

УДК 538.911

**ВЛИЯНИЕ ДИСЛОКАЦИОННОГО ФИЛЬТРА
НА ОСНОВЕ LT-GaAs НА СОВЕРШЕНСТВО СЛОЁВ GaAs/Si***

Д. С. Абрамкин^{1,2}, М. О. Петрушков¹, Е. А. Емельянов¹,
М. А. Путьято¹, Б. Р. Семягин¹, А. В. Васев¹, М. Ю. Есин¹,
И. Д. Лошкарев¹, А. К. Гутаковский^{1,2},
В. В. Преображенский¹, Т. С. Шамирзаев^{1,2,3}

¹Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН,
630090, г. Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, 13

²Новосибирский государственный университет,
630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

³Уральский федеральный университет,
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19

E-mail: demid@isp.nsc.ru

Обсуждается влияние дислокационных фильтров, созданных на основе низкотемпературных слоёв (LT) GaAs, и послеростового отжига на совершенство гетероструктуры GaAs/Si. Показано, что слои LT-GaAs снижают плотность прорастающих дислокаций и уменьшают шероховатость поверхности. Послеростовой отжиг при температуре 650 °С снижает концентрацию центров безызлучательной рекомбинации в слоях GaAs/Si до уровня, близкого к уровню в слоях GaAs, выращенных на согласованной подложке.

Ключевые слова: эпитаксия, низкотемпературный GaAs, дислокационный фильтр.

DOI: 10.15372/AUT20180210

Введение. Кремний и соединения A^{III}B^V являются основными современными полупроводниковыми материалами. Интеграция высокоэффективных светоизлучающих приборов, созданных на основе гетероструктур A^{III}B^V, с кремниевой технологией открывает перспективу значительного ускорения обработки информации за счёт передачи данных по оптическому каналу как в пределах одного процессора, так и между различными устройствами [1]. Из всех гетеросистем A^{III}B^V/Si наиболее интересна система GaAs/Si [2], позволяющая ожидать интеграцию в кремниевую технологию уже разработанных оптоэлектронных приборов на основе GaAs-технологии.

Основными проблемами, возникающими при выращивании слоёв GaAs на подложках Si, являются большие рассогласования постоянных решёток (4,1 %) и линейных коэффициентов термического расширения Si ($2,59 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$) [3] и GaAs ($5,73 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$) [4]. Из-за несоответствия параметров решёток в эпитаксиальных плёнках возникают механические напряжения, которые могут релаксировать путём введения дислокаций несоответствия плотностью до 10^9 – 10^{10} см^{-2} . Разница в коэффициентах термического расширения также способствует образованию большого количества дислокаций и появлению микротрещин в плёнке GaAs в процессе охлаждения. Основные методики, направленные на снижение плотности дислокаций, являются общими как для GaAs/Si, так и для других гетероструктур A^{III}B^V/Si или Ge/Si. К таким методикам относятся: 1) отжиги на различных этапах роста [5] и после роста [6, 7]; 2) снижение температуры и скорости роста на начальной стадии, так называемый двухступенчатый рост [8, 9]; 3) использование дислокационных фильтров,

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 17-72-10038).

представляющих собой вставки слоёв напряжённого материала или напряжённых сверхрешёток, которые способствуют аннигиляции пронизывающих дислокаций (ПД) [10, 11]. Предварительные исследования показывают, что в качестве дислокационных фильтров возможно использование слоёв GaAs, выращенных при низких (до 250 °С) температурах (низкотемпературные слои (LT) GaAs) [12, 13]. К сожалению, применяемые по отдельности перечисленные технологические приёмы не позволяют получать совершенные структуры GaAs/Si для создания эффективных светоизлучателей и фотоприёмников на основе соединений $A^{III}B^V$. Тем не менее на повышение качества таких структур можно рассчитывать при использовании комбинаций различных технологических приёмов.

Целью данной работы является изучение влияния внедрения слоёв LT-GaAs и послеростового отжига на совершенство структур GaAs/Si. Показано, что применение слоёв LT-GaAs в качестве дислокационных фильтров способствует снижению плотности ПД и улучшает морфологию поверхности GaAs. Послеростовой циклический отжиг снижает концентрацию центров безызлучательной рекомбинации в структурах GaAs/Si, причём этот эффект проявляется сильнее для структур со слоями LT-GaAs.

Рост гетероструктур GaAs/Si. Исследуемые слои GaAs/Si выращивались в модернизированной установке молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) «Штат» на Si-подложке, отклонённой на 6° от сингулярной грани (001) в направлении [110]. Для удаления окисного слоя с поверхности Si на подложку при температуре $T_S = 720^\circ\text{C}$ подавался поток атомов кремния в течение 10 мин. После удаления окисленного слоя подложка отжигалась в течение 10 мин в условиях сверхвысокого вакуума при температуре 800 °С. Отжиг проводился для формирования системы двухатомных террас в целях предотвращения возникновения антифазных дефектов в слоях материалов $A^{III}B^V$, зарождающихся на поверхности кремния. После отжига подложка охлаждалась в условиях сверхвысокого вакуума до температуры образования слоя зарождения. Контроль за состоянием поверхности осуществлялся методом дифракции быстрых электронов на отражение.

При формировании слоя зарождения на Si-подложке сначала выращивалось 20 монослоёв GaP при $T_S = 330^\circ\text{C}$, затем температура снижалась до 260 °С и выращивалось 20 монослоёв GaAs. Слои формировались методом атомно-слоевой эпитаксии. Использование в качестве переходного слоя GaP обусловлено тем, что параметр его кристаллической решётки близок к параметру решётки Si. Это позволило разделить задачи оптимизации зарождения эпитаксиального слоя полярного полупроводника $A^{III}B^V$ на неполярном Si и перехода от параметра решётки Si к параметру решётки GaAs. Последующий рост структур GaAs/Si с профилями, показанными на рис. 1, *a, b*, проходил по двум сценариям. Первый был реализован при росте структуры, представленной на рис. 1, *a*. На слое зарождения последовательно формировались слои GaAs толщиной 400 нм и 2,1 мкм при температурах $T_S = 350$ и 600 °С соответственно. Нижний слой GaAs, выращенный при температуре 350 °С, формировался в несколько этапов, разделённых участками, на которых проводился отжиг при температуре 520 °С длительностью 1 мин. Во время отжигов рост слоя GaAs приостанавливался. Отжики проводились в целях улучшения морфологии поверхности эпитаксиальной плёнки. Места отжигов показаны стрелками на рис. 1. При формировании второй структуры первый сценарий модифицировался. В структуру внедрялись слои LT-GaAs толщинами 200 и 700 нм, выращенные при температуре подложки 200 °С, как это показано на рис. 1, *b*. Толщина верхнего слоя GaAs в структуре с LT-слоями равнялась 1,2 мкм, благодаря чему толщина обеих гетероструктур стала одинаковой (2,5 мкм).

После роста структуры подвергались циклическому отжигу. В процессе одного цикла отжига происходили: нагрев от 250 до 650 °С в течение 40 с, выдержка при температуре 650 °С в течение 30 с и естественное охлаждение до 250 °С в течение 2,5 мин. Всего было

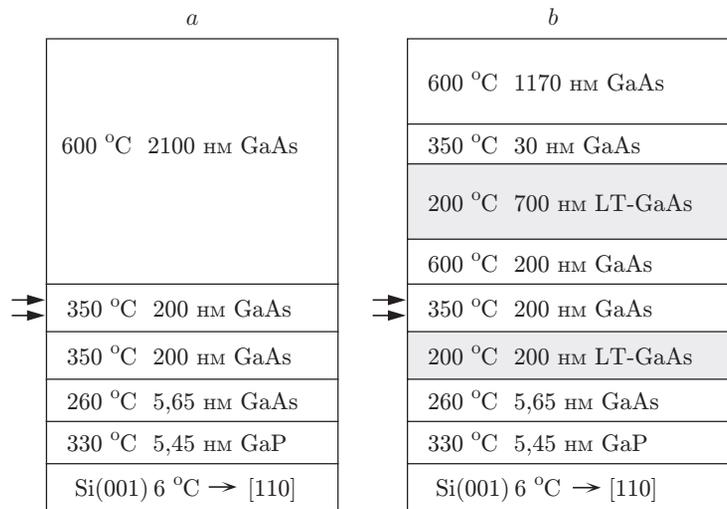


Рис. 1. Профили выращенных структур: *a* — GaAs/Si без слоёв LT-GaAs; *b* — GaAs/Si с промежуточными слоями LT-GaAs. Стрелками указаны места остановки роста и отжига при температуре 520 °C

проведено по 10 циклов отжига для каждого образца. Необходимо отметить, что в отличие от применяемых ранее высокотемпературных отжигов [6, 7] в нашем случае максимальная температура нагрева структур превышала температуру роста не более чем на 50 °C. Для оценки совершенства исследуемых структур GaAs/Si их характеристики сравнивались с характеристиками слоя GaAs толщиной 1 мкм, выращенного при температуре 580 °C на подложке GaAs(001).

Морфология поверхности гетероструктур оценивалась с помощью метода атомно-силовой микроскопии (АСМ) в полуконтактном режиме с применением микроскопа Solver 47. Кристаллическое качество образцов исследовалось методами двухкristальной рентгеновской дифрактометрии на дифрактометре DSO-1T с использованием кристалла-монокроматора Ge(004) в излучении $Cu_{K\alpha 1}$ и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) с помощью микроскопа JEM-4000EX (400 кэВ). Плотность пронизывающих дислокаций оценивалась по ПЭМ-изображениям, а также по плотности ямок травления. Для образования ямок травления образцы на 5 с помещались в расплав гидроксида калия при температуре 300 °C. Спектры стационарной фотолюминесценции (ФЛ) анализировались с использованием спектрографа Acton Advanced SP2500A и измерялись ПЗС-камерой с азотным охлаждением. Фотолюминесценция возбуждалась излучением лазерного диода GaN с энергией кванта 3,06 эВ и плотностью мощности 25 Вт/см². Измерения спектров ФЛ проведены при комнатной температуре.

Экспериментальные результаты. На рис. 2, *a, b* приведены АСМ-изображения поверхности структур GaAs/Si(001) с внедрёнными слоями LT-GaAs и без них. Измерение морфологии поверхности в поле сканирования площадью 10 × 10 мкм показывает, что внедрение в структуру слоёв LT-GaAs сопровождается уменьшением среднеквадратичной шероховатости более чем в 1,5 раза с $Sq = 3,3$ до $Sq = 1,9$ нм, как это видно из таблицы. Приведённые в таблице значения полной ширины на полувысоте (ПШПВ) рентгеновских кривых качания в отражении (004) для обоих типов структур как с внедрением слоёв LT-GaAs, так и без них оказываются близки и составляют 222–225". Послеростовой циклический отжиг приводит к близкому для обоих типов структур снижению значений ПШПВ рентгеновских кривых качания до 163–169".

На рис. 3 показано ПЭМ-изображение поперечного среза гетероструктуры GaAs/Si, содержащей слой LT-GaAs. Плотность ПД, измеренная в сечениях, соответствующих пер-

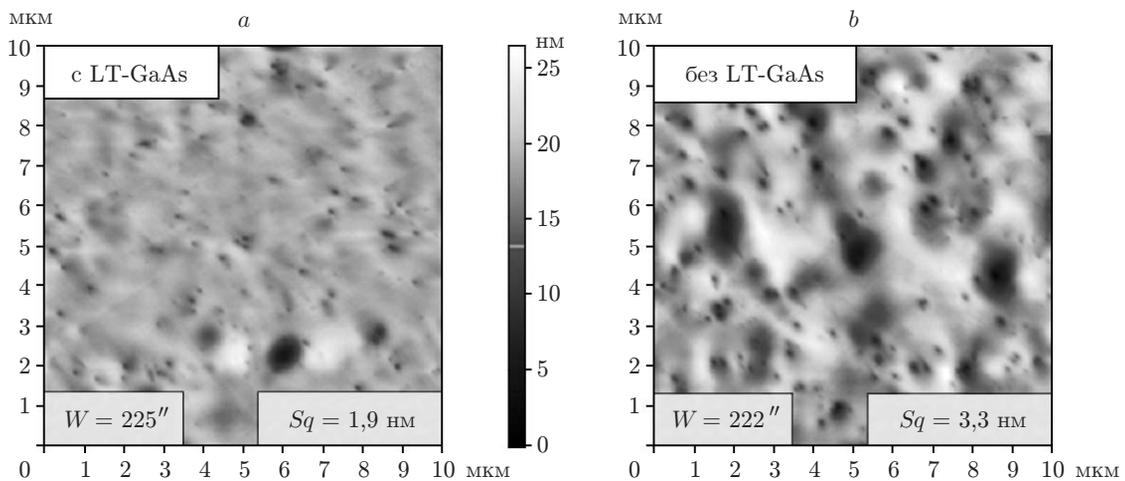


Рис. 2. АСМ-изображения поверхности структур GaAs/Si площадью 10×10 мкм: *a* — выращенных с внедрением слоёв LT-GaAs; *b* — без слоёв LT-GaAs. Указаны среднеквадратичные шероховатости поверхности Sq и ПППВ рентгеновских кривых качания W

**Экспериментальные данные для слоёв GaAs,
выращенных на согласованной подложке GaAs и подложках Si
с внедрением слоёв LT-GaAs и без внедрения**

Параметры полос ФЛ	Структура		
	GaAs/Si с LT-GaAs	GaAs/Si без LT-GaAs	GaAs
ПППВ кривых качания до отжига, угл. с	225	222	44
ПППВ кривых качания после отжига, угл. с	169	163	—
Sq , нм	1,9	3,3	0,5
Плотность ПД на поверхности, см^{-2}	$5 \cdot 10^6$	$>10^7$	—
Интегральная интенсивность ФЛ до отжига, отн. ед.	0,57	0,69	1,93
Интегральная интенсивность ФЛ после отжига, отн. ед.	1,93	1,65	—
Энергия максимальной ФЛ до отжига, эВ	1,4140	1,4155	1,4220
Энергия максимальной ФЛ после отжига, эВ	1,4130	1,4140	—
Остаточная деформация до отжига, %	0,91	0,75	—
Остаточная деформация после отжига, %	1,0	0,91	—

вому и второму слоям LT-GaAs, а также верхнему слою GaAs (обозначены цифрами 1–3), приведена в таблице и составляет $5 \cdot 10^{10}$, 10^{10} и менее чем $5 \cdot 10^6 \text{ см}^{-2}$. Кроме того, видно, что уменьшение плотности ПД происходит на верхних границах слоёв LT-GaAs. Плотность ПД в верхнем слое GaAs, определённая по плотности ямок травления, составляет порядка 10^6 см^{-2} , что хорошо согласуется с данными ПЭМ. Плотность ямок травления для структур без слоёв LT-GaAs измерить не удалось из-за высокой (более 10^7 см^{-2}) плотности ПД в верхнем слое GaAs.

Спектры стационарной ФЛ структур GaAs/Si, измеренные при комнатной температуре и плотности мощности возбуждения 25 Вт/см^2 до и после послеростового отжига, а также спектр слоя GaAs, выращенного на согласованной подложке, приведены на рис. 4. В спектрах ФЛ присутствуют полосы, соответствующие межзонной рекомбинации носи-

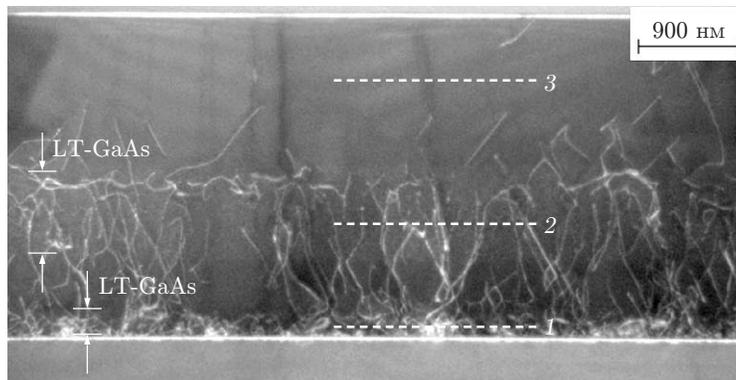


Рис. 3. ПЭМ-изображение поперечного среза гетероструктуры GaAs/Si с внедрёнными слоями LT-GaAs. Вертикальными стрелками обозначено положение слоёв LT-GaAs внутри структуры; 1–3 — сечения, в которых измерялась плотность

телей заряда в GaAs. Спектроскопические параметры полос ФЛ сведены в таблицу. Положения максимумов полос в спектрах ФЛ неотожжённых структур равны 1,4220, 1,4155 и 1,4140 эВ для слоёв GaAs, выращенных на согласованной подложке и на Si-подложках как с внедрением слоёв LT-GaAs, так и без внедрения. В результате послеростового отжига положения максимумов полос ФЛ структур, выращенных на Si-подложках, смещаются в низкоэнергетическую область спектра до значений 1,4140 и 1,4130 эВ в структурах, выращенных с внедрением слоёв LT-GaAs и без них. Ширины полос ФЛ во всех спектрах одинаковы и составляют 30 мэВ. Из сравнения спектров ФЛ неотожжённых гетероструктур со слоями LT-GaAs и без них видно, что наличие этих слоёв практически не влияет на интенсивность ФЛ. В то же время процедура послеростового циклического отжига GaAs/Si приводит к увеличению интенсивности ФЛ почти в 3 раза. Следует отметить, что интенсивность ФЛ отожжённой гетероструктуры GaAs/Si, выращенной с использованием слоёв LT-GaAs, практически равняется интенсивности ФЛ тестовой структуры GaAs/GaAs.

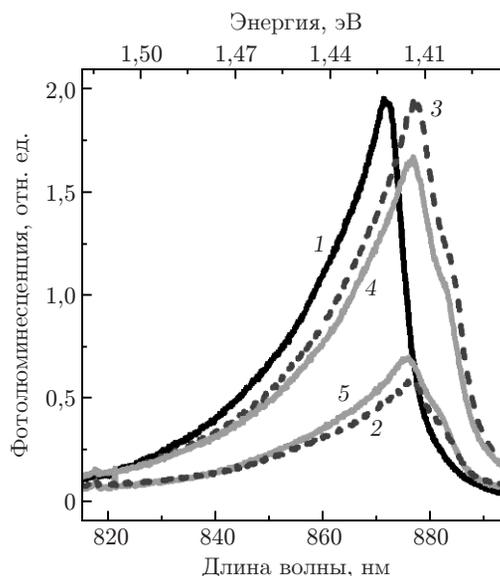


Рис. 4. Спектры стационарной ФЛ, измеренные при комнатной температуре и плотности мощности возбуждения 25 Вт/см^2 : для слоя GaAs, выращенного на согласованной подложке (кривая 1), и для гетероструктур GaAs/Si с внедрёнными слоями LT-GaAs до (2) и после (3) отжига и без внедрённых слоёв LT-GaAs до (4) и после (5) отжига

Обсуждение результатов экспериментов. Ключевыми характеристиками материала подложки для выращивания полупроводниковых оптоэлектронных гетероструктур являются морфология поверхности и содержание структурных и точечных дефектов. Из таблицы видно, что при одинаковой ширине рентгеновской кривой качания введение слоёв LT-GaAs приводит к уменьшению плотности ПД и улучшению морфологии поверхности. Поскольку ПШПВ является интегральной характеристикой эпитаксиальной структуры, а значительную часть толщины структур составляют переходные слои, содержащие дислокации несоответствия с высокой плотностью (10^9 – 10^{10} см²), мы предполагаем, что равенство ПШПВ определяется именно такими слоями с высокой плотностью дислокаций. Одинаковое уменьшение ПШПВ в обоих типах структур после циклического отжига при существенно отличающихся плотностях ПД в приповерхностном слое GaAs свидетельствует в пользу этого предположения.

Различие в шероховатости поверхности эпитаксиальных структур, выращенных с LT-слоем и без него, вероятно, определяется разностью в плотности пронизывающих дислокаций, которые оказывают влияние на длину диффузии адатомов на поверхности. Повышение плотности ПД ведёт к росту концентрации ступеней на поверхности и уменьшению длины пробега адатомов до встраивания, что препятствует выглаживанию поверхности.

Обсудим причину понижения плотности ПД в эпитаксиальных структурах с LT-GaAs. Известно, что в слоях LT-GaAs наблюдается избыток атомов As, не встроившихся в кристаллическую решётку во время низкотемпературного роста [12, 13]. Избыточный мышьяк деформирует кристаллическую решётку GaAs, что приводит к загибанию ПД вдоль границы LT-GaAs/GaAs. Этот процесс аналогичен образованию ломеровских дислокаций несоответствия при слиянии ПД [14].

Как видно из таблицы, положения максимумов полос ФЛ в спектрах всех исследуемых гетероструктур GaAs/Si сдвинуты в низкоэнергетическую область спектра относительно его положения в спектре ФЛ слоя GaAs, выращенного на согласованной подложке. Это смещение мы связываем с остаточными деформациями в слоях GaAs/Si, которые оказывают влияние на ширину запрещённой зоны. Несмотря на то что постоянная решётки GaAs на 4 % больше, чем постоянная решётки Si, расчёты в рамках приближения сплошной среды [15] показывают, что наблюдаемые спектральные смещения ФЛ GaAs соответствуют величинам остаточных деформаций растяжения 0,75–1,0 % (значения приведены в таблице). Для объяснения появления деформаций растяжения в слоях GaAs, выращенных на кремниевой подложке с меньшей постоянной решётки, необходимо принять во внимание тот факт, что введение в слои GaAs дислокаций несоответствия, обеспечивающих релаксацию механических напряжений, происходит при температуре роста структуры. При охлаждении структур из-за разницы линейных коэффициентов термического расширения постоянная решётки в Si-подложке уменьшается медленнее, чем в слоях GaAs, что и приводит к их растяжению.

Интегральная интенсивность слоёв GaAs, выращенных на Si-подложках с внедрением слоёв LT-GaAs и без них, примерно одинакова и заметно меньше, чем интенсивность слоя GaAs, сформированного на согласованной подложке. Это свидетельствует о введении в слои GaAs, выращенные на несогласованных Si-подложках, дефектов, выступающих в роли центров безызлучательной рекомбинации. Послеростовой циклический отжиг структур GaAs/Si приводит к увеличению интегральной интенсивности ФЛ почти в 3 раза. Причём в структурах GaAs/Si, полученных с внедрением слоёв LT-GaAs, интегральная интенсивность ФЛ после отжига увеличивается сильнее и становится равной интенсивности ФЛ слоя GaAs, выращенного на согласованной подложке. Незначительное (порядка 30 %) отличие интегральной интенсивности ФЛ в структурах GaAs/Si с внедрением слоёв LT-GaAs и без них при изменении концентрации ПД в приповерхностном слое GaAs, из которого

идёт излучение,* более чем на порядок величины, позволяет сделать вывод о том, что безызлучательная рекомбинация обусловлена не структурными, а точечными дефектами, концентрация которых после отжига уменьшается.

Найденные в данной работе оптимальные условия формирования GaAs/Si закладывают основы для получения совершенных гетероструктур A^{III}B^V и будут использованы нами в дальнейшем при оптимизации параметров оптоэлектронных структур с квантовыми точками и квантовыми ямами InAs, GaAs, InSb и GaSb в широкозонных матрицах AlAs на кремниевой подложке.

Заключение. В предлагаемой работе исследовано влияние буферных слоёв LT-GaAs и послеростового циклического отжига на совершенство слоя GaAs, выращенного на неогласованной Si-подложке. Показано, что слои LT-GaAs выступают в роли дислокационных фильтров, снижая плотность ПД, кроме того, их внедрение приводит к уменьшению шероховатости поверхности. Послеростовой отжиг структур с внедрёнными слоями LT-GaAs при температуре 650 °С позволяет снизить концентрацию точечных дефектов — центров безызлучательной рекомбинации в приповерхностном слое структуры до уровня, близкого к концентрации таких дефектов в гомоэпитаксиальном GaAs.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Thomson D., Zilkie A., Bowers J. E. et al. Roadmap on silicon photonics // Journ. Opt. 2016. **18**, N 7. 073003.
2. Болховитянов Ю. Б., Пчеляков О. П. Эпитаксия GaAs на кремниевых подложках: современное состояние исследований и разработок // УФН. 2008. **178**, № 5. С. 459–480.
3. Okada Y., Tokumaru Y. Precise determination of lattice parameter and thermal expansion coefficient of silicon between 300 and 1500 K // Journ. Appl. Phys. 1984. **56**, N 2. P. 314–320.
4. Новикова С. И. Исследование теплового расширения GaAs и ZnSe // Физика твёрдого тела. 1961. **3**, № 1. С. 178–181.
5. Akahori K., Wang G., Okumura K. et al. Improvement of the MOCVD-grown InGaP-on-Si towards high-efficiency solar cell application // Solar Energy Mater. Solar Cells. 2001. **66**, N 1–4. P. 593–598.
6. Lee J. W., Shichijo H., Tsai H. L., Matyi R. J. Defect reduction by thermal annealing of GaAs layers grown by molecular beam epitaxy on Si substrates // Appl. Phys. Lett. 1987. **50**, N 31. P. 31–33.
7. Yamaguchi M. Dislocation density reduction in heteroepitaxial III–V compound films on Si substrates for optical devices // Journ. Mater. Res. 1991. **6**, N 2. P. 376–384.
8. Akiyama M., Kawarada Y., Kaminishi K. Growth of single domain GaAs layer on (100)-oriented Si substrate by MOCVD // Jap. Journ. Appl. Phys. 1984. **23**, Pt. 2, N 11. L843.
9. Винокуров Д. А., Лантратов В. М., Сеницын М. А. и др. Свойства и особенности кристаллизации эпитаксиальных слоёв GaAs, выращенных на подложках Si(100) методом двухстадийного осаждения в МОС гидридном процессе // Физика и техника полупроводников. 1991. **25**, вып. 6. С. 1022–1029.
10. Soga T., Hattori S. Characterization of epitaxially grown GaAs on Si substrates with III–V compounds intermediate layers by metalorganic chemical vapor deposition // Journ. Appl. Phys. 1985. **57**, N 10. P. 4578–4582.

*Люминесценция наблюдается из узкого приповерхностного слоя, соответствующего глубине поглощения лазерного излучения. В GaAs для фотонов с энергией 3,06 эВ глубина поглощения равна нескольким десяткам нанометров [16].

11. **Yamaguchi M., Sugo M., Itoh Y.** Misfit stress dependence of dislocation density reduction in GaAs films on Si substrates grown by strained-layer superlattices // Appl. Phys. Lett. 1989. **54**. P. 2568–2570.
12. **Phua C. C., Chong T. C., Lau W. S.** Improved crystalline quality of molecular beam epitaxy grown GaAs-on-Si epilayer through the use of low-temperature GaAs intermediate layer // Jap. Journ. Appl. Phys. 1994. **33**, Pt. 2, N 3B. P. L405–L408.
13. **Petrushkov M. O., Putyato M. A., Gutakovsky A. K. et al.** Impact of LT-GaAs layers on crystalline properties of the epitaxial GaAs films grown by MBE on Si substrates // Journ. Phys.: Conf. Ser. 2016. **741**, N 1. 012020.
14. **Matthews J. W.** Accommodation of misfit across the interface between single-crystal films of various face-centred cubic metals // Phil. Mag. 1966. **13**, N 126. P. 1207–1221.
15. **Van de Walle C. G.** Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory // Phys. Rev. B. 1989. **39**. P. 1871–1884.
16. **Casey H. C., Sell D. D., Wecht K. W.** Concentration dependence of the absorption coefficient for n- and p-type GaAs between 1.3 and 1.6 eV // Journ. Appl. Phys. 1975. **46**, N 1. P. 250–257.

Поступила в редакцию 30 ноября 2017 г.
