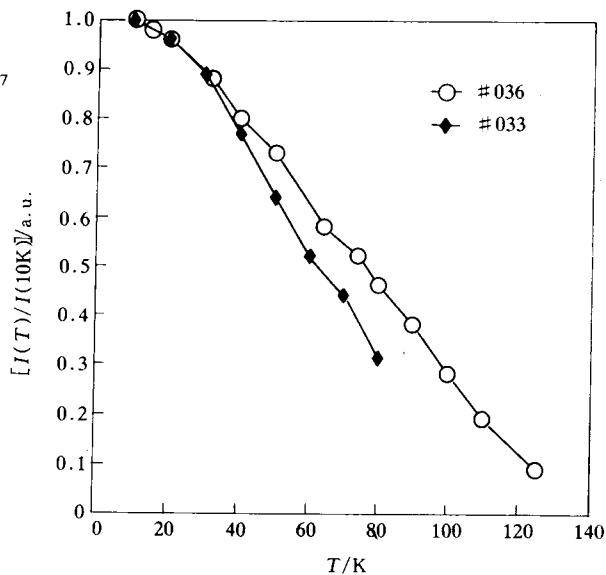


图 9 归一化 PL 积分强度随温度变化的曲线  
#033 为平面结构样品; #036 为非平面结构样品。

发光为平面结构量子阱的发光的近 10 倍,不能简单的用面积的增加来解释。非平面结构中的相交晶面上的应力释放使得外延的 SiGe 量子阱材料更好、更稳定,由于(111)面上出现了量子尺寸的小区域,因此量子限制效应比(100)面更强,更有利提高发光效率。这与量子点提高发光效率的报道是一致的。

## 6 外延层的质量考虑

经过选择性腐蚀后的非平面结构的表面,是否适合于外延出高质量的 SiGe 层,图 10 中给出有关的数据信息。该图给出的是 SiGe 量子阱的发光强度(积分强度并归一化) $I$  与激发功率  $P_{ex}$  的关系,即

$$I \propto P_{ex}^m$$

据东京大学 S. Fukatsu 等人的推导<sup>[9]</sup>,认为在激发功率比较小的情况下( $<10\text{mW}$ ),若  $m \geq 2$  时,表明外延层的质量不好,存在大量的非辐射复合通道,严重分流了光生载流子

并导致非辐射复合。若  $m \approx 1$  时,表明外延层质量好,层内的非辐射复合通道密度很低,光生载流子绝大部分都能复合发光。而  $m < 1$  时,则表示载流子的复合发光出现饱和现象。图 10 给出的非平面结构的样品 #036,在低激发功率范围内, $m \approx 1.1$ ,在较高的激发功率范围, $m \approx 0.60$ 。表明 SiGe 外延层的质量是好的。图中还给出了平面结构样品 #033 在较高激发功率下的  $m$  值。

从图 7 的一组 PL 谱中可以看出,深能级峰 D 有相当的强度,其峰值不随激发功率的改变而改变。在 125 K 的 PL 谱中仍能观察到 D 峰的存在。在非平面结构的表面,存在大量的“棱”或“沟边”,这些是(111)面与(111)面和(111)面与(100)面相交的交界面。在

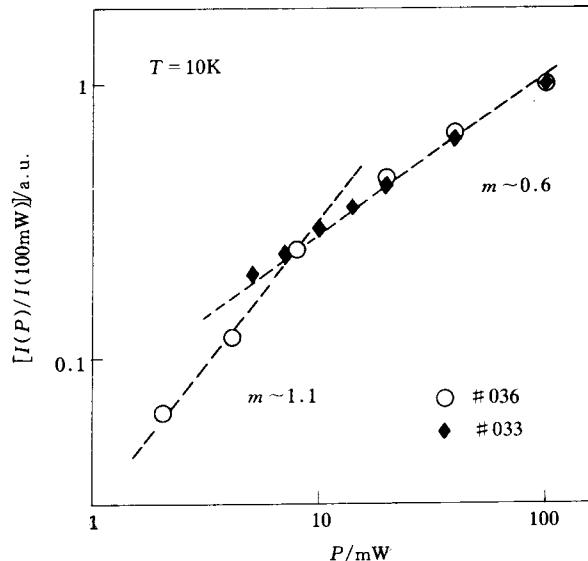


图 10 归一化 PL 积分强度  $I$  随激发功率  $P$  变化的曲线  
#033 为平面结构样品; #036 为非平面结构样品。

SiGe 的应变生长过程中,交界面处适于应力的释放,产生缺陷,这是产生深能级 D 峰的原因。

从发光强度来看,从  $m$  值的大小来看,总体上可以认为这种非平面衬底上生长的 SiGe 外延层的质量是好的。

## 7 结语

在我们测量过的数十批样品中,这种非平面结构样品的 PL 谱测量的重复性是最好的。在Φ50mm 大样品中切出几处不同的小样品都能测到大致相同的 PL 谱线。从 SEM 照片观察到的结构看,样品存在近量子点、量子线的结构。从总体上看,非平面结构的 SiGe 量子阱

的发光强度要比平面结构的 SiGe 量子阱的发光强度要强的多, NP/TO(111)的比值也显著提高。除考虑面积的扩大与外延层质量的优异等因素外, 可认为(111)面的 SiGe/Si 量子阱发光效率比(100)面的要高。此外在(111)面有相当密度的 SiGe 量子点对发光效率的提高是有显著贡献的。但由于“塔”太高, 光刻工艺有困难, 尚未能制备出 LED 器件进行 EL 方面测量, 有待进一步在工艺上研究、改进。

**致谢** 本文所述的研究工作中, 得到国家光电子集成开放实验室半导体所区的黎健和张春辉在 PL 谱测量方面的大力协助, 以及国家光电子工艺中心葛璜和潘昆在 SEM 观察方面的帮助, 在此表示衷心的感谢。

### 参 考 文 献

- [1] Y.S. Tang *et al.*, J. Electronic Materials, 1995, **24** (2): 99.
- [2] A. Hartmann *et al.*, J. Appl. Phys., 1995, **77** (5): 1959.
- [3] N. Usami *et al.*, Appl. Phys. Lett., 1993, **63** (20): 2789.
- [4] N. Usami *et al.*, Appl. Phys. Lett., 1994, **64** (9): 1126.
- [5] R. Apetz *et al.*, Appl. Phys. Lett., 1995, **66** (4): 445.
- [6] J. C. Sturm *et al.*, Phys. Rev. Lett., 1991, **66**: 1362.
- [7] J. P. Noel *et al.*, Appl. Phys. Lett., 1990, **57** (10): 1037.
- [8] S. Fukatsu *et al.*, Exciton Diffusion and Carrier Collection in Strained  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$  Quantum Wells, Extended Abstracts of 1993 International Conf. on Solid State Devices and Materials, Makuhari, 1993, 901~903.
- [9] S. Fukatsu *et al.*, J. Vac. Sci. Technol., 1993, **B11**(3): 895.

## Strong Photoluminescence From $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ Quantum Wells on Non-Planar Si Substrate

Yang Qin Qing, Qian Yi, Dong Wen fu and Wang Qi Ming

(Institute of Semiconductors, The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083)

Cui Qian, Huang Yi and Zhou Jun ming

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

Received 24 October 1995, revised manuscript received 8 November 1996

**Abstract** Non-planar structure was prepared on (100) Si substrate by using an-isotropic etching solution. After growth of SiGe layer in SS-MBE system, cross-section structure shown by SEM pictures tells that the epi-layer consists of dots, wires and well structure. The PL intensity from non-planar structure of SiGe is 8~10 times as large as that from planar ones. The emission of more than 96% from SiGe layer and  $m \approx 1.1$  mean that the quality and carrier collection efficiency of SiGe layer are both high. Blue shift is seen in PL spectra as the excitation power increases.

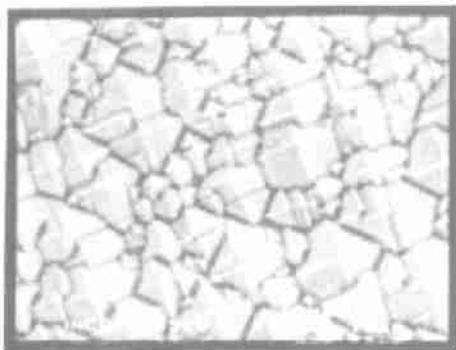


图 1 非平面结构衬底的 SEM 照片(俯视)

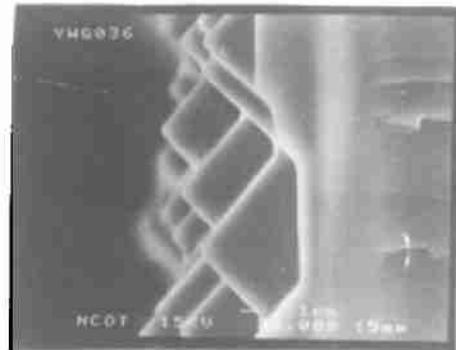


图 2 非平面结构衬底的 SEM 照片(侧视)

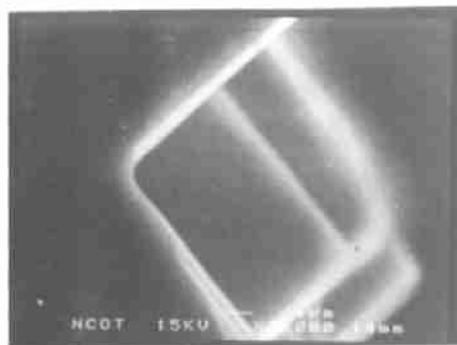


图 3 非平面结构衬底中的 V 型槽



图 4 非平面结构衬底中的  $\Delta$ 型槽

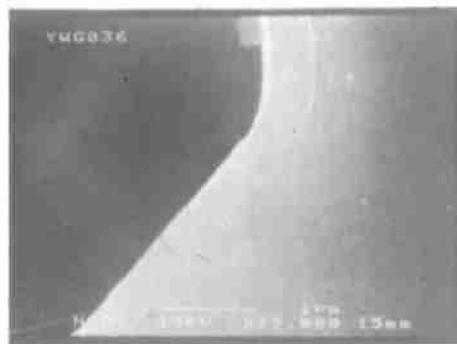


图 5 非平面结构衬底外延 SiGe 后的剖面 SEM 照片

坡面为(111)面, 谷底为(100)面

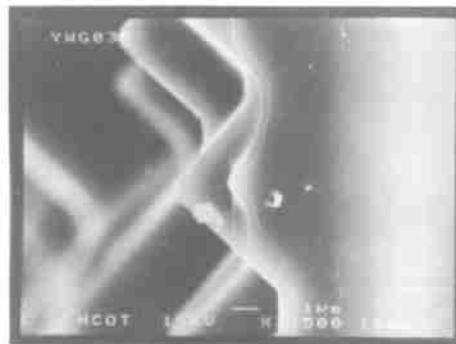


图 6 SEM 照片中部为外延出的(113)尖顶