

刻槽硅衬底上的 GaAs/AlGaAs 超晶格 材料的微结构特性

范 缔 文 梁 基 本

(中国科学院半导体材料科学实验室, 北京, 100083)

1990年9月19日收到, 1990年12月20日修改定稿

用分子束外延在有刻槽的{001}硅衬底上生长了 $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 超晶格材料, 利用横断面透射电子显微术对非平面异质结的生长行为和微观结构进行了观察。研究结果表明硅衬底上刻槽的几何形状对外延层的微缺陷特性及生长行为有一定影响, 和 Si{001}晶面相比, Si{113}可能是一个有利于生长半导体异质结的晶面。

前 言

近年来, GaAs/Si 异质结外延的生长受到广泛重视并取得了迅速发展。主要由于它可以把具备有成熟工艺的硅大规模集成电路和 GaAs 光电器件结合在同一芯片上。从工艺角度看, 希望外延的 GaAs 层和 Si 衬底的表面处在同一水平面上。为了实现外延层和衬底的平面化, 采用 Si 衬底刻槽, 再用分子束外延 GaAs 将沟槽填平的方法可以满足这一技术要求。因此, 在继大面积平面 GaAs/Si 异质结材料的深入研究之后, 对于有刻槽的硅衬底上形成的非平面 GaAs/Si 异质结材料的研制已成为有兴趣的课题。

由于 Si 和 GaAs 之间存在高达 4% 的晶格失配率及大的热膨胀系数差别导致 GaAs/Si 界面的失配位错密度很高。为了深入认识界面缺陷的性质并改进外延层的质量, 许多科学工作者已做了大量研究并取得了成功的结果, 目前已经能够制备出高质量、大面积 GaAs/Si 异质结材料。但是, 在有刻槽的硅衬底上生长的非平面 GaAs/Si 异质结和大面积平面 GaAs/Si 异质结具有不完全相同的界面特性。这方面的工作也陆续见有报道^[1-3]。

在非平面异质结材料的研制中, 几何因素起着重要作用, 在晶格匹配异质结 $\text{GaAs}/\text{AlGaAs}$ 系中已就这方面的课题展开了广泛研究^[4-7]。对于在有刻槽的硅衬底上生长的 GaAs 外延材料的应变异质结体系中, 由于复杂的几何因素再加上大的晶格失配使外延层的生长行为和界面缺陷表现出异于平面 GaAs/Si 异质结材料的特性, 这方面的研究工作还有待深入进行。

本文介绍了在有刻槽的(001)硅衬底上, 用分子束外延生长的 $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 超晶格异质结材料的横断面透射电子显微镜研究结果, 从衬底表面的原子结构的观点讨论了所得的实验结果。

实验细节

取用晶面法线朝 $\langle 110 \rangle$ 方向倾斜 4° 的 P 型 (001) 硅片为衬底材料。在硅片清洗后，首先生长一层厚度为 400nm 的 SiO_2 层，再用光刻技术开长方形窗口，选用 HF: $\text{HNO}_3 = 1:19$ 的溶液对窗口进行腐蚀，得到深度约为 $2\mu\text{m}$ 的槽。将这种硅衬底进行分子束外延生长 $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 超晶格材料，直至外延层将沟槽填平。所获得材料的生长结构见图 1。

用常规技术将上述的材料制备成法向沿 $[1\bar{1}0]$ 、可供透射电镜观察用的电子透明薄膜，在日立 H-9000 型透射电子显微镜中，用 300kV 的加速电压对试样进行了横断面透射电子显微镜观察。

实验结果

对若干个样品的各个沟道进行了横断面透射电子显微镜观察，发现槽的宽度、间距以及腐蚀剂等工艺细节对槽的几何轮廓有一定的影响，造成了不同沟槽的边沿具有不同的坡度。图 2(a)* 为相邻两个沟槽中靠近槽边壁部位的典型横断面透射电子显微镜照片。该图 2(a) 表明这两个槽的边壁具有不同的斜率，两个沟槽相对于中间的小岛是不对称的。

对各个沟槽内生长的外延层分别进行了透射电子显微镜观察，结果表明在槽中平台部位和在槽边沿斜坡部位中生长的外延层具有不同的特征。平台部位中外延生长的 $\text{GaAs}/\text{AlGaAs}$ 超晶格材料的界面平直、层厚均匀、界面失配位错特性和平面 GaAs/Si 异质结中的行为相似。但是，在槽边沿部位的外延层的生长行为和缺陷特征却比较复杂。

图 2(b)* 为一般情况下，沟槽边沿部位的透射电子显微镜形貌像。可以注意到这类槽壁的各个部位具有大致相同的斜率，从斜坡部分外延出来的 $\text{GaAs}/\text{AlGaAs}$ 超晶格中，界面波动起伏、厚度变化较大，和平台部位相比，界面失配位错和微孪晶等缺陷的密度也较高。

但是也注意到还存在另一类沟槽，这类沟槽的槽壁大约是由几个具有不同取向的晶面构成。图 3(a)* 是在入射电子束方向沿 $[1\bar{1}0]$ ，衍射矢量 $\mathbf{g} = [220]$ 下对槽边沿拍摄的透射电子显微镜明场像。和图 2(b) 中的沟槽相比，此沟槽边沿的形貌具有两个特点：1) 虽然平台区的界面失配位错密度很高，但是一进入斜坡的拐弯处，位错密度就急剧下降。2) 边沿部位的外延层中的位错密度分布不均匀，沿着槽的边界从下向上观察，可发现

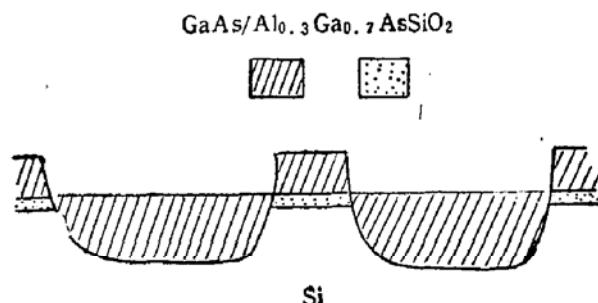


图 1 刻槽硅上生长的 $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 外延层

* 图 2(a)(b)、图 3(a)(b)、图 4 分别见图版 I、II、III。

位错密度又在逐渐增高。但是即使位错密度有所增加,和平台部位相比也是很低的,而且位错大多局限在平行于界面的窄带中,从衬底延伸到表面的位错较少。

由于利用透射电子显微镜观察的晶体中的缺陷像是来源于缺陷的晶格畸变所产生的衍射衬度,因此表现出来的缺陷特征将会随着入射电子束方向 B 及 g 矢量的变化而变化,所以仅仅从某一特定条件下观察到的缺陷特征去判断缺陷的总体行为是不充分的,必须在不同衍射条件下对同一缺陷区域进行原位观察。为此,将样品以 [110] 为轴倾转约 35° 角,使入射电子束 B 沿 [111],在该取向下,用 $g = [022]$ 拍摄同一部位的明场像如图 3(b)*。此图的结果表明,缺陷的具体形态虽有变化,但是缺陷变化的规律和图 3(a)完全相同,即边沿部位生长的外延层中的位错密度较低,随着界面下部向上部斜率的变化,位错密度又有所增高,但从衬底向表面延伸的位错比平台部位仍然少得多。

图 4* 为槽壁部位的较高倍数电子显微像,以图中的 {111} 微孪晶为内标,根据 GaAs 单晶中晶面间的取向关系可以建立该系统的晶向坐标,由此坐标可确定槽边界各部位的晶面取向。如图中所示 AB 界面近似平行于 (113) 平面,CD 界面近似平行于 (111) 平面,这可能意味着,当硅衬底刻槽过程中如果形成了 {113} 取向的界面,沿此种取向的界面生长的外延层完整性较高。

讨 论

以上通过对具有刻槽硅衬底上分子束外延生长的 GaAs/AlGaAs 超晶格材料的透射电子显微镜观察,表明刻槽的几何形状对外延层的结构完整性产生影响,如果刻槽边沿部位的界面接近 {113} 取向,则在这样的刻槽硅衬底上有可能生长质量较高的外延层。这一实验结果可以从 Si {113} 平面所具有的表面原子结构特性去予以理解。

W. Ranke 和邢益荣^{[3][4]}等通过 LEED 分析测定 Si {113} 具有单一的表面相,它对应于 (3×1) 的表面原子再构,即和 Si {111} 的 7×7 再构表面不同, Si {113} 具有较完整的表面原子排列。而且从另一方面测定了 Si {113} 具有和低指数平面一样低的表面电偶极矩有利于衬底保持电中性。基于 {113} 具有上述的表面原子结构特性,他们曾预言 Si {113} 是一种可用于生长优质半导体异质外延材料的晶面。本文所描述的用分子束外延在刻槽硅衬底上生长 GaAs/AlGaAs 超晶格材料的实验结果和这种预言在一定程度上是吻合的。

结 论

用横断面透射电子显微术观察了刻槽 $\langle 001 \rangle$ 硅衬底上生长的 $\text{GaAs/Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 超晶格材料的生长和界面缺陷特性。发现硅刻槽的几何形状对外延层的缺陷密度和生长行为均有影响,当刻槽边沿的界面接近 Si {113} 时,生长的外延层中缺陷密度低,而且缺陷多集聚在界面附近的窄带内。有可能 Si {113} 是一个有希望生长优质半导体异质结材料的晶面。

参 考 文 献

- [1] R. J. Matyi, H. Shichijo, T. M. Moore, and H-L Tsai, *Appl. Phys. Lett.*, **51**, 18(1987).
- [2] H. L. Tsai and Y. C. Kao *Appl. Phys. Lett.*, **57**, 288(1990).
- [3] J. De Boeck, J. B. Liang, K. Deneffe, J. Vanhellemont, D. Jr Arent, C. Van Hoof, R. Mertens, and G. Borghs, *Appl. Phys. Lett.*, **53**, 1071(1988).
- [4] P. Demeester, P. Van Daele, and R. Baets, *J. Appl. Phys.*, **63**, 2284(1988).
- [5] E. Kapon, M. C. Tamargo, and D. M. Hwang *Appl. Phys. Lett.*, **50**, 247(1987).
- [6] E. A. Fitzgerald, G. P. Watson, R. E. Proano, and D. G. Ast, P. D. Kirchner, G. D. Pettit, and J. M. Woodall, *J. Appl. Phys.*, **65**, 2220(1989).
- [7] E. M. Clausen, Jr., E. Kapon, M. C. Tamargo, and D. M. Hwang, *Appl. Phys. Lett.*, **56**, 776(1990).
- [8] W. Ranke and Y. R. Xing, *Physical Review B*, **31**(4), 2246(1985).
- [9] 邢益荣, 半导体学报, **7**(1), 106(1986).

Microstructural Characterization of GaAs/AlGaAs Superlattices Grown on Patterned Si Substrates

Fan Tiwen and Liang Jiben

(Semiconductor Materials Science Laboratory, Academia Sinica, China, Beijing, 100083)

Abstract

Microstructures and growth behavior of GaAs/AlGaAs superlattices grown by molecular beam epitaxy on Si{001} patterned substrates are examined by cross-sectional transmission electron microscopy studies. It is found that geometrical profile of channels etched has an influence on characteristics of microdefects and growth behavior of epitaxy layers. Compared with Si{001} crystal planes, Si{113} may be promising for the semiconductor heterojunction epitaxy.