МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ НИЖЕГОРОДСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. Н.И. ЛОБАЧЕВСКОГО»

На правах рукописи

Сушков Артем Александрович

СОЗДАНИЕ ПЛАТФОРМЫ НА ОСНОВЕ ПОДЛОЖКИ КЛАССА «КРЕМНИЙ-НА-ИЗОЛЯТОРЕ» ДЛЯ ЭПИТАКСИИ СЛОЕВ $A^{III}B^{V}$

Специальность 1.3.11. – Физика полупроводников

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физ.-мат. наук, профессор
Павлов Дмитрий Алексеевич

Нижний Новгород – 2023

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ 4
ГЛАВА 1. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ 11
1.1 Фундаментальные проблемы: антифазные границы, дислокации, трещины 14
1.2 Пути решения фундаментальных проблем 26
1.3 Подавление взаимной диффузии атомов на гетерогранице $A^{III}B^{V}/A^{IV}$ 43
1.4 Трудности эпитаксии на подложках класса «кремний-на-изоляторе» 46
1.5 Критерии платформы для эпитаксии гетероструктур $A^{III}B^{V}$ 49
1.6 Выводы к главе 1 51
ГЛАВА 2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА 52
2.1 Методы эпитаксии слоев $A^{III}B^{V}$/Ge/Si 53
2.2 Технология изготовления светоизлучающих p-i-n диодов 60
2.3 Методы измерений 61
2.4 Выводы к главе 2 66
ГЛАВА 3. СОЗДАНИЕ ПЛАТФОРМЫ Ge/Si/КНИ ДЛЯ ЭПИТАКСИИ $A^{III}B^{V}$ 67
3.1 Сравнение подложек класса «кремний-на-изоляторе» 68
3.2 Сравнение структурных свойств слоя Ge, выращенного разными методами 72
3.3 Сравнение гетероструктур $A^{III}B^{V}$ на платформах Ge/Si/КНИ, Ge/Si и GaAs 86
3.4 Выводы к главе 3 110
ГЛАВА 4. ИССЛЕДОВАНИЕ МОС-ГИДРИДНОЙ ЭПИТАКСИИ $A^{III}B^{V}$ 111
4.1. Режимы роста и параметры светоизлучающих гетероструктур 112
4.2 Исследование и внедрение методов уменьшения плотности дефектов и шероховатости поверхности 119
4.2.1 Дислокационные фильтры 120
4.2.2 Методы для уменьшения плотности антифазных дефектов 128
4.2.3 Система зародышевых слоев $Al_{0,3}Ga_{0,7}As/GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ 147
4.2.4 Выводы 154
4.3 Исследование светоизлучающих p-i-n диодов 155
4.4 Выводы к главе 4 162

ЗАКЛЮЧЕНИЕ 164

Список сокращений и условных обозначений 165

Благодарности 170

Список публикаций по теме диссертации 171

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ 176

Приложение А (рекомендуемое) Определение параметров светоизлучающей гетероструктуры 193

Приложения Б (рекомендуемое) Исследование гетероструктур Ge/Si и GaAs/$A^{III}B^{V}$/Ge/Si, выращенных на подложке «кремний-на-сапфире» 214

Приложение В (рекомендуемое) Релаксация решетки слоя Ge в созданной платформе Ge/Si/КНИ (001) 227

Приложение Г (рекомендуемое) Определение параметров сверхрешетки методом рентгеновской дифрактометрии 229

Приложение Д (справочное) Измерение толщины слоев на изображениях поперечного среза 240

Приложение Е (рекомендуемое) Измерение отражательной способности во время эпитаксии $A^{III}B^{V}$ 242

Приложение Ж (справочное) Ступенчатая морфология поверхности 247

Приложение И (справочное) Особенности препарирования поперечного среза сапфира 250

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность и степень разработанности темы исследования

Гетероструктуры класса «кремний-на-изоляторе» обладают уникальными электроизолирующими, волноводными свойствами и радиационной стойкостью. Кроме этого на подложках класса «кремний-на-изоляторе» достигнут высокий уровень развития технологии кремниевой наноэлектроники. Благодаря перечисленным выше преимуществам гетероструктуры класса «кремний-на-изоляторе» привлекли свое внимание в качестве подложек для решения актуальной задачи, заключающейся в объединении фотонной и электронной интегральных схем, с целью увеличения быстродействия, уменьшения энергопотребления, усиления помехоустойчивости, минимизации потерь сигнала и количества выделяемого тепла. Для развития этого направления необходимо решить ряд проблем создания кремниевых оптических межсоединений в интегральной микросхеме, в частности, проблему формирования эпитаксиальными методами на подложках класса «кремний-на-изоляторе» гетероструктур $A^{III}B^{V}$ высокого кристаллического качества, излучающих в окне прозрачности объемного Si.

Фундаментальные особенности гетероэпитаксии $A^{III}B^{V}$ на поверхности кремния являются основными причинами низкого кристаллического качества полупроводников $A^{III}B^{V}$. К таким особенностям относятся дефекты, которые образуются в слоях $A^{III}B^{V}$ в процессе и после роста: антифазные границы, дислокации и термические трещины. Необходимо отметить и проблему взаимной диффузии атомов на гетерогранице полупроводников $A^{III}B^{V}$ и A^{IV}, которая критична для некоторых приложений. К настоящему времени достигнут серьезный прогресс в уменьшении плотности дефектов в слоях $A^{III}B^{V}$, выращенных на подложках Si, благодаря которому созданы полупроводниковые лазеры с выдающимися характеристиками.

Однако эпитаксия на подложках класса «кремний-на-изоляторе» является нетривиальной задачей. Эпитаксиальный рост на таких подложках усложняется наличием в них диэлектрической основы, которая затрудняет контроль температуры на поверхности подложки и может привести к изменению оптимальных температурных режимов роста относительно режимов роста на подложках Si. Известно относительно мало работ по гетероэпитаксии светоизлучающих гетероструктур $A^{III}B^{V}$ на значимых для технологии кремниевой наноэлектроники подложках класса «кремний-на-изоляторе». При этом в найденных публикациях описывается достаточно сложная технология интеграции. Поэтому актуальными являются поиск и исследование альтернативных подходов для улучшения кристаллического качества слоев $A^{III}B^{V}$ при гетероэпитаксии на подложках класса «кремний-на-изоляторе».

Цель и задачи работы

Выявление закономерностей формирования эпитаксиальных слоев в гетероструктурах на основе полупроводниковых материалов, выращенных на подложках класса «кремний-на-изоляторе», для создания светоизлучающих гетероструктур $A^{III}B^{V}$.

Для реализации данной цели сформулированы следующие задачи.

1. Анализ и поиск технологических путей преодоления фундаментальных проблем интеграции эпитаксиальных слоев полупроводников $A^{III}B^{V}$ с кремнием при формировании на подложках класса «кремний-на-изоляторе».

2. Сравнение и оптимизация методов создания платформы для эпитаксии светоизлучающих гетероструктур $A^{III}B^{V}$ на подложках класса «кремний-на-изоляторе».

3. Исследование и внедрение методов уменьшения плотности дефектов и шероховатости поверхности в выращиваемых гетероструктурах $A^{III}B^{V}$ на созданной платформе.

4. Установление возможности создания светоизлучающей гетероструктуры $A^{III}B^{V}$, выращенной методом МОС-гидридной эпитаксии, на сформированной платформе.

Научная новизна

1. Впервые продемонстрирована фотолюминесценция при комнатной температуре гетероструктуры $A^{III}B^{V}$ на основе квантовых ям $In_{0,14}Ga_{0,86}As$/GaAs, выращенной методом МОС-гидридной эпитаксии на платформе Ge/Si/КНИ (001). Созданные светоизлучающие p-i-n диоды на основе данной гетероструктуры и на основе контрольного образца на подложке GaAs (001) демонстрируют электролюминесценцию при температуре 77 К одного порядка интенсивности.

2. Дополнено имеющееся понимание закономерностей формирования эпитаксиальных слоев в гетероструктурах $A^{III}B^{V}$/Ge/Si на подложках «кремний-на-сапфире» R-среза путем проведения электронно-микроскопических исследований поперечного среза.

3. Впервые продемонстрировано, что метод газофазного осаждения с разложением моногермана на «горячей проволоке» может быть использован для формирования прямозонного по теоретическим расчетам политипа 9R-Ge на подложке Si (001).

4. Впервые установлено, что формирование на гетерогранице Ge/Si (001) политипа 9R-Ge и двумерных дефектов, прорастающих на несколько десятков нанометров, может быть использовано в качестве способа уменьшения плотности прорастающих до поверхности слоя Ge дислокаций без воздействия высоких температур.

Теоретическая и практическая значимость работы

Теоретическая значимость результатов диссертации заключается в формировании новых знаний о физических процессах, происходящих при эпитаксиальном росте слоев $A^{III}B^{V}$ на платформе Ge/Si/КНИ (001). Полученные результаты будут полезны для развития технологических методов и подходов, направленных на уменьшение плотности дефектов и шероховатости поверхности в выращиваемых гетероструктурах $A^{III}B^{V}$/Ge/Si/КНИ (001), с целью приближения к характеристикам гетероструктур, получаемых на подложках GaAs (001), и минимизации толщины буферных слоев.

Практическая значимость результатов исследования определяется следующим.

1. Продемонстрировано, что платформа Ge/Si/КНИ (001), в которой подложка «кремний-на-изоляторе» изготовлена по технологии Smart Cut, слой Ge выращен методом молекулярно-пучковой эпитаксии с применением режима двухстадийного роста, термоциклического отжига в вакууме и оптимизированных температурных режимов, может быть использована для МОС-гидридной эпитаксии слоев $A^{III}B^{V}$ со структурными и с оптическими свойствами, не уступающими слоям $A^{III}B^{V}$, сформированным на платформе Ge/Si (001).

2. Установлены параметры роста эпитаксиальных слоев $A^{III}B^{V}$ методом МОС-гидридной эпитаксии на созданной платформе Ge/Si/КНИ (001), способствующие аннигиляции основной плотности антифазных границ в пределах толщины буферных слоев.

3. Установлены параметры in-situ отжига, способствующие уменьшению плотности антифазных границ, а также модификации поверхности, приводящей к выравниванию фронта роста и, как следствие, к уменьшению среднеквадратичной шероховатости поверхности готовой гетероструктуры.

4. Показана возможность использования системы буферных слоев $Al_{0,3}Ga_{0,7}As/GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ в гетероструктуре $A^{III}B^{V}$/Ge/Si/КНИ (001) для уменьшения плотности дефектов и подавления взаимной диффузии атомов на гетерогранице с Ge.

Использование отечественных подложек класса «кремний-на-изоляторе» делает исследования диссертации значимыми для открытия новых перспективных направлений развития микро- и оптоэлектроники в стране.

Методология и методы исследования

Для роста полупроводников применялись такие методы как газофазное осаждение слоя Ge с разложением моногермана на «горячей проволоке», молекулярно-пучковая эпитаксия слоев Ge/Si, МОС-гидридная эпитаксия слоев $A^{III}B^{V}$.

При изготовлении светоизлучающих p-i-n диодов применялись такие методы как вакуумное напыление путем электронно-лучевого испарения и вжигание искровым разрядом металлов для создания контактов, фотолитография и жидкостное химическое травление для создания меза-структуры.

Для исследования образцов применялись следующие методы: просвечивающая электронная микроскопия, рентгеновская дифрактометрия, селективное травление дефектов — для исследования структурных свойств; спектроскопии фотолюминесценции и электролюминесценции — для исследования оптических свойств; измерение эффекта Холла по схеме Ван-дер-Пау, электрохимическое CV профилирование, измерение вольтамперных характеристик — для исследования электрофизических свойств; атомно-силовая микроскопия и интерференционная микроскопия с фазовым сдвигом — для исследования морфологии поверхности. Для проведения локального химического анализа на поперечном срезе образцов использовался метод энергодисперсионной спектроскопии. Для элементного анализа по глубине использовалась вторично-ионная масс-спектрометрия. Для качественной характеризации шероховатости фронта роста слоев $A^{III}B^{V}$ применялся метод in-situ измерения отражательной способности.

Работа выполнялась в рамках научного проекта

«Разработка платформы $Ge/Si/SiO_2/Si$ для эпитаксии $A^{III}B^{V}$ гетероструктур» (Конкурс на лучшие проекты фундаментальных научных исследований, выполняемые молодыми учеными, обучающимися в аспирантуре («Аспиранты»), 2020–2022 года, РФФИ, проект № 20-32-90229), руководитель д.ф.-м.н., профессор Д.А. Павлов.

Апробация работы

Результаты диссертации представлены на 17 всероссийских и международных конференциях: XXIX Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых по фундаментальным наукам «Ломоносов-2022» (11–22 апреля 2022 г., Россия, Москва), XVIII Российская научная студенческая конференция «Физика твердого тела» (28–31 марта 2022 г., Россия, Томск), Международный симпозиум «Нанофизика и наноэлектроника» (2019–2021 гг., Россия, Нижний Новгород), конференция с международным участием «Электронно-лучевые технологии» КЭЛТ-2019 (30.09–03.10.2019 г., Россия, Черноголовка), International conference mechanisms and non-linear problems of nucleation and growth of crystals and thin films (1–5 июля 2019 г., Россия, Санкт-Петербург), 17-ая Международная научная конференция-школа:

«Материалы нано-, микро-, оптоэлектроники и волоконной оптики: физические свойства и применение» (18–21 сентября 2018 г., Россия, Саранск), XXIV Нижегородская сессия молодых ученых (технические, естественные, математические науки) (21–23 мая, Россия, Нижний Новгород), Всероссийская межвузовская научно-техническая конференция студентов и аспирантов «Микроэлектроника и информатика» (2017–2019 гг., Россия, Зеленоград), XIII Всероссийская научная конференция молодых ученых «Наноэлектроника, Нанофотоника и Нелинейная физика» (4–6 сентября 2019 г., Россия, Саратов), X Всероссийская школа-семинар студентов, аспирантов и молодых ученых по направлению «Диагностика наноматериалов и наноструктур» (1–6 октября 2018 г., Россия, Рязань), 5-ая школа молодых ученых «Современные методы электронной и зондовой микроскопии в исследованиях органических, неорганических наноструктур и нанобиоматериалов» (26–27 августа 2018 г., Россия, Черноголовка), XXIII Нижегородская сессия молодых ученых (22–23 мая 2018 г., Россия, Нижний Новгород), VI Всероссийский фестиваль науки (6 октября 2016 г., Россия, Нижний Новгород), а также на семинарах физического факультета ННГУ им. Н. И. Лобачевского.

Публикации

По материалам диссертации опубликовано 33 научные работы, в том числе: 7 статей в ведущих научных изданиях, рекомендованных ВАК РФ, 26 тезисов в сборниках трудов российских и международных научных конференций.

Достоверность результатов

Исследования проведены с применением комплекса взаимодополняющих современных аттестованных методик, в том числе с применением прямых измерений методом просвечивающей электронной микроскопии. Достоверность полученных результатов подтверждается воспроизводимостью характеристик исследуемых объектов, хорошим согласием при использовании разных методов измерений и не вызывает сомнений.

Личный вклад соискателя

Соискатель самостоятельно определял направление исследований для реализации поставленной цели работы. Соискателем внесен определяющий вклад в получение основных экспериментальных результатов. Непосредственно соискателем проведена адаптация методики препарирования поперечного среза для образцов с подложками сапфира R-среза. Соискателем проведено препарирование поперечного среза образцов, получены результаты измерений всеми

используемыми в диссертации режимами просвечивающей электронной микроскопии, методом энергодисперсионной спектроскопии, морфологии поверхности на 3D-оптической метрологической системе Leica DCM8, методами рентгеновской дифрактометрии, электрохимического CV профилирования. Соискатель принимал активное участие в проектировании светоизлучающих гетероструктур, используемых для создания p-i-n диодов. Соискателем лично выращены методом МОС-гидридной эпитаксии гетероструктуры для создания светоизлучающих p-i-n диодов, а также для них получены результаты in-situ измерений отражательной способности и кривизны поверхности, результаты измерений спектроскопии фотолюминесценции. Соискателем обработаны и интерпретированы результаты измерений всеми используемыми в диссертации методами.

Рост слоя Ge методом газофазного осаждения с разложением моногермана на «горячей проволоке» осуществлялся научной группой НИФТИ ННГУ в.н.с., д.ф.-м.н. В. Г. Шенгурова, а именно н.с., к.ф.-м.н. С. А. Денисовым и м.н.с. В. Ю. Чалковым. Рост слоя Ge методом молекулярно-пучковой эпитаксии осуществлялся с.н.с. ИФМ РАН, к.ф.-м.н. Д. В. Юрасовым. Рост слоев $A^{III}B^{V}$ во всех гетероструктурах за исключением тех, которые были предназначены для создания светоизлучающих p-i-n диодов, проведен с.н.с. НИФТИ ННГУ, к.ф.-м.н. Н. В. Байдусем и м.н.с. НИФТИ ННГУ А. В. Рыковым.

Создание светоизлучающих p-i-n диодов реализовано в отделе твердотельной электроники и оптоэлектроники НИФТИ ННГУ. Напыление металлического контакта выполнено с.н.с., к.ф.-м.н. А. В. Здоровейщевым, вжигание металлического контакта — м.н.с., к.ф.-м.н. М. В. Ведем, фотолитография — инженером 2 категории О. В. Мухиной, жидкостное химическое травление — ведущим инженером Н. А. Горбуновой, снятие фоторезиста — м.н.с. В. Е. Котоминой.

Измерения методом атомно-силовой микроскопии проведены с.н.с. НОЦ ННГУ, к.ф.-м.н. Р. Н. Крюковым, методом спектроскопии фотолюминесценции — м.н.с. НИФТИ ННГУ А. В. Рыковым, измерения методом спектроскопии электролюминесценции и измерения вольтамперных характеристик — м.н.с. НИФТИ ННГУ, к.ф.-м.н. М. В. Ведем, измерения эффекта Холла — лаборантом НИФТИ ННГУ Д. А. Здоровейщевым, методом вторично-ионной масс-спектрометрии — с.н.с. ИФМ РАН, к.ф.-м.н. М. Н. Дроздовым.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка сокращений и условных обозначений, благодарностей, списка публикаций по теме диссертации, списка

цитируемой литературы и приложений. Общий объем составляет 251 страницу, включая 80 рисунков, 18 таблиц. Список цитируемой литературы включает 186 наименований.

Положения, выносимые на защиту

1. Способ создания платформы Ge/Si/КНИ (001) пригодной для МОС-гидридной эпитаксии светоизлучающих гетероструктур $A^{III}B^{V}$ путем нанесения Ge на подложку «кремний-на-изоляторе» методом двухстадийной молекулярно-пучковой эпитаксии через буферный слой Si с последующим применением термоциклического отжига в вакууме.

2. Комплекс технологических операций и режимов роста при формировании буферных слоев $A^{III}B^{V}$ методом МОС-гидридной эпитаксии на созданной платформе Ge/Si/КНИ (001), способствующий уменьшению плотности прорастающих дислокаций, антифазных дефектов, подавлению взаимной диффузии атомов на гетерогранице с Ge, а также выравниванию поверхности.

3. Комплекс отработанных технологических операций и режимов роста при формировании буферных слоев $A^{III}B^{V}$ методом МОС-гидридной эпитаксии на созданной платформе Ge/Si/КНИ (001) обеспечивает получение электролюминесценции светоизлучающего p-i-n диода.

ГЛАВА 1. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ

Встраивание элементов на основе полупроводников $A^{III}B^{V}$ (III-V) в Si интегральные микросхемы (ИМС) актуально для развития кремниевой фотоники [1–3]. В частности, это необходимо для создания помехоустойчивых энергоэффективных оптических межсоединений в ИМС с высокой скоростью передачи данных, низкой потерей сигнала и низким тепловыделением [4–7]. Одной из проблем формирования оптических межсоединений в интегральной микросхеме является создание эффективного и надежного источника излучения на кремнии. Полупроводники III-V благодаря своим превосходным оптическим свойствам являются перспективными кандидатами для решения данной задачи [1, 8].

В 2015 году впервые продемонстрирована работа процессора на подложке Si с оптическими связями между чипами, в котором в качестве источника излучения выступал внешний твердотельный лазер [9]. С целью миниатюризации оптических межсоединений, уменьшения потерь сигнала в них и стоимости конечных устройств серьезное развитие получила технология сращивания (Bonding), позволяющая сформировать источник излучения на основе полупроводников III-V непосредственно как на подложках Si (001), так и на подложках «кремний-на-изоляторе»* (КНИ), представляющих собой гетероструктуру $Si/SiO_2/Si$ (001) [1, 2, 10–12]. Как отмечается в статьях [2, 13] на основе данной технологии достигнуто массовое производство различных устройств. К настоящему времени кремниевая интегральная фотоника нашла свое применение и быстро развивается в таких областях как искусственный интеллект, гипермасштабируемый центр обработки данных, высокопроизводительные вычисления, лазерная система обнаружения и измерения дальности, микроволновая фотоника [14].

Технология сращивания имеет свои ограничения из-за необходимости использования относительно дорогих подложек III-V с малым диаметром по сравнению с подложками Si, а также из-за низкой степени интеграции [1, 2, 15]. Параллельное развитие кремниевой интегральной фотоники в направлении повышения компактности, увеличения степени преобразования электрической энергии в оптическую, уменьшения энергопотребления, потерь сигнала, и стоимости конечных устройств привело к значительному прогрессу в создании эпитаксиальными методами на подложке Si (001) гетероструктур III-V, излучающих в окне прозрачности объемного кремния [1, 2, 8]. Передовой результат достигнут для гетероструктур

---

* Термин «кремний-на-изоляторе» и его аббревиатура КНИ в зависимости от контекста со словом «класс» или без него означает целый класс подложек «кремний-на-изоляторе» или конкретный тип соответственно.

III-V с активной область на основе квантовых точек InAs в матрице GaAs, излучающих на длине волны ≈1,3 мкм [1]. На основе таких гетероструктур III-V продемонстрированы различные полупроводниковые лазеры с выдающимися характеристиками, включая лазеры с резонатором Фабри-Перо, с микрорезонатором в форме диска и кольца, на фотонном кристалле, с распределенной обратной связью, с перестройкой частоты генерации, с синхронизацией мод и другие [1, 2, 8]. Например, в статье [16] сообщается о создании полупроводникового лазера с резонатором Фабри-Перо, работающего в непрерывном режиме при температуре 80 °C в течение 1200 ч с минимальной деградацией. При этом отмечается, что экстраполированный срок службы полупроводникового лазера составляет $2 \cdot 10^5$ ч. Таких важных результатов, приближающих технологию гетероэпитаксии III-V на Si к использованию в кремниевой интегральной фотонике, удалось добиться благодаря достигнутому успеху при решении фундаментальных проблем гетероэпитаксии полупроводников III-V на поверхности кремния [17–26].

К фундаментальным проблемам относятся дефекты, которые образуются в слоях III-V в процессе и после роста: антифазные границы (АФГ, APB — antiphase boundary), прорастающие дислокации (ПД, TD — threading dislocation), дислокации несоответствия (ДН, MD — misfit dislocation) и термические трещины. Общие отрицательные воздействия перечисленных выше дефектов на работу источника излучения, например, полупроводникового лазера, заключаются в увеличении количества каналов безызлучательной рекомбинации и токов утечки, что приводит к уменьшению интенсивности излучения и повышению порогового тока. Повышение порогового тока снижает коэффициент полезного действия лазера, увеличивает его разогрев и, как следствие, ускоряет деградацию. В свою очередь взаимная диффузия атомов на гетерогранице полупроводников III-V и IV во время эпитаксии является непреднамеренным легированием, что может стать причиной изменения характеристик конечных полупроводниковых устройств и даже создать не желательный p-n переход вблизи гетерограницы III-V/IV [27].

Несмотря на серьезный прогресс, достигнутый в направлении гетероэпитаксии светоизлучающих гетероструктур III-V на подложках кремния, известно относительно мало работ по интеграции полупроводников III-V со значимыми для технологии кремниевой наноэлектроники подложками класса «кремний-на-изоляторе» эпитаксиальными методами [23, 28–32]. При этом в найденных нами работах описывается нетривиальная технология уменьшения плотности дефектов в III-V слоях, заключающаяся в формировании на подложке V-образных канавок с гранями {111}. Важно отметить, что благодаря такому подходу удалось создать высококачественный полупроводниковый лазер с резонатором Фабри-Перо, генерирующий непрерывное излучение вплоть до температуры 85 °C, интегрированный вместе с кремниевым волноводом на одной подложке [23]. Поскольку технология формирования на поверхности кремния V-образных канавок с гранями {111} достаточно сложная, то актуальными

являются исследования альтернативных подходов улучшения кристаллического качества слоев III-V при гетероэпитаксии на подложках класса КНИ.

Под подложками класса «кремний-на-изоляторе» подразумеваются гетероструктуры Si/Al_2O_3 (R-срез) («кремний-на-сапфире» — КНС) и $Si/SiO_2/Si$ (001) («кремний-на-изоляторе» — КНИ). При эпитаксии на подложках класса КНИ кроме фундаментальных проблем, перечисленных ранее, существуют дополнительные трудности, связанные с наличием в них диэлектрической основы, которая затрудняет контроль температуры на поверхности подложки и может привести к изменению оптимальных температурных режимов роста относительно режимов роста на подложках Si [33]. В КНИ диэлектрической основой является скрытый слой SiO_2, а в КНС — объемная подложка Al_2O_3.

Использование вместо подложек Si подложек класса «кремний-на-изоляторе» актуально, так как интегральные микросхемы (ИМС) на их основе имеют ряд преимуществ перед ИМС на объемном кремнии, которые обусловлены наличием диэлектрической основы. Полная изоляция элементов в ИМС с помощью диэлектрика более надежна, совершенна и функциональна, чем с помощью p-n перехода [34]. Среди преимуществ можно выделить увеличение быстродействия элементов ИМС за счет уменьшения паразитных емкостей, а также увеличение их степени интеграции из-за отсутствия необходимости в дополнительной изоляции элементов друг от друга. Диэлектрическая подложка сапфира или скрытый слой SiO_2 также позволяют значительно снизить токи утечки приборов и уменьшить энергопотребление. Кроме этого, на подложках класса КНИ есть возможность создания схем, работающих при высоких температурах (T) вплоть до 350 °C [35]. Что касается защиты от радиационного воздействия, то использование подложек класса КНИ является одним из способов борьбы с одиночными сбоями и с накоплением заряда индуцированного излучением [36].

Важно отметить преимущества подложки КНИ, которые связаны с наличием скрытого слоя SiO_2 и активно используются в кремниевой интегральной фотонике: разница более чем в два раза показателя преломления Si и SiO_2 (3,5 и 1,45 соответственно) упрощает задачу создания волноводной связи между элементами на КНИ, а также способствует их высокой плотности интеграции [37]; скрытый слой SiO_2 пространственно ограничивает процесс поглощения света в активном слое тонкопленочного Si фотодетектора или сформированного на КНИ Ge фотодетектора, что предотвращает оптические потери через подложку и увеличивает квантовую эффективность [38].

Обзор литературы направлен на анализ фундаментальных проблем интеграции полупроводников III-V с Si методами эпитаксиального осаждения, дополнительных трудностей при эпитаксии на подложках класса «кремний-на-изоляторе» и возможных решений данных вопросов.

1.1 Фундаментальные проблемы: антифазные границы, дислокации, трещины

В настоящем разделе представлено описание дефектов, которые образуются в слоях III-V при гетероэпитаксии на поверхности кремния, а также их влияние на электрические и оптические свойства слоев III-V. Подраздел 1.1.1 посвящен антифазным границам, подраздел 1.1.2 — прорастающим дислокациям и дислокациям несоответствия, а подраздел 1.1.3 — термическим трещинам.

1.1.1 Антифазные границы

Антифазная граница (АФГ, APB — antiphase boundary) в III-V полупроводниках представляет собой двумерный дефект, содержащий антиситовые связи атомов III-III или V-V, и образующийся при коалесценции доменов с двумя разными фазами. Принято называть домен с фазой, которая занимает наибольшую площадь поверхности, основным, а домен с фазой, которая занимает наименьшую площадь поверхности, антифазным (АФД, APD — antiphase domain).

Данный раздел посвящен зарождению, начальному распределению и эволюции антифазных доменов (см. раздел 1.1.1.1), а также влиянию антифазных границ на электрические и оптические свойства III-V (см. раздел 1.1.1.2).

1.1.1.1 Зарождение, начальное распределение и эволюция антифазных доменов

Существуют две модели образования антифазных границ, которые до недавнего времени несколько противоречили друг другу:

— модель ступенчато-индуцированной генерации АФГ [39],

— модель зарождения монодоменных островков [40].

Модель ступенчато-индуцированной генерации антифазных границ заключается в том, что наличие одноатомных ступеней на поверхности точно ориентированной подложки Si (001) (или Ge) приводит к образованию на соседних террасах доменов III-V двух разных фаз, отличающихся друг от друга поворотом на 180° вокруг оси, параллельной любому из шести

эквивалентных кристаллографических направлений <110>, которые в процессе роста смыкаются с образованием антифазных границ [41] (рисунок 1).

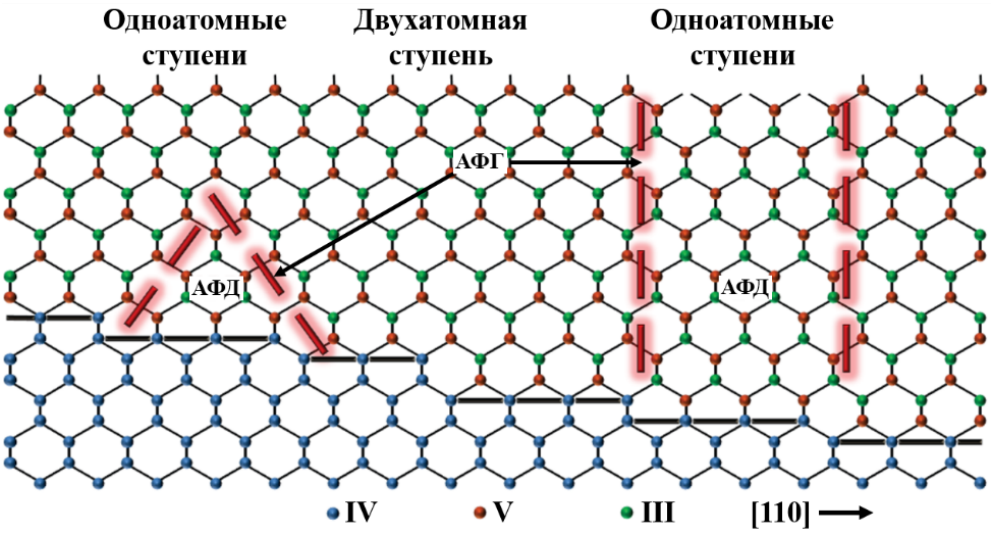


Рисунок 1 — Схема, демонстрирующая гетерограницу неполярного полупроводника A^{IV} с полярным полупроводником $A^{III}B^{V}$ (рисунок адаптирован из статьи [42])

Примечание — АФГ — антифазная граница; АФД — антифазный домен; III — элемент A^{III}, V — элемент B^{V} в соединении $A^{III}B^{V}$; IV — элемент A^{IV}.

Модель зарождения монодоменных островков можно обобщить следующим образом [43].

Во-первых, существует только частичное смачивание между полупроводниками III-V и IV, что приводит к образованию чистого 3D режима роста по механизму Вольмера-Вебера. Данный факт экспериментально подтвержден некоторыми исследованиями [44, 45]. Эта модель может быть обобщена на эпитаксию III-V на Ge, основываясь на экспериментальных результатах, найденных в литературе [46].

Во-вторых, антифазные границы образуются во время коалесценции трехмерных островков двух разных фаз. Размер отдельных монодоменных островков может быть намного больше, чем расстояние между ступенями (ширина террасы) [40], что говорит о том, что сама ступенька не может быть основной причиной возникновения антифазных доменов.

В 2020 году авторам работы [43] удалось связать модель ступенчато-индуцированной генерации антифазных границ и модель зарождения монодоменных островков. Проведя анализ литературных данных, авторы установили, что морфология доменов связана с распределением ступеней на поверхности элементов группы IV только тогда, когда рост III-V осуществляется на подложках с малым углом отклонения среза от кристаллографической плоскости {001} в направлении <110> $\gamma<1°$. Когда рост III-V осуществляется на подложках с большим углом $\gamma>1°$, наблюдаются домены с размерами, значительно превышающими среднюю ширину террасы. В

связи с этим в первом случае (γ<1°) распределение доменов авторы назвали «террасозависимым» (Terraces-driven), а во втором — «островковым» (Nucleation-driven) (см. рисунок 2). В [43] также отмечают, что эта тенденция справедлива и для поверхности Ge. Вводится понятие критического угла γ — угол γ, при котором средняя ширина террас на поверхности подложки IV группы равна среднему расстоянию между двумя соседними островками разных фаз вдоль направления отклонения среза. Проведя расчеты, авторы установили, что критический угол γ лежит в диапазоне от 0,1° до 1° для наиболее распространенных гетероструктур III-V/IV и зависит от количества ступеней на поверхности и выбранного метода роста, например, молекулярно-пучковая эпитаксия (МПЭ) или газофазная эпитаксия из металлоорганических соединений (МОС-гидридная эпитаксия, МОСГЭ).

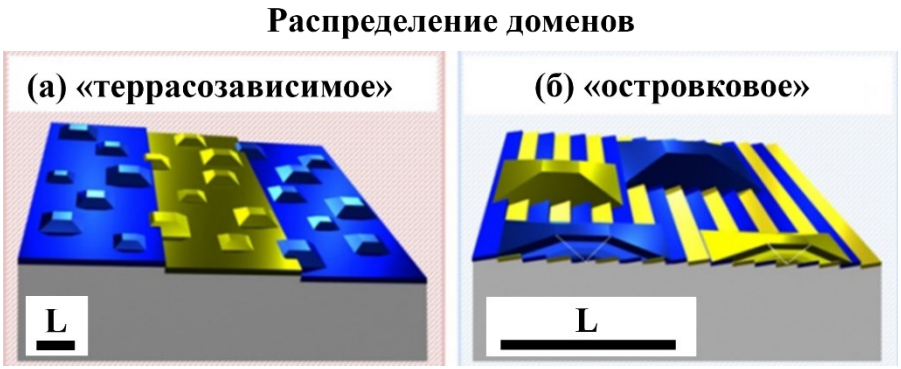


Рисунок 2 — Распределение доменов, обусловленное (а) террасами; (б) островками, с демонстрацией островков III-V со средним размером L, выращенных на подложке IV группы (а) с малым углом отклонения среза от кристаллографической плоскости {001} в направлении <110> (γ); (б) с большим γ (рисунок адаптирован из статьи [43])

Примечание — Синий и желтый цвета используются для обозначения различных ориентаций поверхностных димеров и фаз как на террасах группы IV, так и на островах III-V.

В работе [43] также впервые доказано, что аннигиляция антифазных границ — это результат заращивания антифазных доменов. Это возможно за счет разницы в скоростях роста разных фаз. На рисунке 3 продемонстрирована трансляция отклонения среза подложки на поверхность выращенных слоев III-V, где видно, что для домена III-V одной фазы направление [110] совпадает с направлением отклонения среза подложки [110], в то время как для домена другой фазы с направлением [110] подложки совпадает направление [$\bar{1}$10]. Следовательно, один домен будет преимущественно формировать ступени A, когда их края параллельны димерам группы V, что имеет место для желтого домена на рисунке 3, тогда как другой домен будет формировать ступени B, когда их края перпендикулярны димерам группы V (синий домен на рисунке 3) [47]. Две различные фазы кристалла III-V, имеющие больше ступеней A и ступеней B

на поверхности принято называть α- и β-фазами соответственно. Скорость включения на A и B ступенях различна [48, 49], а также направление усиленной диффузии атомов III на поверхности разных фаз отличается [50, 51], что будет рассмотрено более детально далее (см. раздел 1.2.1.1), поэтому ожидается, что скорости роста разных фаз также будут отличаться.

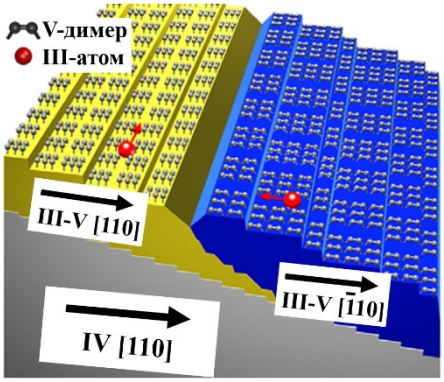


Рисунок 3 — Трансляция отклонения среза подложки IV на поверхность выращенных слоев III-V (рисунок адаптирован из статьи [43])

Авторы работы [43] установили, что эффективное заращивание антифазных доменов возможно только в том случае, если существует некоторая доля режима роста на ступенях. Известно, что рост полупроводников III-V на поверхности III-V может происходить в двух различных режимах: рост на ступенях (Step flow growth) или 2D-островковый рост (2D-nucleation growth) [52]. При этом может реализовываться как чисто режим роста на ступенях или 2D-островковый, так и их комбинация. При очень малом угле γ расстояние между ступенями на поверхности настолько велико, что рост в основном зависит от длины диффузии адатомов на поверхности и возникает 2D-островковый режим роста. При больших углах γ включение атомов III группы на краях ступеней становится доминирующим. Типичные значения длины диффузии адатомов III группы на поверхности III-V находятся в диапазоне от 0,5 до 1 мкм [53], что означает, что угол γ, при котором может возникнуть режим роста на ступенях лежит в диапазоне от 0,01° до 0,03°, в зависимости от системы материалов и условий роста [43].

1.1.1.2 Влияние антифазных границ на электрические и оптические свойства $A^{III}B^{V}$

Антифазные границы отрицательным образом влияют на оптические и электрические свойства выращенных полупроводников III-V и препятствуют их приборному применению.

В работе [54] показано, что даже низкая плотность антифазных границ равная 0,2 мкм$^{-1}$ приводит к неприемлемому качеству диодов и полевых транзисторов Шоттки. В работе [54] отмечают, что наиболее выраженным отрицательным эффектом антифазных границ на полевые транзисторы Шоттки являются высокие токи утечки, которые препятствуют запиранию транзисторов. Авторы установили, что устройства на разных мезах не были электрически изолированы, что указывает на высокую проводимость через буферный слой GaAs. Что касается диодов Шоттки, то они демонстрировали плавный пробой, при этом токи утечки увеличивались с ростом плотности антифазных границ. Эти результаты указывают на то, что пути проводимости носителей заряда проходят через антифазные границы. Авторы считают, что данное предположение частично связано с сегрегацией примесей в антифазные границы (АФГ), которое происходит с целью уменьшения деформации решетки кристалла в области АФГ и, следовательно, уменьшения их энергии. Деформация решетки в области АФГ происходит из-за релаксации связей атомов Ga-Ga и As-As, длина которых отличается от длины связи атомов Ga-As в основном объеме кристалла [55]. В работе [55] авторы определили значение смещения решетки домена одной фазы GaAs относительно домена другой фазы в направлении <001>, которое составляет 0,019 нм со статистической погрешностью 0,003 нм.

В работе [21] показано значительное уменьшение в 10 раз подвижности носителей заряда в слое GaAs, легированного Si до $7\cdot10^{17}$ см$^{-3}$, в образце с антифазными границы, по сравнению с аналогичным образцом, но без них.

Что касается влияния антифазных границ на оптические свойства полупроводников III-V, то в работе [21] продемонстрировали, что наличие таких дефектов приводит к уменьшению интенсивности, а также расширению пика спектра фотолюминесценции (ФЛ), что свидетельствует о том, что антифазные границы являются центрами безызлучательной рекомбинации.

1.1.2 Дислокации

В обзорных публикациях начала 2000-х гг. [56] и начала 1990-х гг. [57] систематизирован и обобщен большой объем информации по теме фундаментальных физических механизмов формирования упруго деформированных и пластически релаксированных систем SiGe/Si и InGaAs/GaAs соответственно. Предполагается, что и для других полупроводников со структурным типом алмаз и сфалерит, полученные знания будут справедливы. В разделе 1.1.2 кратко рассмотрены вопросы релаксации напряженных слоев с образованием дислокаций,

перечислены возможные дислокационные конфигурации для используемых в диссертации гетероструктур (см. раздел 1.1.2.1), приведена формула для расчета теоретической (равновесной) критической толщины (см. раздел 1.1.2.2), представлено определение анизотропии релаксации бинарных полупроводников (см. раздел 1.1.2.3), а также представлено влияние дислокаций на электрические и оптические свойства полупроводников III-V (см. раздел 1.1.2.4).

Основной причиной образования линейных дефектов дислокаций в эпитаксиальных слоях является рассогласование параметра решеток материала слоя (a_l) и материала подложки (a_s). Рассогласование параметра решеток (f) приводит к тому, что на начальном этапе роста слой является псевдоморфным, то есть биаксиально напряженным с когерентно сопряженной с подложкой границей раздела. В процессе эпитаксии слоя накапливается энергия деформации, значение которой пропорционально его толщине.

Пластическая релаксация напряженных слоев происходит в два этапа [56]. Первый этап может реализоваться только тогда, когда толщина слоя превышает определенное значение, которое называют теоретической или равновесной критической толщиной (h_c). При этом начальное значение толщины слоя (h_c^{exp} — экспериментальная критическая толщина), при которой начинается плавная пластическая релаксация, и темп пластической релаксации зависят от двух параметров: температура и время нахождения гетероструктуры при этой температуре. Чем выше эти параметры, тем ближе значение h_c^{exp} к h_c. За этот этап напряжения в объеме слоя частично снимаются за счет образования дислокаций несоответствия (ДН) из первичных источников, к которым относятся [56, 58]:

— изгиб дислокаций, прорастающих из подложки,

— зарождение дислокационных полупетель с поверхности слоя,

— различные внутренние несовершенства, являющиеся источниками гетерогенного зарождения ДН: различные частицы на поверхности подложки, механические повреждения, которые могут стать источником прорастающих дислокаций, а затем и ДН [59].

Второй этап пластической релаксации слоя с остаточными упругими деформациями происходит, когда толщина слоя превышает порог запуска вторичных источников (например, источник Франка-Рида [60]), то есть, когда появляется возможность размножения дислокаций несоответствия [56]. Только за счет второго этапа можно достичь глубокой пластической релаксации напряженного слоя.

1.1.2.1 Дислокационные конфигурации

Для исследуемых в диссертации гетероструктур, в частности, Ge/Si, InGaAs/GaAs, InAlAs/GaAs различают два основных типа дислокаций несоответствия (ДН) по углу между линией дислокации и направлением вектора Бюргерса: совершенные смешанные 60°-ые и совершенные краевые 90°-ые. В обоих случаях линия дислокации лежит параллельно плоскости гетерограницы и имеет направление <110>. Для 60°-ых ДН линия дислокации и вектор Бюргерса лежат в плоскости {111}, которая для материалов со структурным типом алмаз и сфалерит является плоскостью скольжения. Для 90°-ых ДН (их еще называют ломеровские, L-дислокации) вектор Бюргерса параллелен плоскости гетерограницы [56]. При малых рассогласованиях параметра решеток материала эпитаксиального слоя и материала подложки (<1,5 %) преимущественно наблюдаются 60°-ые ДН, при больших (>2,3 %) — в основном 90°-ые ДН [61]. Как отмечается в работе [62] образование 90°-ых ДН энергетически выгодный процесс, который возможен благодаря объединению двух комплементарных 60°-ых ДН*, при их случайной встрече или в процессе наведенного зарождения. Атомная структура 90°-ых ДН может быть разнообразной: компактной [63] и «рыхлой», имеющей размер несколько нанометров (принято считать до 6 нм) [64].

Кроме 90°-ых дислокаций несоответствия (ДН) с вектором Бюргерса типа a/2<110>, состоящих из двух комплементарных 60°-ых ДН, возможно образование дислокационных конфигураций с вектором Бюргерса типа a<001> из двух не комплементарных 60°-ых ДН** [62]. Однако с помощью исследования одного поперечного среза {110} отличить комплементарные 60°-ые ДН от не комплементарных 60°-ых ДН невозможно. Тем не менее в работе [62] отмечают, что дислокационные конфигурации, состоящие из двух не комплементарных 60°-ых ДН, встречаются в малом количестве.

Также кроме совершенных смешанных и краевых дислокаций несоответствия (ДН) в образцах Ge/Si без отжига могут формироваться совершенные винтовые ДН, у которых линия дислокации [001] и вектор Бюргерса a[001] совпадают и направлены строго в ростовом направлении [001] [65]. После отжига такие винтовые дислокации распадаются на две 60°-ые ДН и исчезают [66].

---

* Пара комплементарных 60°-ых ДН — 60°-ые ДН, лежащие на наклонных зеркально отклоненных плоскостях {111} и имеющие антипараллельные винтовые компоненты.

** Пара не комплементарных 60°-ых ДН — 60°-ые ДН, лежащие на наклонных зеркально отклоненных плоскостях {111} и имеющие параллельные винтовые компоненты.

Поскольку в диссертации изучается, в том числе и гетероэпитаксия светоизлучающих гетероструктур III-V на поверхности Si через буферные слои, то важно отметить недавние результаты исследований образования дислокаций несоответствия на гетерогранице GaAs со слоем III-V, содержащим атомы In и имеющим значение толщины меньше равновесной критической [25, 26]. В активной области светоизлучающей гетероструктуры могут использоваться такие наноструктуры как квантовые ямы (КЯ) и квантовые точки (КТ). В случае матрицы GaAs в качестве КЯ может выступать твердый раствор InGaAs, а в качестве КТ — InAs. Данные исследования [25, 26] позволили установить, что во время охлаждения гетероструктуры после роста на гетерогранице со слоем, содержащим атомы In, прорастающая через них дислокация образует дислокацию несоответствия из-за совместного влияния рассогласования коэффициента термического расширения полупроводников III-V и Si и эффекта упрочнения слоя, содержащего атомы In. Механизм образования такого рода дислокаций несоответствия подробно обсуждается в дополнительном к статье [25] материале [67]. Эффект упрочнения в полупроводниках детально обсуждается в следующих работах [68, 69]. Для вытеснения дислокаций несоответствия (ДН) такого рода из активной области используют вставки $In_{0,15}Ga_{0,85}As$ толщиной 7 нм до и после активной области, которые служат ловушками для ДН [25, 26].

1.1.2.2 Формула для расчета равновесной (теоретической) критической толщины

На рисунке 4 представлена одна из возможных начальных стадий пластической релаксации псевдоморфного слоя. Типичный путь — это возникновение каким-либо образом 60°-ой дислокации, которая имеет возможность скольжения в наклонной к границе раздела плоскости (111). Дислокация состоит из ветви, лежащей на границе раздела — дислокации несоответствия (ДН), а также ветви, выходящей на поверхность слоя — прорастающей дислокации. Пластическая релаксация слоя происходит путем увеличения длины каждой ДН за счет движения прорастающей части в плоскости скольжения. Каждый такой проход дислокационной петли через часть слоя уменьшает упругие деформации в этой ее части и поэтому, при некоторых условиях, может быть энергетически выгодным [56].

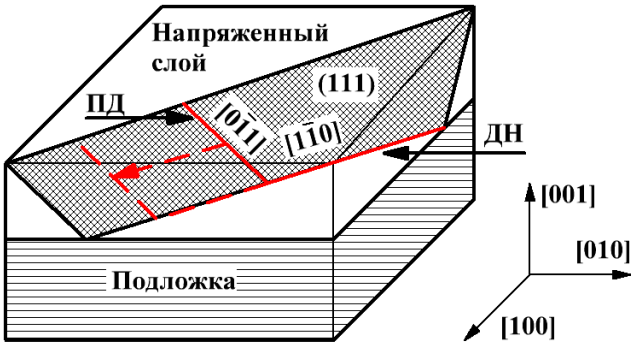


Рисунок 4 — Схематическое представление пластической релаксации напряженного слоя через образование дислокаций несоответствия (ДН) и связанных с ними прорастающих дислокаций (ПД) (рисунок адаптирован из статьи [56])

Основываясь на таком механизме релаксации напряжений в слое, Мэтьюс и Блейксли предложили модель, называемую Force balance model, в которой учитывается баланс сил, действующих на прорастающую дислокацию [70]. Результатом их расчетов стала формула (1) для оценки равновесной критической толщины h_c в единицах измерения ангстрем.

$$h_c=((b\cdot(1-\nu\cdot\cos^2\alpha_1)/(8\pi f\cdot(1+\nu)\cdot\cos\lambda_1))\cdot(\ln(\beta_1\cdot h_c/b)+1), \quad (1)$$

где b — модуль вектора Бюргерса дислокации, Å;

ν — коэффициент Пуассона материала слоя;

α_1 — угол между вектором Бюргерса и линией дислокации, градус;

$f=(a_l-a_s)/a_s$ — рассогласование параметра решеток слоя (a_l) и подложки (a_s);

λ_1 — угол между вектором Бюргерса и лежащим в плоскости границы раздела слоя и подложки перпендикуляром к пересечению плоскости скольжения дислокации и поверхности подложки, градус;

β_1 — параметр ядра дислокации.

Модель Мэтьюса и Блейксли для определения критической толщины введения дислокаций несоответствия определяет фундаментальный параметр h_c, который зависит только от конкретной пары материалов, образующих гетероструктуру, величины рассогласования параметров решеток, а также от типа кристаллографической плоскости границы раздела. Этот параметр можно использовать как граница по толщинам, ниже которой слой является стабильным, не подверженным введению дислокаций несоответствия, а выше находится в метастабильном состоянии [56].

1.1.2.3 Анизотропия релаксации

В бинарных полупроводниках III-V существует особенность пластической релаксации напряжений — анизотропия релаксации. Она проявляется в асимметричном распределении дислокаций несоответствия (ДН) вдоль двух ортогональных направлений <110> на границе раздела на ранних стадиях релаксации за счет того, что дислокации с атомами III группы в своем ядре (α-ДН) образуются и скользят более легко, чем дислокации с атомами V группы в своем ядре (β-ДН) [71, 72].

В работах [71, 72], где используется обозначение направления <110>, расположенного в плоскости Ga {111}, как направление $[1\bar{1}0]$, продемонстрировали свойства анизотропии релаксации:

— анизотропия более выражена для образцов при растяжении, чем при сжатии,

— главная ось релаксации находится в кристаллографическом направлении $[1\bar{1}0]$ независимо от знака деформации и независимо от направления распространения дислокаций с максимальной плотностью, которое меняется от [110] при растяжении до $[1\bar{1}0]$ при сжатии.

Анизотропия релаксации приводит к возникновению наклона кристаллографических плоскостей эпитаксиальных слоев III-V [73]. Наклон может привести к значительной ошибке при определении параметров слоев III-V методом рентгеновской дифрактометрии [74]. Поэтому важно учитывать этот параметр при исследовании бинарных полупроводников.

1.1.2.4 Влияние дислокаций на электрические и оптические свойства $A^{III}B^{V}$

Хорошо известно, что дислокации вносят в запрещенную зону полупроводника III-V электронные состояния, которые действует как центр безызлучательной рекомбинации и способствуют подавлению излучения. В свою очередь ядра дислокаций являются центрами, рассеивающими носители заряда, препятствуя их распространению к активной области структуры [75].

В работе [75] исследованы электрические и оптические свойства светодиодов с квантовыми ямами (КЯ) с различной плотностью прорастающих дислокаций (ППД, TDD — Threading dislocation density). Светодиоды с ППД порядка $5\cdot10^{8}$ см$^{-2}$ продемонстрировали более высокую эффективность инжекции по сравнению со светодиодами с ППД порядка $5\cdot10^{9}$ см$^{-2}$ при одинаковой плотности тока. С точки зрения оптических свойств первые светодиоды при

одинаковой плотности тока продемонстрировали более высокую внутреннюю квантовую эффективность излучения, чем вторые, а также более интенсивный пик на спектре электролюминесценции (ЭЛ). Кроме этого прорастающие дислокации в эпитаксиальных слоях, значение плотности которых порядка 10^8 см$^{-2}$ и выше, играют основную роль в образовании тока утечки в светодиодах [76].

Значение приемлемой плотности прорастающих дислокаций (ППД) в активной III-V области сильно зависит от типа устройств и вида самой активной области. Например, проведена оценка, что ППД $<10^6$ см$^{-2}$ достаточна для эффективной работы солнечных батарей [77]. Однако эффективность электролюминесценции светодиода AlGaAs на подложке GaAs начинает снижаться уже при плотности близкой к 10^4 см$^{-2}$ [78]. А плотность прорастающих дислокаций $\sim10^6$ см$^{-2}$ способна значительно ослабить производительность лазерных гетероструктур на основе квантовых ям. Тем не менее существуют полупроводниковые наноструктуры, на излучательные свойства которых прорастающие дислокации оказывают минимальное воздействие. К таким наноструктурам относятся квантовые точки (КТ). Оптические свойства лазерных гетероструктур на основе КТ слабо чувствительны к плотности прорастающих дислокаций $\sim10^7$ см$^{-2}$ [79, 80]. Такое значительное преимущество квантовых точек связано с возможностью эффективного захвата носителей заряда и наличием у КТ высоких тепловых энергетических барьеров для удержания носителей заряда в своих энергетических состояниях и для предотвращения их миграции в дефектные энергетические состояния [79]. Поэтому для создания лазерной гетероструктуры на основе квантовых точек значение плотности прорастающих дислокаций $\sim10^7$ см$^{-2}$ является приемлемым.

Важно отметить следующее. Несмотря на то, что для полупроводникового лазера на основе квантовых точек InAs на подложке Si с плотностью прорастающих дислокаций $\sim10^7$ см$^{-2}$ экстраполированное время жизни составляет более 10^7 ч при комнатной температуре и непрерывной генерации излучения, уменьшение значения ППД будет способствовать дальнейшему повышению надежности лазера [81].

1.1.3 Трещины

Основная информация об образовании термических трещин достаточно детально изложена в работе [17] с указанием ссылок на большое разнообразие теоретических моделей, описывающих условия образования трещин [82, 83]. В данном разделе мы отметим лишь основные моменты.

Большая разница в коэффициентах термического расширения (КТР) материалов гетероструктуры приводит к возникновению термоупругих деформаций в их решетках во время любого процесса изменения температуры [84, 85]. В частности, при охлаждении гетероструктуры от температуры роста III-V или Ge на Si (≈600 °C) до комнатной температуры накопленная термоупругая деформация может релаксировать за счет образования термических трещин. Так как КТР GaAs ($5{,}9\cdot10^{-6}$ °C^{-1}) и Ge ($5{,}8\cdot10^{-6}$ °C^{-1}) больше, чем КТР Si ($2{,}6\cdot10^{-6}$ °C^{-1}) [86], то к эпитаксиальному слою приложена растягивающая деформация в процессе охлаждения.

Как правило, в эпитаксиальном слое III-V появляются линии термических трещин, распространяющиеся в двух взаимно перпендикулярных направлениях <110> [60]. На ранней стадии образования трещины преобладают лишь в одном из направлений <110>. Однако, если толщина эпитаксиального слоя значительно превышает критическую толщину образования трещин, то наблюдаются ортогональные линии трещин [88]. Поскольку их зарождение происходит на других уже существующих дефектах [89], в частности на дислокациях несоответствия, то формирование трещин сначала в одном кристаллографическом направлении <110>, а с увеличением толщины эпитаксиального слоя образование ортогональной сетки трещин можно объяснить различием в скорости скольжения дислокаций несоответствия α- и β-ДН [90], обсуждаемое ранее в разделе 1.1.2.3.

Вероятность образования трещин зависит не только от толщины эпитаксиальных слоев и количества дефектов, но и от многих других параметров, включая состав эпитаксиальных слоев, их свойства, ориентации и отклонения среза подложки, а также от условий роста [17]. Поэтому для более точной оценки критической толщины требуется проведение ростовых экспериментов. Отмечается, что в гетероструктуре GaAs/Si термические трещины начинают проявляться, если толщина GaAs превышает ≈3 мкм [89], а в гетероструктурах III-V/Ge/Si при толщине слоев III-V/Ge ≈3,4 мкм [91].

Наличие термических трещин оказывает отрицательное влияние на качество эпитаксиальных слоев III-V и, как следствие, на характеристики полупроводниковых устройств. Они вносят центры рассеяния света, пути утечки электрического тока [88].

1.2 Пути решения фундаментальных проблем

Для кремниевой фотоники важна интеграция с различными системами материалов III-V, в том числе InAs, InP, GaSb, для расширения используемого диапазона длин волн [1]. Технологии интеграции таких материалов с кремнием эпитаксиальными методами ввиду их разных свойств отличаются. В диссертации обзор литературы и исследования сконцентрированы на системе полупроводников In(Ga,Al)As/GaAs.

С целью решить фундаментальные проблемы при гетероэпитаксии светоизлучающих гетероструктур III-V на поверхности кремния разработаны различные методы.

Так, для полного подавления антифазных границ (АФГ) используется сложная подготовка поверхности подложек. Она может быть реализована разными способами:

— с помощью формирования V-образных канавок с гранями {111} [23, 24];

— с помощью создания поверхности, содержащей двухатомные ступени [20], и тщательного контроля начального процесса роста III-V [21, 39];

— с помощью специфического роста буферного слоя Si, в котором чередуются процессы роста и отжига, и последующего трехстадийного роста буферного слоя GaAs толщиной 1 мкм [92].

Несмотря на то, что перечисленные выше подходы позволяют полностью устранить антифазные границы в приборных слоях III-V, они представляют собой достаточно сложные технологии. Следовательно, поиск и развитие альтернативных подходов является актуальным. При проведении обзора литературы найдены следующие методы, которые позволяют уменьшить плотность антифазных границ:

— подбор параметров роста III-V: скорость [93], отношение потоков V/III, температура [43];

— ex-situ отжиг [94];

— зародышевый слой $Al_xGa_{1-x}As$ [95, 96].

Они рассмотрены в разделе 1.2.1, где определены актуальные направления исследований для развития данных методов.

Стоит отметить, что в технологии кремниевой наноэлектроники используются подложки с кристаллографической ориентацией (001) и отклонением среза <0,5°. Поэтому подходы для уменьшения плотности АФГ, подразумевающие использование вицинальных поверхностей подложек (001) с отклонением среза в кристаллографическом направлении <110> на 4°–7° [41], не являются актуальными. К тому же без использования дополнительных методов применение

только таких вицинальных поверхностей подложек не гарантирует эпитаксиальные слои III-V без антифазных границ [97].

Что касается методов для уменьшения плотности прорастающих дислокаций (ППД), то большинство из них достаточно детально изучены, и благодаря их использованию существует возможность достичь ППД в слоях III-V порядка 10^6–10^7 см$^{-2}$ [98, 99], что, как отмечено ранее (см. раздел 1.1.2.4), приемлемо для некоторых приложений. К таким методам относятся:

— двух- и трехстадийный рост буферного слоя GaAs [17],

— буферный слой Ge между GaAs и Si [100],

— термоциклический отжиг (ТЦО) [17],

— дислокационные фильтры (ДФ) [17].

Рекомендации для применения ТЦО и ДФ, сформулированные при проведении обзора литературы, представлены в разделе 1.2.2.

Недавно разработан асимметричный ступенчато-градиентный фильтр III-V, с использованием которого плотность прорастающих дислокаций удалось снизить до значений $\approx 2\cdot 10^6$ см$^{-2}$ в пределах толщины буферных слоев III-V равной ≈2,6 мкм, выращенных на подложке Si (001) [19]. В статье [19] отмечается, что возможно достичь лучших результатов при усовершенствовании дизайна асимметричного ступенчато-градиентного фильтра.

Существует также методика для уменьшения плотности прорастающих дислокаций (ППД), представляющая собой использование термоциклического отжига после роста вставки AlGaAs с толщиной несколько десятков нанометров вблизи гетерограницы с Si [101, 102]. Явное достоинство данной методики заключается в добавлении незначительной толщины. Более детально она рассмотрена в разделе 1.2.2.3, где описаны механизмы, отвечающие за уменьшение ППД при ее использовании, а также актуальные направления исследований.

Для борьбы с дислокациями несоответствия (ДН), которые образуются во время охлаждения после роста в активной области светоизлучающей гетероструктуры III-V на гетерогранице GaAs со слоем, содержащим атомы In, применяются вставки $In_{0,15}Ga_{0,85}As$ толщиной 7 нм до и после активной области. Вставки $In_{0,15}Ga_{0,85}As$ выступают в роли ловушек для ДН [25, 26]. Более подробное описание такого рода ДН представлено ранее в разделе 1.1.2.1.

Для уменьшения вероятности образования термических трещин необходимо минимизировать плотность дефектов в гетероструктуре [88], толщину эпитаксиальных слоев [89]. Еще одной из рекомендаций является увеличение времени охлаждения после роста [92]. Кроме того селективный эпитаксиальный рост, то есть не на всей поверхности подложки, а на определенном участке поверхности, которая не закрыта маской, способен увеличить значение критической толщины трещинообразования. Результаты исследований, описанных в статье [103], указывают на возможность компенсации термоупругих деформаций, возникающих во

время охлаждения гетероструктуры после роста с помощью гетероэпитаксии слоя III-V, создающего деформации противоположного знака. При этом авторы отмечают, что добавочный эпитаксиальный слой III-V значительно не увеличивает плотность дефектов при отработанной технологии. Однако перечисленные подходы не гарантируют отсутствие термических трещин. Поэтому к настоящему времени разработаны различные способы контролировать их образование [17]. Для необходимости их использования требуется знать критическую толщину трещинообразования, которую по причинам, описанным ранее (см. раздел 1.1.3), целесообразно определять экспериментальным путем.

Важно выделить некоторые технологии, состоящие из комплекса разных методов, перечисленных ранее, и направленные на уменьшение плотности дефектов в активной области гетероструктуры III-V, выращенной на точноориентированной подложке Si (001), которые привели к выдающимся на сегодняшний день результатам.

При проведении обзора литературы удалось выделить три основных технологии. Их последовательность изложения ничем не определяется.

Первая технология включает в себя следующие шаги. Первый шаг — сложная подготовка поверхности для того, чтобы на ней преобладали двухатомные ступени, и тщательный контроль процесса роста зародышевого слоя GaP толщиной ≈40 нм. Подготовка поверхности заключается в росте буферного слоя Si и отжига при высокой температуре в атмосфере водорода. Первый шаг позволяет полностью подавить антифазные границы [18]. Второй шаг — двухстадийный рост GaAs с последующим термоциклическим отжигом для уменьшения плотности прорастающих дислокаций (ППД) до значений $\approx 4\cdot 10^7$ см$^{-2}$ [19]. Третий шаг — использование асимметричного ступенчато-градиентного фильтра III-V для уменьшения ППД до значений $\approx 2\cdot 10^6$ см$^{-2}$ [19]. В статье [19] отмечается, что после роста GaAs с толщиной 300 нм на такой платформе среднеквадратичная шероховатость поверхности составляет ≈2 нм. Четвертый шаг — формирование вставок $In_{0,15}Ga_{0,85}As$ толщиной 7 нм до и после активной области для вытеснения из активной области дислокаций несоответствия, образующихся во время охлаждения после роста III-V. Во время первого шага данной технологии для роста Si используется газофазная эпитаксия, для роста GaP — МОС-гидридная эпитаксия, а во время остальных шагов для роста III-V используется молекулярно-пучковая эпитаксия.

Благодаря первой технологии и ее различным версиям созданы полупроводниковые лазеры III-V на подложке кремния с распределенной обратной связью [104], с перестройкой частоты генерации [105], с синхронизацией мод [106], а также с экстраполированным сроком службы $2\cdot 10^5$ ч при рабочей температуре 80 °C [16] и другие.

Вторая технология включает в себя следующие шаги. Первый шаг — подготовка поверхности для того, чтобы на ней преобладали двухатомные ступени, и последующий

двухстадийный рост GaAs толщиной 400 нм. Подготовка поверхности подразумевает отжиг подложки кремния (без предварительного роста буферного слоя Si) при высокой температуре в атмосфере водорода и резкое уменьшение температуры подложки [20]. Как и в первой технологии, первый шаг позволяет полностью подавить антифазные границы [21]. Второй шаг — рост слоя GaAs для выравнивания поверхности. Согласно результатам, описанным в статье [21] среднеквадратичная шероховатость поверхности на данном шаге меньше 1 нм. Третий шаг — специфическая комбинация роста четырех-пяти наборов дислокационных фильтров InGaAs/GaAs разделенных слоем GaAs с толщиной от 300 до 350 нм с in-situ отжигом [22]. Третий шаг позволяет уменьшить плотность прорастающих дислокаций до значений $\approx 5 \cdot 10^7$ см$^{-2}$ [79]. В данной технологии первый шаг реализуется методом МОС-гидридной эпитаксии, а остальные шаги — методом молекулярно-пучковой эпитаксии.

Благодаря применению второй технологии созданы полупроводниковые лазеры с микрорезонатором в форме диска [107], с низким значением пороговой плотности тока [79], [108] и другие [109].

Третья технология основана на создании V-образных канавок на поверхности подложки. При этом можно выделить два вида такой технологии, которые отличаются как процессом создания V-образных канавок, так и заращиванием их буферными слоями [23, 24]. В обоих случаях удается создать платформу GaAs/Si без антифазных границ и двумерных дефектов, прорастающих к поверхности, со среднеквадратичной шероховатостью поверхности ≈0,8 нм и плотностью прорастающих дислокаций $\sim 10^7$ см$^{-2}$.

Благодаря третьей технологии продемонстрированы полупроводниковые лазеры с микрорезонаторами разного типа с высокой рабочей температурой и с низкой пороговой плотностью тока на подложке Si [8], а также полупроводниковые лазеры на подложках КНИ [23, 32]. При этом важно отметить, что в работе [23] высококачественный полупроводниковый лазер, генерирующий непрерывное излучение вплоть до температуры 85 °C, интегрирован вместе с кремниевым волноводом на одной подложке.

На основе результатов, полученных с помощью передовых технологий, описанных ранее, можно сделать вывод о том, что на данном этапе развития именно прорастающие дислокации являются одним из ключевых препятствий для дальнейшего улучшения оптического качества полупроводниковых лазеров III-V на кремнии. Кроме того для приближения технологий к приборному применению требуется, в том числе минимизировать толщину буферных слоев [16].

Примечательными являются недавние исследования [100, 110], которые показали, что замена части толстого буферного слоя GaAs на тонкий буферный слой Ge, параметр решетки (a) и коэффициент термического расширения (КТР) которого близки по значению с a и КТР для GaAs соответственно, позволяет сохранить структурные свойства выращенной на них

гетероструктуры III-V. Данный результат дополняется результатами работы [91], где продемонстрировано, что использование буферного слоя Ge эффективнее в уменьшении плотности прорастающих дислокаций, чем использование буферного слоя GaAs, выращенного с применением двухстадийного режима [91]. Следовательно, технология формирования платформы с буферным слоем Ge представляется актуальной как для уменьшения толщины буферных слоев, так и для уменьшения плотности прорастающих дислокаций.

Кроме того слой Ge может быть использован как отдельный рабочий слой в гетероструктуре на основе полупроводников III-V/Ge/Si, например, для создания тонкопленочного фотодетектора [38, 111, 112], резонаторного фильтра [113], что расширит функциональные возможности конечного устройства.

Однако в большинстве работ по гетероэпитаксии III-V на платформах Ge/Si (001) подложка кремния имеет вицинальную поверхность для борьбы с антифазными дефектами. Как отмечено ранее, в технологии кремниевой наноэлектроники используются подложки с кристаллографической ориентацией (001) и отклонением среза <0,5°. Поэтому требуется поиск и развитие промышленно-ориентированных подходов для подавления антифазных дефектов при гетероэпитаксии на платформе с буферным слоем Ge. Перечисленные ранее и они же рассмотренные далее в разделе 1.2.1 методы как по отдельности, так и в комплексе могут быть использованы для решения данной задачи.

В таблице 1 представлены методы для уменьшения плотности дефектов, которые использовались и анализировались в диссертации, с указанием актуальных направлений исследований. Более подробно, большинство из них обсуждаются далее в данном разделе.

Таблица 1 — Пути решения фундаментальных проблем интеграции III-V с подложками технологии кремниевой наноэлектроники методами эпитаксиального осаждения, которые применялись в диссертации. В таблице перечислены основные минусы, плюсы методов, а также актуальные направления исследований (Актуальность). ЭС — эпитаксиальный слой, АФГ — антифазная граница, МОСГЭ — МОС-гидридная эпитаксия, ТЦО — термоциклический отжиг, МПЭ — молекулярно-пучковая эпитаксия, ППД — плотность прорастающих дислокаций, РД — метод рентгеновской дифрактометрии, EPD — etch pit density (плотность «ямок» травления от дефектов), RMS — root mean square (среднеквадратичная шероховатость поверхности)

Антифазная граница (АФГ)	Прорастающая дислокация (ПД)
Подбор параметров роста III-V (раздел 1.2.1.1): скорость [93], отношение V/III, температура [43] Плюс: эффективное уменьшение плотности АФГ при оптимизированных параметрах роста в случае режима роста на ступенях [43] Актуальность: оптимизация параметров МОСГЭ буферных слоев III-V в системе III-V/Ge/Si (001)	**Буферный слой Ge между GaAs и Si [100, 114, 115]** Плюсы: толщина ≈1 мкм (в зависимости от задачи может быть меньше [100]), RMS <1 нм, ППД ~10^7 см$^{-2}$ согласно EPD [115]; эффективнее в уменьшении ППД, чем буферный слой GaAs, выращенный с применением двухстадийного режима [91]; замена части толстого буферного слоя GaAs на тонкий буферный слой Ge позволяет сохранить структурные свойства, выращенной на них гетероструктуры III-V [100, 110]; расширение функциональных возможностей платформы III-V/Ge/Si (001) ввиду наличия дополнительного материала — Ge [111–113]
Отжиг [94] (раздел 1.2.1.2) Плюс: простота реализации Актуальность: совмещение с ТЦО с целью сокращения расхода веществ (в случае использования ТЦО и отжига в разные этапы процесса роста III-V требуется больше времени и, как следствие, расход веществ увеличивается); исследование поведения АФГ после отжига в объеме III-V	**Термоциклический отжиг (ТЦО) [17] (раздел 1.2.2.1)** Плюсы: совместно с двухстадийным ростом GaAs уменьшение ППД до $2\cdot10^6$ см$^{-2}$ согласно EPD [98]; детально исследован для методов роста МПЭ и МОСГЭ Минусы: увеличение расхода веществ и длительности процесса роста Актуальность: исследование влияния на шероховатость поверхности

Продолжение таблицы 1

Антифазная граница (АФГ)	Прорастающая дислокация (ПД)
Использование зародышевого слоя $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ [95, 96] (раздел 1.2.1.3) Плюс: простота реализации Актуальность: изучение механизма аннигиляции АФГ; определение критических параметров роста	**Дислокационные фильтры [17] (раздел 1.2.2.2)** Плюсы: совместно с двухстадийным ростом GaAs и ТЦО уменьшение ППД до $1{,}5 \cdot 10^6$ см$^{-2}$ согласно EPD [99]; детально исследованы Минусы: менее эффективны, чем ТЦО [99]; значительно увеличивают толщину ЭС **Использование ТЦО после роста вставки AlGaAs вблизи гетерограницы с Si [101] (раздел 1.2.2.3)** Плюс: не добавляет значительной толщины Актуальность: оптимизация параметров роста вставки AlGaAs для увеличения эффективности; исследование эффективности в системе III-V/Ge/Si (001)

1.2.1 Методы для уменьшения плотности антифазных границ

1.2.1.1 Подбор параметров роста $A^{III}B^{V}$: скорость, отношение V/III, температура

Скорость роста

Исследование скорости роста на плотность антифазных границ найдено лишь в системе GaP/Si (001) с отклонением среза 4° в направлении [110] и с применением метода молекулярно-пучковой эпитаксии [93]. Предполагается, что выводы, сделанные в данной работе, справедливы и для метода МОС-гидридной эпитаксии (МОСГЭ) и системы GaAs/Si (001) с отклонением среза <0,5° в направлении [110], так как в доказательство своей гипотезы авторы ссылаются на работы, где исследовалась система GaAs/Si. Однако по-прежнему актуальны эксперименты в данном направлении с применением метода МОСГЭ, подложек с ориентацией (001) и отклонением среза <0,5° и с разными системами полупроводников: GaAs/Si, GaAs/Ge.

В работе [93] установлено, что для эффективной аннигиляции антифазных границ благоприятны низкие скорости роста. Авторы публикации [93] объясняют такой результат следующим образом. Во-первых, увеличение скорости роста означает увеличение количества адатомов Ga, адсорбирующихся на поверхность в единицу времени. С увеличением количества адатомов число столкновений их друг с другом в единицу времени увеличивается. В результате чего они не успевают мигрировать в благоприятные места, особенно в присутствии антифазных границ, которые создают некоторый энергетический барьер для поверхностной диффузии адатомов Ga. В этих условиях домены разных фаз растут с близкими скоростями (преобладает 2D рост III-V). Во-вторых, существует диффузионная анизотропия в GaAs, обусловленная реконструкцией поверхности димеров As-As, которая приводит к тому, что диффузионная способность атомов Ga вдоль направления димеров As-As в 4 раза больше, чем диффузионная способность перпендикулярно димерам As-As [50, 51]. Различие в направлении усиленной поверхностной диффузии внутри и вне антифазного домена (АФД) может привести к разной скорости роста. В таком случае окружающая область будет заращивать АФД, заставляя антифазные границы аннигилировать. Зависимость длины поверхностной диффузии от направления должна стать более значительной при более низких скоростях роста [93]. В-третьих, при использовании большей скорости роста адатомы Ga не успевают мигрировать к антифазной границе (АФГ) и обеспечить достаточное количество Ga, необходимое для увеличения отношения количества связей Ga-Ga к P-P вдоль АФГ, чтобы способствовать аннигиляции вдоль плоскости {1nn} с более низким индексом n такой, как {111}A (рисунок 5) [93].

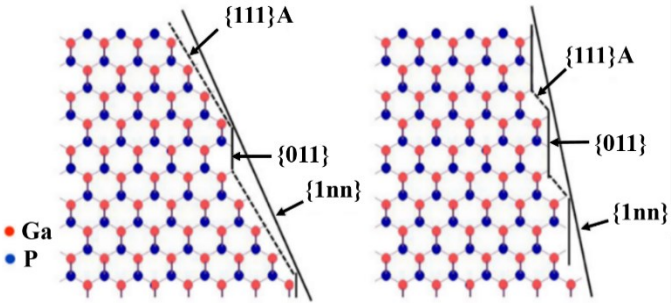


Рисунок 5 — Иллюстрации плоскостей антифазных границ (АФГ) {1nn}, состоящих из террас {011} и {111}A (рисунок адаптирован из работы [93])

Примечания

1 Соотношение террас {011} и {111}A определяет плоскость антифазной границы, а также соотношение связей Ga-Ga и P-P.

2 Если предпочтение отдается связям Ga-Ga, происходит распространение АФГ вдоль плоскостей с более низким индексом {1nn}, что приводит к более быстрой аннигиляции.

Отношение V/III, температура роста

В работе [43] построены зависимости коэффициента дисбаланса скорости роста (С α/β — отношение скорости роста α-фазы к скорости роста β-фазы; α- и β-фазы — две различные фазы кристалла III-V, имеющие соответственно больше ступеней A и ступеней B на поверхности с краями параллельными и перпендикулярными димерам атомов группы V соответственно) от температуры для различных отношений потоков V/III с использованием значений скоростей включения адатомов III на ступенях A и B, экспериментально определенных в работах [48, 49], в которых исследовался рост GaAs на GaAs методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ). Результаты представлены на рисунке 6. Они относятся к росту GaAs на GaAs/Si или GaAs/Ge методом МПЭ и в некоторой степени методом МОС-гидридной эпитаксии (см. далее).

Предполагается, что тенденции, описанные по рисунку 6 в работе [43] будут аналогичными для других полупроводников III-V. Авторы работы [43] также отмечают, что гидрогенизация поверхности во время роста III-V методом МОС-гидридной эпитаксии (МОСГЭ) может существенно повлиять на дисбаланс скоростей включения атомов III на ступенях. Поэтому эксперименты с использованием метода МОСГЭ в данном направлении являются актуальными.

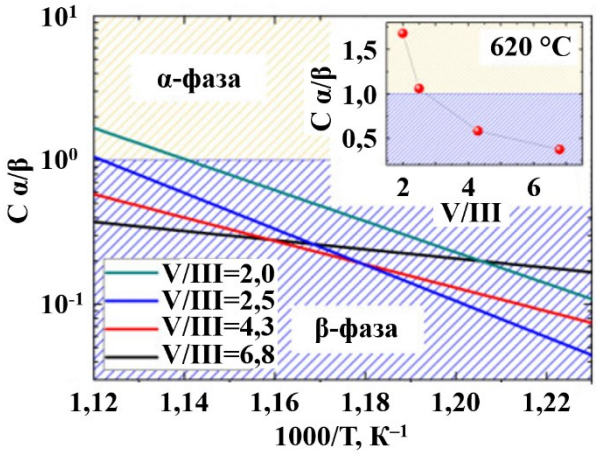


Рисунок 6 — Коэффициент дисбаланса скорости роста (C α/β) как функция от 1000/T (T — температура) для различных отношений потоков V/III, используемых в случае эпитаксии GaAs; на вставке эволюция C α/β в зависимости от отношения потоков V/III для GaAs, выращенного при температуре 620 °C (рисунок адаптирован из работы [43])

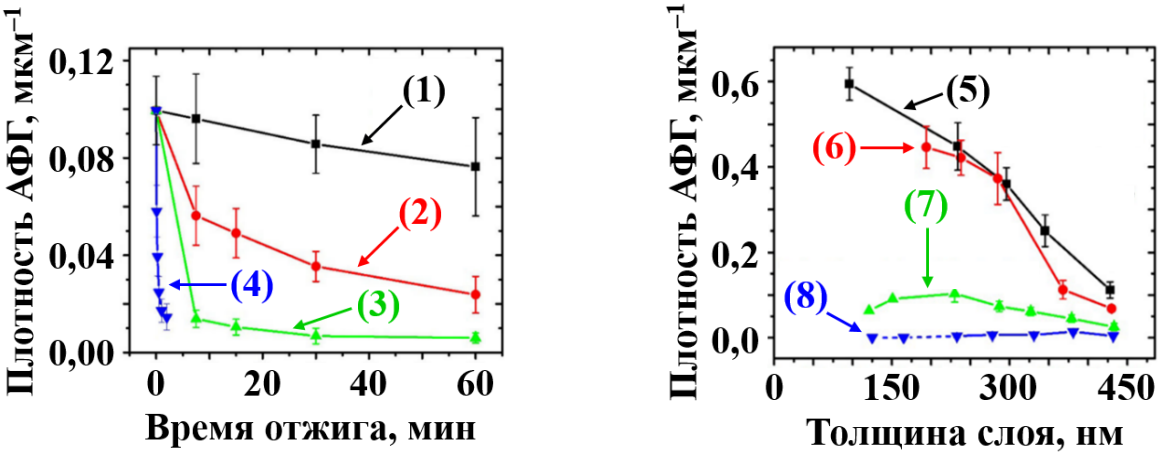
Примечания

1 Диапазон температур от 540 °C до 620 °C.

2 Оранжевая область показывает условия, при которых α-фаза III-V растет быстрее, а синяя область показывает условия, при которых β-фаза III-V растет быстрее.

1.2.1.2 Ex-situ отжиг

В работе [94] осуществлялся рост слоя GaAs на подложках Si (001) без специального отклонения среза методом МОС-гидридной эпитаксии и исследовалось влияние постростового (ex-situ) отжига на плотность антифазных границ (АФГ). Методика роста подробно описана в работе [94]. Авторами обнаружено, что после отжига плотность АФГ значительно уменьшается и скорость уменьшения зависит от температуры (рисунок 7 (а)). При температуре отжига 650 °C и выше плотность АФГ уменьшилась на порядок с 0,10 до 0,01 мкм$^{-1}$ менее чем за 10 мин. Кроме этого в работе [94] установлено, что после отжига наблюдается значительное уменьшение среднего размера АФД. Сделан вывод о том, что антифазные границы подвижны во время отжига, и их движение происходит к центрам кривизны, которое в конечном итоге приводит к аннигиляции.



(а) (б)

Условия отжига: 1 — Температура (T) 550 °C; 2 — T=600 °C; 3 — T=650 °C; 4 — T=700 °C; 5 — без отжига; 6 — T=600 °C, длительность (t) 10 мин; 7 — T=600 °C, t=30 мин; 8 — T=650 °C, t=10 мин.

Рисунок 7 — Зависимости плотности антифазных границ (АФГ) в слое GaAs для различных условий отжига (рисунок адаптирован из работы [94])

Примечания

1 Все образцы были покрыты Al_2O_3 во время отжига.

2 Точки, расположенные в пунктирных линиях на зависимости (8), находятся ниже предела обнаружения АФГ.

3 Из зависимостей на рисунке (а) видно, что плотность АФГ последовательно уменьшается с увеличением длительности и температуры отжига.

4 Из зависимостей на рисунке (б) видно, что плотность АФГ уменьшается к поверхности слоя GaAs после отжига при 600 °C в течение 10 мин; после увеличения длительности отжига до 30 мин или повышения температуры до 650 °C плотность АФГ уменьшается по всей остальной части слоя GaAs.

В статье [94] обсуждается механизм движения антифазных границ (АФГ). Сделан вывод, что движение АФГ во время отжига, вероятно, обеспечивается разрывом антиситовой связи и самодиффузией атомов Ga и As через близлежащие вакансии Ga и As соответственно. Однако авторы работы [94] отмечают, что вывод справедлив для миграции АФГ на поверхности. Профили плотности АФГ по глубине на рисунке 7 (б) для различных условий отжига показывают, что другие кинетические факторы могут управлять диффузионным движением АФГ в основной массе GaAs. Поэтому любые исследования процессов движения антифазных границ, происходящих после отжига в объеме GaAs имеют значительный интерес.

1.2.1.3 Зародышевый слой $Al_xGa_{1-x}As$

В работе [95] исследованы четыре различных состава зародышевого слоя $Al_xGa_{1-x}As$ толщиной 40 нм (x=0; 0,3; 0,5; 0,7) на подложке Si (001) с отклонением среза <0,1°, на котором впоследствии выращен слой GaAs толщиной 2,3 мкм. В качестве метода роста III-V выступала молекулярно-пучковая эпитаксия. В отличие от гетероструктуры III-V/Si с зародышевым слоем $Al_{0,7}Ga_{0,3}As$, в которой антифазные границы (АФГ) распространялись до поверхности GaAs, гетероструктура III-V/Si с зародышевым слоем $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ имела АФГ лишь вблизи гетерограницы с Si. Высокое качество кристалла GaAs с зародышевым слоем $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ также подтверждалось интенсивностью излучения фотолюминесценции. Авторы работы [95] проверили эффективность зародышевого слоя $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ в улучшении оптических свойств светоизлучающей гетероструктуры на основе квантовых точек (КТ) InAs. Интенсивность фотолюминесценции (ФЛ) слоя КТ InAs, выращенного на III-V/Si с зародышевым слоем $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$, была в два раза выше, чем с зародышевым слоем GaAs, а с увеличением доли Al в зародышевом слое $Al_xGa_{1-x}As$ интенсивность ФЛ снижалась. Таким образом, в работе [95] установлено, что слой GaAs без антифазных границ может быть получен за счет использования зародышевого слоя $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$.

Кроме этого, в недавней работе [96] продемонстрировано, что доля Al в зародышевых слоях $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ играет важную роль в уменьшении плотности антифазных границ (АФГ) и при использовании МОС-гидридной эпитаксии для роста III-V на Ge/Si (001). Установлено, что линейная плотность АФГ на поверхности гетероструктур с x=0; 0,3; 0,6; 1 равны 0,550; 0,003; 0,019; 0,880 мкм$^{-1}$ соответственно. Однако, несмотря на порядок отличающиеся значения плотности АФГ для x=0,3 и x=0,6, наблюдается одинаковая интенсивность сигнала фотолюминесценции от верхнего слоя GaAs толщиной 1,1 мкм, что может указывать на то, что для таких низких значений плотности антифазных границ более сильное отрицательное влияние на оптические свойства оказывают другие типы дефектов, например, прорастающие дислокации, плотность которых в подобных образцах велика от 10^7 до 10^8 см$^{-2}$.

Детальный механизм аннигиляции антифазных границ при использовании зародышевого слоя $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ не совсем ясен, и критические параметры роста остаются неопределенными. Если бы причиной была только сильная энергия связи атомов Al-As, то в таком случае с ростом доли Al плотность антифазных границ должна была уменьшиться. Однако в работах [95, 96] демонстрируется обратная ситуация при увеличении доли Al.

Установление причин уменьшения плотности антифазных границ за счет использования

в качестве зародышевого слоя твердого раствора $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ является актуальным вопросом, так как позволит контролировать этот процесс и адаптировать режимы роста под различные системы полупроводников.

1.2.2 Методы для уменьшения плотности прорастающих дислокаций

1.2.2.1 Термоциклический отжиг

Термоциклический отжиг (ТЦО, TCA — thermal cyclic annealing) во время роста позволяет активировать движение дислокаций в гетероструктуре, состоящей из материалов с разным коэффициентом термического расширения, благодаря термическим напряжениям, возникающим при резком изменении температуры и, таким образом способствовать их аннигиляции [17]. Уменьшение плотности прорастающих дислокаций в GaAs/Si с помощью ТЦО достаточно серьезно исследовано [98, 99, 116]. Основные рекомендации по термоциклическому отжигу, установленные при проведении обзора литературы следующие.

1. Эффективность термоциклического отжига определяется начальной плотностью прорастающих дислокаций (ППД) — чем выше начальное значение ППД, тем эффективнее проявит себя термоциклический отжиг [17, 98]. Данный факт связан с тем, что чем больше дислокаций, тем больше вероятность их взаимодействия друг с другом и последующей аннигиляции.

2. Оптимальная минимальная температура для термоциклического отжига ~350 °C [102, 117]. Чем больше разница между максимальной и минимальной температурой, тем эффективнее термоциклический отжиг [98]. Однако нет смысла уменьшать температуру ниже 350 °C, так как дислокации при таких низких температурах практически неподвижны и не взаимодействуют друг с другом.

3. Наиболее эффективная максимальная температура для термоциклического отжига ≈850 °C [102]. Однако оптимальное значение для получения максимальной эффективности от ТЦО будет определяться системой материалов, методом роста и технологическими возможностями оборудования. Например, при использовании платформ, в которых присутствует слой Ge с температурой плавления ≈938 °C, температуры отжига близкие к температуре плавления могут деструктивным образом сказаться на качестве платформы и гетероструктуры в целом. Для метода молекулярно-пучковой эпитаксии максимальной температурой принято считать ≈745 °C из-за деградации поверхности GaAs при больших температурах [19], а для МОС-

гидридной эпитаксии максимальная температура определяется технологическими возможностями нагревательного элемента.

4. Увеличение количества циклов термоциклического отжига (ТЦО) благоприятным образом сказывается на уменьшении плотности прорастающих дислокаций (ППД), но с ростом числа циклов значение ППД выходит на насыщение [98]. Так как во время ТЦО происходит расход веществ и амортизация оборудования, то для каждой ситуации требуется найти оптимальное значение числа циклов.

5. Длительность выдержки при минимальной и максимальной температуре во время термоциклического отжига не играет значимой роли в уменьшении плотности прорастающих дислокаций.

6. Увеличение толщины эпитаксиальных слоев до проведения термоциклического отжига улучшает его эффективность в уменьшении плотности прорастающих дислокаций [99]. Необходимо учитывать, что с ростом толщины эпитаксиальных слоев увеличивается вероятность растрескивания структуры.

Стоит отметить, что влияние термоциклического отжига на шероховатость поверхности слабо изучено — найдена лишь одна статья [116]. Поэтому исследования в данном направлении по-прежнему актуальны.

1.2.2.2 Дислокационные фильтры

Сверхрешетки с напряженными слоями принято называть дислокационными фильтрами (ДФ). ДФ обычно состоят из нескольких пар не соответствующих по параметру решетки слоев, попеременно подвергающихся сжатию и растяжению. Если толщина каждого слоя ДФ меньше равновесной критической толщины, то они будут создавать упругие деформации, вызванные несоответствием параметров решеток. Деформационное поле дислокационных фильтров при достаточном рассогласовании параметров решеток и достаточных толщинах слоев изгибает дислокации, распространяющиеся вверх, что способствует увеличению вероятности их взаимодействия и последующей аннигиляции [17].

При гетероэпитаксии GaAs/Si широко применяются различные наборы ДФ: InGaAs/GaAs, InAlAs/GaAs, GaAsP/GaAs. К настоящему времени существует множество работ по их оптимизации [17], из которых можно обобщить следующие рекомендации для проектирования дислокационных фильтров.

Для усиления фильтрующего эффекта увеличение значения деформаций в ДФ, слои которого находятся в равновесном состоянии, может быть полезно в определенном диапазоне состава твердых растворов, например, в слоях $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ до x=0,140 [91]. Дальнейшее увеличение деформаций, например, при x=0,175, может привести к обратному эффекту из-за того, что происходит изменение режима роста, которое может ухудшить качество дислокационных фильтров, например, вызвать модуляцию толщины и 3D рост, а в случае перехода слоя в метастабильное состояние появляется еще и вероятность образования новых дислокаций [91].

Толщина твердого раствора в свою очередь должна быть меньше равновесной критической толщины, которая рассчитывается по формуле (1). Только в таком случае вероятность образования новых дислокаций минимальна. Толщина разделительного слоя GaAs определяется значением, при котором напряжения в решетке GaAs спадают до нуля, так как наличие остаточных напряжений при росте твердого раствора изменит эффективность встраивания атомов (например, в случае с InGaAs атомов In [118]) и в конечном итоге повлияет на состав. Известно, что для гетероструктуры $In_{0,2}Ga_{0,8}As/GaAs$ толщина GaAs, при которой остаточные напряжения спадают до нуля (s_0), составляет 15 нм [118].

Так же как и в случае термоциклического отжига эффективность дислокационных фильтров в уменьшении плотности прорастающих дислокаций (ППД) зависит от начального значения ППД [91]. Именно по этой причине при увеличении количества наборов ДФ эффективность дислокационной фильтрации выходит на насыщение [119].

Сравнение эффективности наиболее распространенных дислокационных фильтров InAlAs/GaAs и InGaAs/GaAs в уменьшении плотности прорастающих дислокаций показало преимущество первого набора [119, 120]. Данный результат объясняется тем, что напряжения, которые испытывают слои InAlAs/GaAs имеют большее значение, чем слои InGaAs/GaAs при одинаковом значении рассогласования параметров решеток твердого раствора и GaAs, а также при одинаковых значениях толщин соответствующих слоев и режимах роста [119].

В качестве дислокационных фильтров могут выступать также и квантовые точки (КТ) InAs, поскольку самоорганизующиеся КТ, управляемые деформацией, создают вокруг себя достаточно большое трехмерное поле деформаций, которое приводит к изгибу и аннигиляции прорастающих дислокаций [121].

Стоит отметить, что термоциклический отжиг (ТЦО) эффективнее в уменьшении плотности прорастающих дислокаций, чем дислокационные фильтры [99]. Совместное использование двухстадийного роста буферного слоя GaAs, ТЦО и ДФ с оптимизированными параметрами может привести к превосходным результатам в уменьшении плотности

прорастающих дислокаций вплоть до значений ~10^6 см$^{-2}$ (по «ямкам» травления от дефектов) [99, 122].

1.2.2.3 Вставка AlGaAs вблизи гетерограницы с Si

Использование вставки $Al_{0,5}Ga_{0,5}As$ вблизи гетерограницы с Si совместно с термоциклическим отжигом (ТЦО) позволяет уменьшить плотность прорастающих дислокаций в слое GaAs над $Al_{0,5}Ga_{0,5}As$ [101, 102]. За этот эффект отвечают два механизма (рисунок 8):

а) расширение сегмента дислокации несоответствия вдоль гетерограницы AlGaAs/LT-GaAs во время ТЦО, где LT-GaAs — слой GaAs, выращенный при пониженной температуре;

б) блокировка дислокационных полупетель, повторно генерируемых с гетерограницы LT-GaAs/Si на этапе ТЦО.

Механизм (а) увеличивает вероятность аннигиляции прорастающих дислокаций. Механизм (б) не дает полупетлям образовать дополнительные прорастающие дислокации.

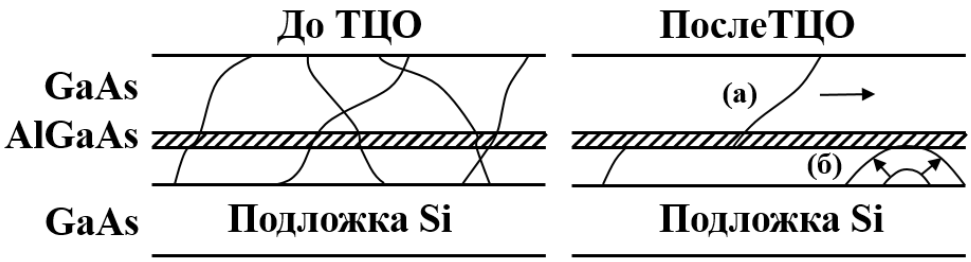


Рисунок 8 — Модель, показывающая ограничение дислокаций в зародышевом слое GaAs путем введения тонкого слоя AlGaAs (слева — до термоциклического отжига (ТЦО), справа — после ТЦО) (рисунок адаптирован из работы [102])

Авторы [101] предположили, что наличие таких механизмов именно после термоциклического отжига говорит о том, что небольшого рассогласования решеток между $Al_{0,5}Ga_{0,5}As$ и GaAs (≈0,075 %) недостаточно для изгиба дислокаций, и что только при отжиге вставка AlGaAs играет значительную роль в уменьшении числа прорастающих дислокаций в верхнем слое GaAs. Изгиб дислокаций, а также блокировка полупетель могут произойти, когда образец охлаждается ниже температуры, при которой все еще подвижные дислокации в GaAs становятся неподвижными (или менее подвижными) в AlGaAs. Авторы работы [101] считают, что такая гипотеза имеет право на существование, поскольку связь Al-As сильнее, чем Ga-As, на что указывает более высокая температура плавления AlAs по сравнению с GaAs.

Использование вставки AlGaAs вблизи гетерограницы с Si совместно с термоциклическим отжигом для уменьшения плотности прорастающих дислокаций (ППД) является целесообразным способом, так как не добавляет значительной для трещинообразования толщины эпитаксиальных слоев. Остаются открытыми вопрос оптимизации параметров отжига и вставки AlGaAs (расположение относительно гетерограницы с Si, доля Al, толщина вставки) для увеличения эффективности уменьшения ППД, а также вопрос эффективности при использовании в гетероструктурах III-V/Ge на точно ориентированных подложках (001).

1.3 Подавление взаимной диффузии атомов на гетерогранице $A^{III}B^{V}/A^{IV}$

В предыдущем разделе установлено, что использование буферного слоя Ge между слоями III-V и Si является подходом эффективным для уменьшения плотности прорастающих дислокаций в эпитаксиальных слоях III-V, для уменьшения толщины буферных слоев и более функциональным с точки зрения расширения возможностей платформы на основе полупроводников III-V/Ge/Si.

Для эффективной работы конечных полупроводниковых приборов требуется наличие резких гетерограниц. В связи с этим необходимо найти эффективный способ подавления взаимной диффузии атомов на гетерогранице III-V/Ge, который мог бы быть совмещен с подходами, используемыми для уменьшения плотности дефектов в эпитаксиальных слоях III-V.

Для системы слоев GaAs/Ge коэффициент диффузии (D_c) хорошо описывается уравнением Аррениуса по формуле (2) [123].

$$D_c = D_0 \cdot \exp(-E_a / (k_B \cdot T)), \quad (2)$$

где D_0 — коэффициент, зависящий от структуры кристалла и механизма диффузии, см^2/с;

E_a — энергия активации, эВ;

k_B — коэффициент Больцмана, эВ/К;

T — температура роста, К.

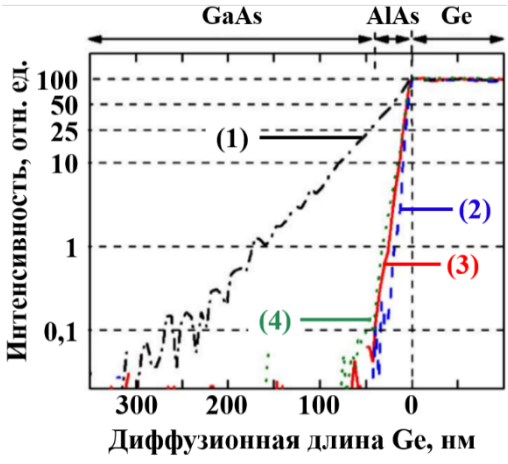
Из уравнения Аррениуса видно, что коэффициент диффузии экспоненциально зависит от температуры роста, и поэтому, вероятно, одним из наиболее эффективных способов борьбы с взаимной диффузией атомов является снижение температуры роста эпитаксиальных слоев.

Механизмы диффузии атомов Ge в GaAs и атомов As в Ge, а также эффективность снижения температуры роста на уменьшение глубины диффузии атомов исследовано в работе [123]. Экспериментальным путем установлено, что диффузионный профиль атомов Ge в GaAs является независимым от концентрации (концентрационно-независимая диффузия), и при использовании метода МОС-гидридной эпитаксии и пониженной температуры роста 530 °C длина диффузии атомов Ge из подложки Ge (001) с отклонением среза 6° в направлении <111> в эпитаксиальный слой GaAs составляет несколько десятков нанометров. Для диффузии атомов As наблюдается два механизма. Сначала происходит резкий спад концентрации до 10^{19} см$^{-3}$ с увеличением глубины по механизму концентрационно-независимой диффузии. При концентрации ниже 10^{19} см$^{-3}$ происходит концентрационно-зависимая диффузия и концентрация по мере углубления в подложку Ge спадает умеренно. Уменьшение температуры роста

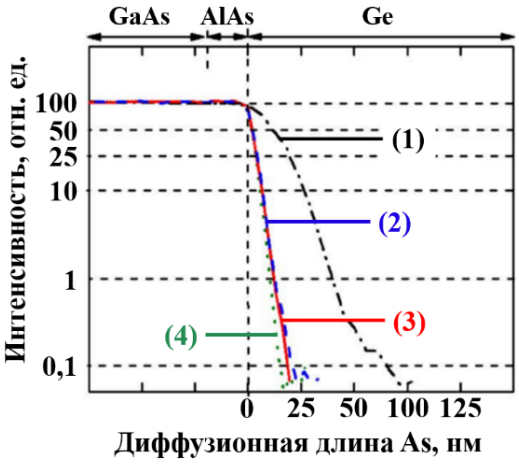
с 620 °С до 530 °С позволяет значительно уменьшить глубину диффузии атомов As в Ge с 500 до 110 нм, однако такая глубина еще достаточно велика. Что касается атомов Ga, то их коэффициент диффузии, а значит и глубина диффузии, меньше, чем у атомов As [27].

Авторы работы [124] продемонстрировали, что взаимная диффузия атомов может быть подавлена путем роста методом молекулярно-пучковой эпитаксии зародышевого слоя AlAs толщиной 30 нм в системе GaAs/AlAs/Ge (111) с отклонением среза 2° при температурах роста 480 °С или 540 °С. Однако наблюдалась диффузия атомов Al и Ge в слой GaAs для образцов, с температурой роста слоя AlAs >540 °С.

Более успешная ситуация описана в работе [125], в которой исследовались четыре образца GaAs/AlAs/Ge (001) с толщинами зародышевого слоя AlAs: 0; 9,5; 20; 29 нм. Подложки Ge (001) имели отклонение среза 6° в направлении <111>, а рост слоев III-V осуществлялся при температуре 650 °С методом МОС-гидридной эпитаксии. По результатам вторично-ионной масс-спектрометрии (ВИМС) (рисунок 9) видно, что при любой из использованных толщин зародышевого слоя AlAs наблюдаются достаточно резкие гетерограницы с Ge, то есть взаимная диффузия атомов Ge (рисунок 9 (а)), As (рисунок 9 (б)) и Ga успешно подавляется [125]. Данный эффект объясняется сильной энергией связи атомов Al-As [126]. Расхождения между результатами работ [125] и [124], авторы статьи [125] объясняют различными ориентациями подложки и углами отклонения среза. Так как для используемых толщин зародышевого слоя AlAs эффект подавления взаимной диффузии отличается незначительно, то оптимальной толщиной является 10 нм.



(а)



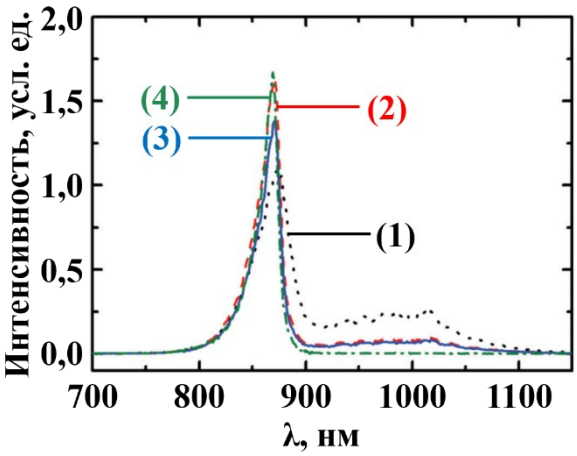
(б)

Зависимости для образцов с различной толщиной зародышевого слоя AlAs (d):

1 — d=0 нм; 2 — d=9,5 нм; 3 — d=20 нм; 4 — d=29 нм.

Рисунок 9 — Диффузионная длина атомов (а) Ge и (б) As для образцов с различной толщиной зародышевого слоя AlAs (d) (рисунок адаптирован из работы [125])

В работе [127], в частности, продемонстрировано, что эффективность подавления взаимной диффузии атомов зависит от доли Al в твердом растворе зародышевого слоя $Al_xGa_{1-x}As$ толщиной 10 нм в системе слоев GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$/Ge (001) с отклонением среза 6° в направлении <111>. Для установления характера такой зависимости авторы использовали метод спектроскопии фотолюминесценции (ФЛ), который более чувствителен к комплексам Ge в GaAs, чем метод вторично-ионной масс-спектрометрии. Комплексы Ge в GaAs имеют широкую полосу ФЛ от 900 до 1200 нм [127]. Авторы [127] сделали вывод, что диффузия атомов Ge при использовании $Al_xGa_{1-x}As$ с долей Al x=0,3 и x=0,6 значительно подавлена, однако для полного устранения диффузии атомов на гетерогранице с Ge требуется буферный слой с большей долей Al, например, x=1,0 (рисунок 10), что подтверждает гипотезу о влиянии сильной энергии связи Al-As на подавление взаимной диффузии атомов.



Зависимости для гетероструктур GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$/Ge со следующими значениями x:
1 — x=0; 2 — x=0,3; 3 — x=0,6; 4 — x=1,0.

Рисунок 10 — Фотолюминесценция при комнатной температуре гетероструктур GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$/Ge (рисунок адаптирован из работы [127])

Таким образом, для эффективного подавления взаимной диффузии атомов на гетерогранице GaAs/Ge (001) с отклонением среза 6° в направлении <111> целесообразно использовать зародышевый слой AlAs толщиной 10 нм. Однако для кремниевой технологии характерны подложки Si (001) с отклонением среза <0,5°. Для систем слоев GaAs/Ge/Si на точно ориентированных подложках Si (001) не найдено работ по исследованию взаимной диффузии атомов на гетерогранице III-V/Ge, что делает проведение таких исследований актуальным.

1.4 Трудности эпитаксии на подложках класса «кремний-на-изоляторе»

Все описанные выше фундаментальные проблемы существуют также и при интеграции полупроводников III-V эпитаксиальными методами с целым классом подложек «кремний-на-изоляторе» (КНИ), так как верхним приборным слоем таких подложек является кремний. При этом эпитаксиальный рост слоев III-V/Ge на подложках класса КНИ — нетривиальная задача, так как они обладают диэлектрической основой. В Si/Al_2O_3 (R-срез) («кремний-на-сапфире» — КНС) диэлектрической основой является объемная подложка Al_2O_3, а в $Si/SiO_2/Si$ (001) («кремний-на-изоляторе» — КНИ) скрытый слой SiO_2. Диэлектрическая основа затрудняет контроль температуры на поверхности подложки и может привести к изменению оптимальных температурных режимов роста относительно режимов роста на подложках Si, что более детально обсуждается далее. Подобного рода трудности отмечаются и при селективной гетероэпитаксии гетероструктур III-V на подложках кремния с заранее нанесенным оксидным шаблоном на поверхности [13].

Наличие дополнительных интерфейсов в подложках КНИ (два интерфейса Si/SiO_2) и КНС (интерфейс Si/Al_2O_3) по сравнению с объемной подложкой Si может внести существенные ошибки в измерения температуры оптическими методами (например, пирометрами) из-за интерференционных эффектов [128].

Скрытый слой SiO_2 в подложке КНИ является не только электроизолирующим, но также теплоизолирующим. В подложках КНИ, используемых в настоящей работе, скрытый слой SiO_2 и приборный слой Si имеют толщины ≈200 нм. Отмечается, что процесс переноса тепла в малоразмерных объектах, например, в слоях с толщинами не более 10 мкм отличается от переноса тепла в объемных материалах того же химического состава [129]. Поэтому для малоразмерных объектов вводят понятие эффективной теплопроводности, которая зависит от их размеров. При этом, так как для малоразмерных объектов тепловые свойства анизотропны, то выделяют поперечную (поперек поверхности слоя) и продольную (вдоль поверхности слоя) эффективную теплопроводность [129]. Значения поперечной эффективной теплопроводности для пленок SiO_2 с толщинами от 10^{-2} до 1 мкм составляют от $4\cdot10^{-3}$ Вт/(м·К) до 0,5 Вт/(м·К) при температуре 373 К [130]. При повышении температуры значение поперечной эффективной теплопроводности уменьшается [130] и, следовательно, при температуре эпитаксии данное значение может быть в разы меньше. Что касается приборного слоя кремния в КНИ, то его значение продольной эффективной теплопроводности при комнатной температуре для толщины ≈200 нм меньше значения теплопроводности для объемного кремния примерно в 1,8 раз и составляет 79 Вт/(м·К) [131]. Следовательно, во-первых, эффективная теплопроводность

приборного слоя Si на порядки больше эффективной теплопроводности скрытого слоя SiO_2 в подложке КНИ, а, во-вторых, эффективная теплопроводность приборного слоя кремния отличается от теплопроводности объемного кремния. Эти факты указывают на то, что во время отжига подложки и эпитаксии полупроводников поперек КНИ будет образовываться температурный градиент, что усложнит контроль температуры на поверхности, а также изменит температуру роста относительно температуры роста на подложке Si при одинаковой мощности нагревательного элемента.

Известно, что Si активно окисляется на воздухе. Для очистки поверхности от окисла и других загрязнений проводят отжиг подложки и рост буферного слоя Si в ростовой камере. Поскольку температура отжига подложки Si, которая составляет 1200 °C, способствует устранению оксида кремния (SiO_2) с поверхности, то она отрицательным образом будет сказываться на гетероструктуре КНИ из-за наличия в ней скрытого слоя SiO_2. Следовательно, температуру отжига подложки КНИ необходимо корректировать относительно температуры отжига подложки кремния для сохранения качественных интерфейсов и свойств приборного слоя Si.

Что касается подложки КНС, так как сапфир является прозрачным материалом в широком спектральном диапазоне от 0,3 до 7,0 мкм, то ее нагрев путем поглощения излучения от нагревателя усложняется, особенно в вакууме, так как количество частиц, которые могли бы в реакторе переносить тепло от нагревательного элемента к подложке минимально. Например, эта проблема является сложной задачей для высоковакуумного метода роста молекулярно-пучковой эпитаксии, в котором типичным путем нагрева подложки является поглощение подложкой излучения от нагревателя. Одним из способов решения этой задачи является напыление металла на заднюю часть подложки. В таком случае металл будет поглощать тепловое излучение от нагревателя, а подложка будет нагреваться с помощью механизма теплопроводности. Либо использовать разновидности метода газофазной эпитаксии (ГФЭ), для которых этот эффект не так критичен.

Более того ростовые установки могут отличаться друг от друга даже при использовании одного и того же метода роста разными нагревательными системами, системами контроля температуры подложки, источниками веществ, конструктивными решениями. Поэтому оптимизация температурных режимов роста для определенного типа подложек класса КНИ и для конкретной установки должна быть проведена индивидуально.

Например, для метода молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ), реализуемого на установке Riber SIVA-21 в ИФМ РАН, установлено, что температура подложки КНИ выше на ≈45 °C, чем температура подложки Si при температурах роста 600 °C и с уменьшением температуры разница уменьшается вплоть до значений погрешности измерения при температуре

≈300 °C [33]. Предполагается, что такой эффект вызван дополнительным поглощением излучения в среднем инфракрасном диапазоне от нагревателя скрытым слоем SiO_2. Проблема решена путем применения метода низкокогерентной тандемной интерферометрии, позволяющей с высокой точностью (±1 °C) измерять температуру поверхности подложки КНИ в процессе роста методом МПЭ на установке Riber SIVA-21 [33].

1.5 Критерии платформы для эпитаксии гетероструктур $A^{III}B^{V}$

Поскольку в перспективе создание высокого кристаллического качества светоизлучающих в окне прозрачности объемного Si гетероструктур III-V на платформе, которая будет создана в диссертации, то в качестве критериев к платформе будут выступать требуемые для решения данной задачи значения плотности прорастающих дислокаций, а также среднеквадратичной шероховатости поверхности.

В кремниевых оптических межсоединениях необходима длина волны излучения больше 1100 нм — область прозрачности объемного Si. Для достижения данной цели в гетероструктурах III-V/Ge/Si (001), в которых в качестве активной области III-V выступает система полупроводников In(Ga,Al)As/GaAs, рассматривают два варианта активной области. Один из них — использование квантовых точек (КТ) InAs/GaAs [79, 80]. Другой — использование квантовых ям (КЯ) $In_xGa_{1-x}As$/GaAs с высоким содержанием In ($x \approx 0,4$) и компенсирующими слоями GaAsP [132]. Считается, что КЯ имеют преимущество перед КТ из-за возможности генерации монохроматического излучения. Однако для гетероструктур $In_xGa_{1-x}As$/GaAs с высоким содержанием In ($x > 0,14$) происходит изменение режима роста, которое ухудшает качество слоев, например, возникает модуляция толщины и 3D рост [91]. Эти эффекты приводят к тому, что ширина на полувысоте (FWHM) спектра излучения фотолюминесценции (ФЛ) от квантовых ям увеличивается, например, до 40 нм даже на подложке GaAs [132]. В свою очередь характерное значение FWHM пика на спектре фотолюминесценции от КТ составляет ≈43 нм [79], что на одном уровне с FWHM пика ФЛ от КЯ. Следовательно, преимущество квантовых ям по сравнению с квантовыми точками, связанное с монохроматическим излучением, нивелируется для случаев использования КЯ с высоким содержанием In ($x \approx 0,4$).

Авторы статьи [79] продемонстрировали работу лазерных гетероструктур III-V, эпитаксиально выращенных на подложках Si, с активной областью на основе КТ InAs/GaAs и КЯ InGaAs/GaAs. При этом в обеих гетероструктурах использовалась одна и та же технология уменьшения плотности дефектов в слоях III-V. Лазер на основе гетероструктуры с КТ работал при комнатной температуре с пороговой плотностью тока 173 А/см^2 при непрерывном режиме работы. Однако для лазера на основе гетероструктуры с КЯ (в случае толщины меньше равновесной критической) не удавалось зарегистрировать свечения, даже при импульсном режиме работы вплоть до значений плотности порогового тока 2 кА/см^2.

Успех лазерной гетероструктуры с активной областью на основе квантовых точек по сравнению с лазерной гетероструктурой с активной областью на основе квантовых ям определяется фундаментальными особенностями КТ, которые рассмотрены в статье [6]. Эти

особенности при использовании КТ в активной области приводят к уменьшению порогового тока, повышению рабочей температуры, срока службы и улучшению других характеристик полупроводникового лазера [6].

Таким образом, перспективным подходом для смещения длины волны излучения лазерных гетероструктур III-V на кремниевых подложках в область прозрачности Si является использование КТ InAs. Согласно статье [79] для эффективной работы лазерной гетероструктуры III-V на основе КТ достаточно достигнуть значения плотности прорастающих дислокаций (ППД) $\sim 10^7$ см$^{-2}$ по причине, отмеченной в разделе 1.1.2.4. Следовательно, ППД $\sim 10^7$ см$^{-2}$ является первым критерием для платформы.

В работе [79] использовалась платформа GaAs/Si, созданная с помощью двухстадийного роста GaAs после сложной подготовки поверхности подложки Si, а значит среднеквадратичная шероховатость поверхности (RMS) платформы GaAs/Si ≈0,8 нм [21]. В связи с этим, вторым критерием для создаваемой в диссертации платформы является значение RMS <1 нм.

1.6 Выводы к главе 1

На сегодняшний день тема интеграции светоизлучающих гетероструктур $A^{III}B^{V}$ с подложками Si (001) исследуется с разных сторон большим количеством научных коллективов. Многие научные коллективы при решении задачи формирования светоизлучающей гетероструктуры $A^{III}B^{V}$ на Si исходят из того, что промышленно-ориентированным методом интеграции полупроводников $A^{III}B^{V}$ с Si является эпитаксиальный рост через буферные слои, в том числе и промежуточный между слоями GaAs и Si слой Ge. Не исключением является и научный коллектив, в который входит соискатель.

Однако при проведении литературного обзора не найдено работ по интеграции светоизлучающих гетероструктур $A^{III}B^{V}$ со значимыми для технологии кремниевой наноэлектроники подложками класса «кремний-на-изоляторе» (КНИ) методами эпитаксиального осаждения через буферные слои $A^{III}B^{V}$/Ge/Si.

Сложность состоит не только в фундаментальных проблемах гетероэпитаксии $A^{III}B^{V}$ на поверхности Si, но и в оптимизации температурных режимов роста на подложках класса «кремний-на-изоляторе» из-за наличия в них диэлектрической основы. Следовательно, актуальным направлением исследований является оптимизация технологии создания платформы Ge/Si/КНИ для эпитаксии светоизлучающих гетероструктур $A^{III}B^{V}$.

На основе обзора литературы также установлены актуальные направления исследований, достижение успехов в которых позволит приблизиться к требуемому уровню кристаллического качества гетероструктур $A^{III}B^{V}$, выращиваемых на платформе Ge/Si/КНИ.

1. Оптимизация параметров МОС-гидридной эпитаксии буферных слоев $A^{III}B^{V}$ на платформе Ge/Si/КНИ для аннигиляции антифазных границ представляется актуальной. Аннигиляция антифазных границ происходит за счет заращивания антифазных доменов. Отношение скоростей роста доменов разной фазы определяется параметрами роста: отношением потоков V/III, температурой роста и скоростью роста $A^{III}B^{V}$.

2. Исследование процессов движения антифазных границ в объеме и на поверхности гетероструктуры $A^{III}B^{V}$/Ge/Si/КНИ, а также исследование модификации поверхности, происходящие во время отжига, имеют значительный прикладной интерес.

3. Использование системы зародышевых слоев $Al_{0,3}Ga_{0,7}As/GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ представляется эффективным подходом для уменьшения плотности антифазных границ. Эффективность такой системы слоев в подавлении взаимной диффузии атомов и в уменьшении плотности прорастающих дислокаций в гетероструктурах $A^{III}B^{V}$/Ge на точно ориентированных подложках с кристаллографической ориентацией (001) предстоит выяснить.

ГЛАВА 2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

В диссертации использовались отечественные подложки класса КНИ: «кремний-на-сапфире» (КНС, сапфир R-среза $(01\bar{1}2)$, приборный слой Si ориентации (001)), изготовленные по технологии газофазной эпитаксии [133], и одноименные «кремний-на-изоляторе» (КНИ, приборный слой Si ориентации (001)), изготовленные по технологии Smart Cut [134]. Схемы поперечного среза подложек представлены на рисунке 11.

(а) (б)

Рисунок 11 — Схемы поперечного среза подложек класса «кремний-на-изоляторе»: (а) «кремний-на-сафире», (б) одноименная «кремний-на-изоляторе»

Для роста слоев Ge/Si применялось оборудование НИФТИ ННГУ (Вакуумная установка) (раздел 2.1.1) и ИФМ РАН (Riber Siva 21) (раздел 2.1.2), для роста слоев III-V (раздел 2.1.3) — обрудование НИФТИ ННГУ (AIXTRON AIX 200RF) и ООО МеЛСиТек (AIXTRON CCS), для изготовления светоизлучающих p-i-n диодов — оборудование НИФТИ ННГУ (раздел 2.2), для исследования образцов — оборудование НОЦ «Физика твердотельных наноструктур» ННГУ (НОЦ «ФТН»), ООО МеЛСиТек и НИФТИ ННГУ (раздел 2.3).

Основной метод измерений образцов — просвечивающая электронная микроскопия на установке JEOL JEM-2100F (200 кВ) (НОЦ «ФТН»).

2.1 Методы эпитаксии слоев $A^{III}B^{V}$/Ge/Si

2.1.1 Метод газофазного осаждения с разложением моногермана на «горячей проволоке» для эпитаксии слоя Ge

Эпитаксия слоя Ge на подложках Si, КНИ и КНС через буферный слой Si методом осаждения с разложением моногермана на «горячей проволоке» (HWCVD) осуществлялась в НИФТИ ННГУ н.с. С.А. Денисовым и м.н.с. В.Ю. Чалковым. Детальное описание ростовой установки представлено в следующих работах [135, 136]. Стоит отметить, что нагрев подложки осуществляется за счет радиационного излучения от нагревателя, которым служит резистивно-разогреваемый молибденовый меандр, установленный примерно на 10 мм выше обратной стороны подложки. Температура подложки до 800 °C контролируется по калибровочной кривой, которая представляет собой зависимость температуры на термопаре от электрического тока, протекающего через нагревательный элемент. Температура выше 800 °C контролируется с помощью оптического пирометра ОПИР-017.

Стандартная методика эпитаксии слоя Ge на подложке Si через буферный слой Si методом HWCVD представлена в работе [136]. Химически очищенную подложку для удаления окисла подвергают высокотемпературному отжигу в камере роста при температуре 1200 °C в течение 10 мин. Затем после снижения температуры подложки до 1000 °C проводят осаждение буферного слоя Si из сублимационного источника. После этого для выращивания слоя Ge со скоростью роста ≈0,1 нм/с температуру подложки снижают до 350 °C, нагревают танталовую пластину до 1400 °C и в камеру роста напускают герман (GeH_4) до давления $4\cdot10^{-4}$ Торр, которое поддерживают постоянным в процессе роста слоя с помощью системы напуска газа.

Физический механизм роста Ge методом HWCVD детально изложен в описании изобретения к патенту [135]. Основная особенность физического механизма — в преобладании разложения (пиролиза) германа вблизи более нагретой танталовой пластины над аналогичным процессом вблизи менее нагретой подложки, в связи с чем отпадает необходимость поддерживания общепринятой температуры нагрева подложки на уровне 600 °C. При этом при более низкой температуре нагрева подложки 350 °C атомарный водород, образующийся при разложении германа вблизи подложки, не улетучивается с ее рабочей поверхности, а покрывает последнюю и предотвращает поверхностную сегрегацию атомов германия на поверхности роста [137], обеспечивая насыщение оборванных связей поверхностных атомов и способствуя при

замене поверхностных атомов водорода прибывающими атомами германия однородному распределению германия по толщине слоя без формирования островков.

Метод HWCVD имеет важные для промышленного производства преимущества по сравнению с методом молекулярно-пучковой эпитаксии: отсутствие дорогостоящего оборудования, создающего и поддерживающего высокий вакуум, возможность адаптировать методику роста на подложки диаметром 150 мм и более, низкая температура роста 350 °C, высокая скорость роста при сохранении качества слоя Ge — 0,2 нм/с [138].

2.1.2 Метод молекулярно-пучковой эпитаксии для осаждения слоя Ge

Эпитаксия слоев Ge/Si методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) проводилась в ИФМ РАН на установке Riber Siva 21 с.н.с. ИФМ РАН Д.В. Юрасовым. Общее описание высоковакуумной установки Riber Siva 21 представлено в практикуме [139] и статье [33]. Отметим, что для испарения Si и Ge камера роста установки МПЭ Riber Siva 21 оборудована двумя электронно-лучевыми испарителями, нагрев подложки осуществляется за счет радиационного излучения от печи, нагревательным элементом которой служит резистивно-разогреваемый танталовый меандр, установленный на ≈1,5 мм выше обратной стороны подложки. Максимальная температура нагрева подложек составляет ≈1100 °C [139]. Контроль и управление нагревом подложки осуществляется с помощью термопары W-Re, установленной рядом с печью. В дополнение к термопаре используется специализированный инфракрасный пирометр IMPAC IS 12 (рабочий диапазон длин волн от 0,7 до 1,1 мкм). Минимальное значение температуры, которое может быть надежно измерено этим прибором, составляет ≈450 °C для подложек Si (001). Кроме этого установка Riber Siva 21 в ИФМ РАН модифицирована для работы с системой низкокогерентной тандемной интерферометрии, которая позволяет измерять температуру в достаточно широком диапазоне вплоть до комнатной [140, 141].

Поверхность растущих слоев в установке Riber Siva 21 может контролироваться непосредственно в процессе роста (in-situ) с помощью дифракции отраженных быстрых электронов [142]. Для этого внутри камеры роста установлен дифрактометр [139].

На установке Riber Siva 21 для молекулярно-пучковой эпитаксии в ИФМ РАН оптимизированы режимы роста и отжига релаксированных слоев Ge на подложке Si (001) через буферный слой кремния [115]. Описание методики роста представлено в работе [115]. Для формирования релаксированных слоев используется метод двухстадийного роста. На протяжении всего роста слоя Ge поддерживается относительно высокая скорость роста для

метода МПЭ на уровне ≈0,1 нм/с. Первым этапом двухстадийного роста Ge на подложке Si (001) после ее химической и термической очистки, роста 100 нм буфера Si является осаждение тонкого «низкотемпературного» слоя Ge (LT-Ge) при температуре ≈300 °C. Низкие температуры роста обеспечивают подавление формирования трехмерных островков Ge и релаксацию упругих напряжений через формирование дислокаций. В данной методике [115] толщина слоя LT-Ge составляет 50 нм. В результате роста LT-Ge, формируется слой Ge без трехмерных островков, с большой плотностью прорастающих дислокаций (от 10^{10} до 10^{11} см$^{-2}$) и высокой шероховатостью поверхности [115]. Вторым этапом в методе двухстадийного роста слоев Ge/Si (001) является формирование основной части слоя Ge при высокой температуре (HT — high temperature). Высокие температуры роста способствуют улучшению кристаллического качества структур (снижаются среднеквадратичная шероховатость поверхности (RMS) и плотность прорастающих дислокаций (ППД)). В данной методике [115] после формирования слоя LT-Ge температура роста поднимается до T=600 °C, и основная часть слоя Ge толщиной ≈1000 нм осаждается при данной температуре. В результате роста HT-Ge, формируется слой Ge с ППД=$3\cdot10^{8}$ см$^{-2}$ и RMS≈0,6 нм [115]. Для уменьшения ППД до уровня 10^{7} см$^{-2}$ и поддержания RMS<1 нм в методике [115] используется постростовой отжиг гетероструктуры Ge/Si.

Кроме этого научная группа, работающая на установке Riber SIVA-21 в ИФМ РАН, продемонстрировала оптимизацию температурных режимов роста Ge на подложках КНИ путем применения метода низкокогерентной тандемной интерферометрии [33].

Метод молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) считается более дорогостоящим, чем метод газофазной эпитаксии (ГФЭ) ввиду того, что требует наличия оборудования для поддержания сверхвысокого вакуума. К недостаткам МПЭ по сравнению с ГФЭ можно отнести низкую скорость роста и возможность получения равномерных по толщине слоев на ограниченной площади подложки. Тем не менее у молекулярно-пучковой эпитаксии есть и преимущества. Скорость роста не зависит от температуры роста, так как для каждого элемента предусмотрен отдельный источник. Данный факт предоставляет большую свободу выбора условий роста методом МПЭ. Для роста используются относительно низкие температуры, например, по сравнению с методом ГФЭ. Возможность резкого прерывания и последующего возобновления процесса напыления (с помощью специальных заслонок) позволяет выращивать многослойные гетероструктуры строго контролируемой толщины с моноатомно гладкими границами и с заданным профилем легирования. В установках для молекулярно-пучковой эпитаксии имеется возможность исследовать кристаллическое качество слоев in-situ, то есть непосредственно в процессе роста [143].

Таким образом, высокая стоимость оборудования и малая производительность существенно ограничивают возможность применения молекулярно-пучковой эпитаксии в

промышленности. Однако благодаря своим преимуществам при решении некоторых задач с помощью МПЭ можно достигнуть лучших результатов.

2.1.3 Метод МОС-гидридной эпитаксии для осаждения слоев $A^{III}B^{V}$

Рост слоев III-V методом газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений (МОС-гидридная эпитаксия, МОСГЭ) проводился в НИФТИ ННГУ на установке AIX 200RF (Aixtron, Германия) и в компании ООО МеЛСиТек на установке CCS (Aixtron, Германия). В этом разделе будет приведено краткое описание оборудования для метода МОСГЭ, его особенности и характерные параметры роста слоев (InAl)GaAs на подложке GaAs.

2.1.3.1 Оборудование для МОС-гидридной эпитаксии

Типичная блок-схема установок для МОС-гидридной эпитаксии (МОСГЭ) представлена на рисунке 12. Установка состоит из газораспределительной системы (ГРС), реактора с системой нагрева (Р), вакуумной системы (ВС) и системы электронного управления (СУ). В газораспределительной системе осуществляется подготовка потоков исходных компонентов, которые затем подаются в реактор, где при заданных температуре и давлении происходит осаждение эпитаксиальных слоев. Вакуумная система обеспечивает прохождение парогазовой смеси через реактор и поддержание давления в реакторе на требуемом уровне, а система электронного управления ответственна за контроль и программируемое изменение параметров исполнительных элементов установки МОСГЭ в целом [118].

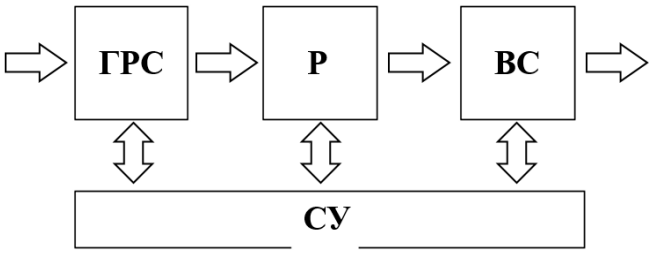


Рисунок 12 — Типичная блок-схема установки МОС-гидридной эпитаксии (рисунок адаптирован из работы [118])

Примечание — ГРС — газораспределительная схема; Р — реактор; ВС — вакуумная система; СУ — система управления.

Система AIX 200RF

Реактор системы AIX 200RF горизонтального типа [144]. Он представляет собой кварцевую трубу прямоугольного сечения, в которую помещен графитовый подложкодержатель. Подложкодержатель (П) состоит из двух частей: подвижной и стационарной. Подвижная часть представляет собой графитовый диск (Д) диаметром 60 мм, вращающийся вокруг своей оси с подложкой диаметром 51 мм (2 дюйма) (рисунок 13).

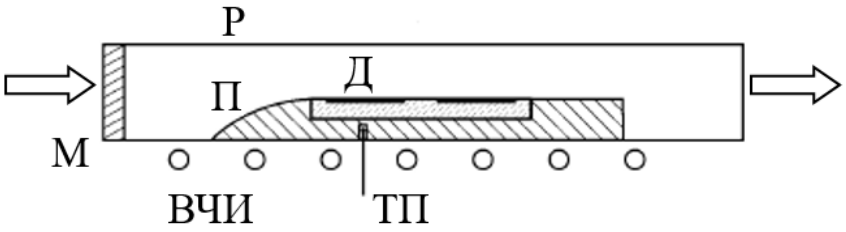


Рисунок 13 — Типичная схема реактора горизонтального типа МОС-гидридной эпитаксии (рисунок адаптирован из работы [118])

Примечание — М — мембрана из пористой стали; Р — кварцевый реактор; ВЧИ — высоко частотные индукторы; П — стационарный графитовый подложкодержатель; Д — вращающийся графитовый диск; ТП — термопара.

Нагрев осуществляется при помощи высокочастотных индукторов (ВЧИ). Индукторы обвиты вокруг реактора. Температура измеряется при помощи хромель-алюмелевой термопары (ТП) и поддерживается автоматически при помощи регулятора температуры. Давление в реакторе измеряется электронным манометром и поддерживается на заданном уровне при помощи регулирующего клапана. Вакуумная система установки позволяет проводить выращивание эпитаксиальных слоев при пониженном давлении в диапазоне от 40 до 200 мбар. Откачка системы производится форвакуумным насосом.

В качестве газа-носителя используется водород, очищенный через палладиевый фильтр и имеющий на выходе точку росы не выше минус 100 °С. В качестве источников веществ — триметилгаллий (TMGa), триметилалюминий (TMAl), триметилиндий (TMIn), арсин (AsH_3). Для легирования донорной примесью Si используется 1%-ный раствор силана (SiH_4) в высокочистом водороде. Гидридные газы дополнительно подвергаются двухступенчатой очистке. На первой ступени газы очищаются пропусканием через цеолитовый фильтр, где происходит предварительная очистка. На второй стадии газы пропускаются через суперочиститель на щелочных металлах [144].

Система CCS

У системы CCS существуют следующие основные отличительные особенности. Реактор такой системы вертикального типа, типичная схема которого представлена на рисунке 14. Реактор вертикального типа имеет душевую насадку с входными отверстиями, расположенными очень близко к подложке. Реакционные газы впрыскиваются вертикально из множества маленьких отверстий в направлении подложки. Душевая насадка равномерно распределяет реакционные газы по подложке. Благодаря использованию тесного пространства между лейкой и подложкой можно подавить вращательную конвекцию, а также уменьшить время пребывания газа, который в результате эффективно используется [145].

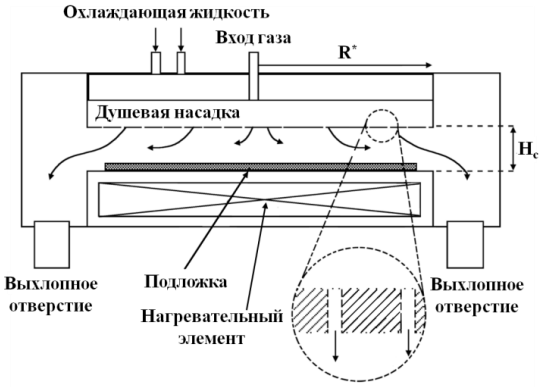


Рисунок 14 — Типичная схема реактора вертикального типа МОС-гидридной эпитаксии (рисунок адаптирован из работы [145])

Примечание — H_c — зазор между душевой насадкой и пьедесталом, на котором расположена подложка; R^* — радиус ростовой камеры.

Нагрев подложки происходит путем теплопроводности за счет контакта с пьедесталом, который в свою очередь нагревается за счет поглощения теплового излучения от резистивно-разогреваемого графитого меандра. Кроме термопары для in-situ измерения температуры используются модули EpiCurveTT от компании LayTec и многоканальный пирометр Argus, который позволяет измерять температуру в отдельных точках на поверхности пьедестала. Оба модуля имеют возможность коррекции изменений излучательной способности для определения истинной температуры поверхности. Принцип измерения температуры с помощью подобных модулей описан в работе [146].

Модуль EpiCurveTT обладает дополнительными опциями, которые позволяют проводить оптическими методами in-situ измерения отражательной способности [146] и кривизны поверхности гетероструктуры [147].

В качестве газа-носителя используется очищенный водород, источников веществ — аналогичные МОС и гидриды, как в системе AIX 200RF. Для легирования донорной примесью

Si используется 2%-ный раствор силана (SiH_4) в высокочистом водороде, акцепторной примесью — высокочистый CBr_4.

2.1.3.2 Особенности метода МОС-гидридной эпитаксии

Метод МОС-гидридной эпитаксии (МОСГЭ) является разновидностью газофазной эпитаксии, поэтому имеет его достоинства: обеспечивается равномерный по толщине слой на подложках больших размеров с достаточно большой скоростью роста, не требуется оборудование, поддерживающее высокий вакуум. Кроме достоинств метода газофазной эпитаксии метод МОСГЭ имеет ряд особенностей. МОС-гидридная эпитаксия является гибкой технологией, позволяющей получать гетероструктуры из слоев различных материалов в одном процессе. При этом гетероструктуры при отработанной методики роста получаются приборного качества с резкими границами, высокой однородностью состава, легирования по площади, хорошей воспроизводимостью параметров при серийном производстве, то есть высоким уровнем выхода годных.

Оптимальные диапазоны параметров процесса МОС-гидридной эпитаксии для роста гетероструктур на основе слоев (InAl)GaAs на подложках GaAs представлены в таблице 2 [118]. Указанные величины зависят от состава эпитаксиального слоя, уровня его легирования, параметров окружающих слоев. При подборе параметров роста методом МОСГЭ на подложках Si или подложках класса КНИ логично опираться на оптимальные значения для роста аналогичных эпитаксиальных слоев на подложках GaAs (таблица 2).

Таблица 2 — Значения основных параметров процесса роста методом МОС-гидридной эпитаксии гетероструктур на основе слоев (InAl)GaAs на подложке GaAs. ЭС — эпитаксиальный слой. Таблица адаптирована из работы [118]

Тип ЭС	Параметр			
	Температура роста, °C	Давление в реакторе, мбар	Отношение V/III	Скорость роста, нм/с
GaAs	630–650	60–100	50–100	0,67–1,33
AlGaAs	700–770	60–100	100–250	0,50–1,00
InGaAs	700–750	60–100	80–150	0,50–1,00

2.2 Технология изготовления светоизлучающих p-i-n диодов

Технологический процесс изготовления светоизлучающих p-i-n диодов представлен на рисунке 15. На первом этапе (а) после обезжиривания поверхности гетероструктуры проведено вакуумное напыление металлов методом электронно-лучевого испарения (сначала Ti, а потом Au (Au/Ti) с общей прозрачной для выходного излучения толщиной 15 нм) для создания омического контакта к слою p+GaAs (сильнолегированный слой p-GaAs). Далее проведены операции по созданию меза-структуры на поверхности в следующей последовательности: фотолитография мез диаметром 460 мкм, жидкостное химическое травление пленок металлов и снятие фоторезиста. На втором этапе (б) после очистки поверхности в ацетоне проведена вторая фотолитография для создания мез диаметром 500 мкм. После чего проводилось жидкостное химическое травление гетероструктуры до n+GaAs и снятие фоторезиста. На третьем этапе (в) вжигалось олово искровым разрядом для создания контакта к n+GaAs.

Послойная спецификация светоизлучающих гетероструктур представлена в разделе 4.1.1. Измеренные значения толщины слоев гетероструктуры и состава квантовых ям представлены в разделе 4.1.2. Измеренные значения концентрации носителей заряда сильнолегированных слоев n+GaAs и p+GaAs представлены в приложении А.

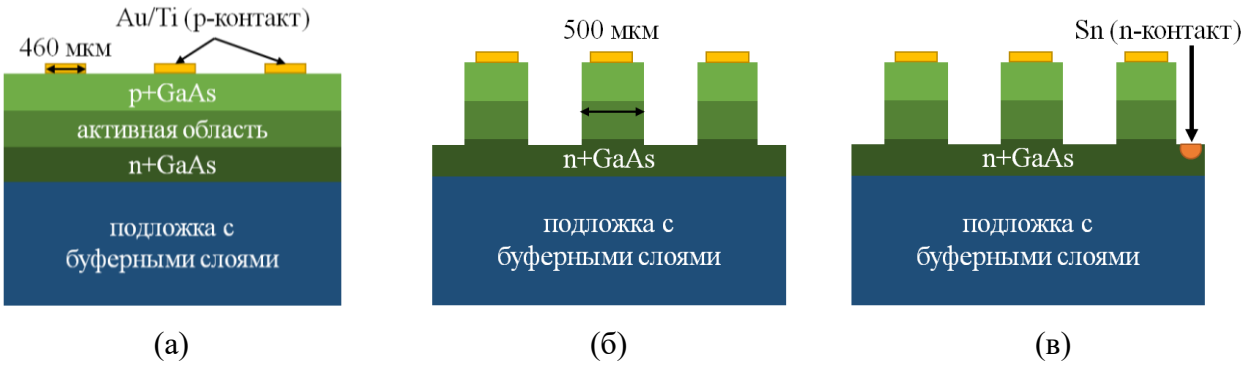


Рисунок 15 — Этапы изготовления светоизлучающего p-i-n диода

Примечание — p+GaAs, n+GaAs — Сильнолегированные слои GaAs p- и n-типа соответственно.

2.3 Методы измерений

В диссертации применялись методы как in-, так и ex-situ измерений (подразумевается после и во время роста соответственно). Как отмечено ранее, кроме контроля температуры роста методы in-situ измерений применялись для контроля кристаллического качества слоев Ge/Si в процессе роста методом молекулярно-пучковой эпитаксии; для измерения кривизны, для качественной оценки шероховатости поверхности растущего слоя (фронт роста) и для контроля качества интерфейсов в процессе роста методом МОС-гидридной эпитаксии в системе CCS (см. раздел 2.3.1). Методы ex-situ измерений использовались для исследования структурных, оптических, электрофизических свойств, а также для исследования морфологии поверхности и проведения элементного анализа (см. раздел 2.3.2).

2.3.1 Методы in-situ измерений

Контроль кристаллического качества слоев Ge/Si в процессе роста методом молекулярно-пучковой эпитаксии в установке Riber Siva 21 происходил методом дифракции отраженных быстрых электронов [142].

Измерения кривизны и отражательной способности гетероструктуры в процессе роста методом МОС-гидридной эпитаксии в системе CCS осуществлялись с помощью модуля EpiCurveTT от компании LayTec.

Принцип работы системы измерения кривизны подобен тому, что описан в статье [147]. Два параллельных пучка света проходят почти перпендикулярно образцу через окно в реакторе. Отраженные лучи расходятся или сходятся при отражении от выпуклой или вогнутой поверхности образца соответственно и попадают на камеру, где измеряется расстояние между двумя лучами, которое зависит от кривизны пластины.

Во время измерения отражательной способности пучок света попадает на образец перпендикулярно через окно в реакторе, отражается и, проходя через систему зеркал, поступает в детектор, где измеряется его интенсивность [146]. В зависимости от системы материалов могут происходить разные эффекты. Изменение значения отражательной способности r, то есть интенсивности пучка света, отраженного от образца, во время эпитаксии, считая, что анализируемые слои являются однородными, изотропными и бесконечными в плоскости относительно размера пучка света связаны с изменением температуры роста, скорости роста,

химического состава, качества интерфейса, кривизны и шероховатости поверхности фронта роста [148]. Среди доступных нам длин волн излучений (405; 633; 949 нм), излучение на 405 нм является наиболее чувствительным к шероховатости поверхности. При его использовании и условии, что температура роста, а также кривизна поверхности (C) являются практически неизменными, по изменению значения r или центрального значения осцилляций r (r_∞) можно судить об изменении шероховатости фронта роста.

В диссертации также применялось излучение на длину волны 950 нм для коррекции излучательной способности. Благодаря этой информации определяется истинная температура поверхности.

2.3.2 Методы ex-situ измерений

2.3.2.1 Методы исследования морфологии поверхности

Исследование морфологии поверхности проводилось методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) на SolverPro АСМ в полуконтактном режиме с использованием зондов HA NC (НТ-МДТ, г. Зеленоград, Россия) в полях 7 на 7 мкм и 50 на 50 мкм, а также на 3D-оптической метрологической системе Leica DCM8 с применением режима интерференционной микроскопии с фазовым сдвигом (PSI — phase-shifting interferometry) в поле 351 на 264 мкм. Измерения обоими методами проходили в атмосфере.

Латеральное разрешение в методе АСМ в поле 7 на 7 мкм определяется формой зонда и составляет 50 нм, а в поле 50 на 50 мкм ограничено размером пикселя на АСМ-скане и составляет 125 нм. Высота объектов на сканах, полученных с помощью указанного атомно-силового микроскопа (АСМ-скан), определяется с точностью 0,05 нм. Среднеквадратичная шероховатость поверхности (RMS) образцов рассчитывалась по АСМ-сканам с использованием программного обеспечения (ПО) Gwyddion. Линейная плотность антифазных границ (АФГ), рассчитывалась по АСМ-сканам с использованием ПО Gatan Digital Micrograph как длина АФГ, деленная на площадь изображения (плотность АФГ). Доля площади антифазных доменов, рассчитывалась в ПО Gwyddion с использованием инструментов «Редактор масок» и «Статистические величины».

Leica DCM8 в режиме PSI имеет латеральное разрешение — 250 нм, ограниченное размером пикселя на изображении площадью 351 на 264 мкм (PSI-изображение). Цифровая обработка PSI-изображений проводилась в ПО Leica Map — применялось вычитание полиномиальной плоскости пятой степени и рассчитывалась RMS. Расчет RMS по пяти PSI-

изображениям, полученным в разных областях поверхности подложки Si (RMS=0,07 нм по АСМ-сканам) дает значение (0,8±0,1) нм, что является системным шумом и минимально возможным значением RMS, которое можно зарегистрировать на установке Leica DCM8 при использовании описанной выше обработки изображения.

Для визуализации поверхности светоизлучающих p-i-n диодов с меза-структурой, измерения кривизны поверхности образцов применялся режим конфокальной микроскопии, для 3D визуализации применялся метод интерференционной микроскопии с вертикальным сканированием (VSI — vertical scanning interferometry) на системе Leica DCM8.

2.3.2.2 Методы исследования структурных свойств

Структурные свойства образцов оценивались с помощью дифрактометра Panalytical X'Pert^3 MRD (рентгеновское излучение — линия Cu Kα_1) (метод рентгеновской дифрактометрии (РД)), просвечивающего электронного микроскопа JEOL JEM-2100F с ускоряющим напряжением 200 кВ (различные методы просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ)), а также с помощью подсчета «ямок» травления от прорастающих дислокаций (EPD — etch pit density (плотность «ямок» травления от дефектов)).

Дифрактометр Panalytical X'Pert^3 MRD с возможностью использования кристалла-анализатора 3-bounce Ge (220) перед детектором оснащен монохроматором 4-bounce Ge (400).

Микроскоп JEOL JEM-2100F в режиме ПЭМ обеспечивает пространственное разрешение: точка — 0,19 нм, решетка — 0,1 нм; в режиме сканирующей ПЭМ (СПЭМ): решетка — 0,2 нм. Первичная обработка изображений, полученных на микроскопе (ПЭМ-изображение) JEOL JEM-2100F осуществлялась с помощью программного обеспечения (ПО) Gatan Digital Micrograph. Профилирование Z-контраста производилось с помощью ПО SPMLab, Gwyddion и математического программного пакета Origin по методике, описанной в [149]. Для картирования деформаций на наноуровне на ПЭМ-изображениях высокого разрешения (ВРПЭМ-изображение) использовался метод анализа геометрической фазы (МГФ) в ПО Gatan Digital Micrograph [150, 151]. Значение линейной плотности прорастающих дислокаций (линейная ППД) рассчитывалось на совмещенных друг с другом изображениях, полученных методом СПЭМ (СПЭМ-изображение). С помощью СПЭМ можно исследовать достаточно большие области поперечного среза образцов, спрепарированного по описанной ниже методике за счет того, что в СПЭМ не используются линзы для формирования изображения. Следовательно, на СПЭМ-изображения не

влияют артефакты этих линз [152]. Благодаря этим преимуществам с помощью СПЭМ удалось оценить линейную ППД слоя в области на поперечном срезе непрерывной длины до 50 мкм.

Препарирование поперечного среза с кристаллографической ориентацией (110) образцов для исследования на ПЭМ проводилось в несколько этапов: склеивание образцов с жертвенными пластинами, высверливание цилиндра вдоль направления [110], вклеивание его в латунную трубку, резка на ПЭМ-диски, механическое шлифование, полирование ПЭМ-диска, создание углубления в центре ПЭМ-диска и его утонение ионами Ar^+ с энергиями в диапазоне от 2 до 5 кэВ под малыми углами (<5°) до перфорации с использованием прецизионной ионной полировальной системы Gatan 691.

Плотность прорастающих дислокаций в верхнем слое GaAs, выявленных с использованием селективного травления, оценивалась методом подсчета «ямок» травления на изображениях, полученных с помощью оптического микроскопа (ОМ-изображение) при увеличении 1500 и АСМ-сканах. Для селективного травления дефектов в GaAs использовался раствор [1,6 г CrO_3]:[2 мл HF (48%)]:[18 мл H_2O] [153]. Длительность травления — 30 с.

2.3.2.3 Методы элементного анализа

Для проведения локального химического анализа на поперечном срезе использовался энергодисперсионный рентгеновский детектор X-Max компании Oxford Instruments, которым оборудован микроскоп JEOL JEM-2100F. Локальность определения химического состава методом энергодисперсионной спектроскопии (ЭДС, EDS — energy-dispersive X-ray spectroscopy) на данном детекторе может варьироваться в диапазоне от 0,5 до 2,4 нм, а разрешение по концентрации составляет до 1 ат. %.

Для элементного анализа по глубине гетероструктуры использовался вторично-ионный масс-спектрометр (ВИМС) TOF.SIMS 5 (производитель IONTOF, Германия), позволяющий надежно идентифицировать все присутствующие элементы с уровнем чувствительности от 10^{14} до 10^{16} $см^{-3}$.

2.3.2.4 Методы исследования оптических свойств

Основным методом исследования оптических свойств гетероструктур являлся метод спектроскопии фотолюминесценции (ФЛ) на установке Nanometrics RPM2000. Установка

Nanometrics RPM2000 позволяет измерять спектры фотолюминесценции, а также строить карты с распределением по образцу интенсивности излучения, положения пика, ширины на полувысоте, и других параметров люминесценции с пространственным разрешением 0,1 мм. В качестве источника возбуждения для получения спектров и карт ФЛ при комнатной температуре использовался Nd:YAG-лазер с длиной волны 532 нм и светодиод с длиной волны 785 нм.

Для исследования оптических свойств светоизлучающих p-i-n диодов применялся метод спектроскопии электролюминесценции (ЭЛ). Использовались монохроматор МДР-2 и фотодетектор InGaAs.

2.3.2.5 Методы исследования электрофизических свойств

Для исследования электрофизических свойств гетероструктур применялись методы измерения эффекта Холла по схеме Ван-дер-Пау и электрохимического CV профилирования (ECV — electrochemical capacitance-voltage profiling). Для исследования электрофизических свойств планарных p-i-n диодов применялся метод измерения вольтамперных характеристик (ВАХ).

Метод ECV позволяет получить профили распределения концентрации свободных носителей заряда по глубине. Метод осуществлялся на установке ECVPro от компании Accent Optical Technologies. В качестве электролита использовался раствор динатриевой соли этилендиаминтетрауксусной кислоты (EDTA — ethylenediaminetetraacetic acid disodium).

2.4 Выводы к главе 2

Использование отечественных подложек класса «кремний-на-изоляторе» делает исследования в диссертации значимыми для открытия новых перспективных направлений развития микро- и оптоэлектроники в стране.

Комплекс используемых методов измерений позволяет всесторонне исследовать структурные, оптические, электрофизические свойства, а также морфологию поверхности образцов. Такое обширное исследование дает возможность надежно интерпретировать результаты.

Оригинальность и новизна используемых подходов при исследовании гетероэпитаксии полупроводников $A^{III}B^{V}$, где в качестве элементов B^{V} группы выступает As, на точно ориентированных платформах Ge/Si (001) и Ge/Si/КНИ (001) с углом отклонения среза меньше 0,5° определяется следующим.

1. Использован метод in-situ измерения отражательной способности в процессе роста полупроводников $A^{III}B^{V}$, результаты которого подтвердят формирование сильно развитого фронта роста на начальном этапе, продемонстрируют развитие морфологии поверхности во время выдержки при высокой температуре в период термоциклического отжига и выравнивание поверхности в течение последующего роста GaAs:Si.

2. Увеличено количество периодов $GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ в буферных слоях $A^{III}B^{V}$, что позволит методом просвечивающей электронной микроскопии на поперечном срезе проследить влияние антифазных доменов на рельеф фронта роста, обнаружить центры кривизны антифазных границ.

3. Использованы различные режимы просвечивающей электронной микроскопии, а также метод энергодисперсионной спектроскопии для исследования зародышевых слоев $Al_{0,3}Ga_{0,7}As/GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ в гетероструктурах $A^{III}B^{V}$/Ge/Si на точно ориентированных подложках Si (001) и КНИ (001) на предмет их эффективности в подавление антифазных границ, взаимной диффузии атомов на гетерогранице с Ge, прорастающих дислокаций, а также для определения толщины, в пределах которой заканчивается 3D рост $A^{III}B^{V}$.

4. Выращены и исследованы две гетероструктуры $A^{III}B^{V}$ на созданной платформе Ge/Si/КНИ (001), отличающиеся скоростями роста буферных слоев $A^{III}B^{V}$, а также наличием в одном процессе роста выдержки при высокой температуре во время термоциклического отжига, что позволит продемонстрировать влияние скорости роста и in-situ отжига на аннигиляцию антифазных границ путем исследований поперечного среза методом просвечивающей электронной микроскопии и поверхности методом атомно-силовой микроскопии.

ГЛАВА 3. СОЗДАНИЕ ПЛАТФОРМЫ Ge/Si/КНИ ДЛЯ ЭПИТАКСИИ $A^{III}B^{V}$

Из литературного обзора следует, что одним из перспективных способов интеграции $A^{III}B^{V}$ с подложками класса «кремний-на-изоляторе» (КНИ) является эпитаксиальный рост через буферные слои, в том числе и промежуточный между слоями GaAs и Si слой Ge. Несмотря на достигнутый прогресс эпитаксии слоев Ge на подложке Si (001) [100, 114, 115], создание платформы Ge/Si/КНИ для эпитаксии III-V — нетривиальная задача.

Во-первых, создание подложек класса КНИ со структурными свойствами и морфологией поверхности сравнимыми с объемной кремниевой подложкой усложняется тем, что необходимо сформировать гетероструктуру, в которой приборный слой Si будет изолирован от объемной подложки диэлектрической основой. Тем не менее существуют российские производители, которые смогли отработать технологию изготовления подложек класса КНИ высокого качества, позволяющие использовать их для создания приборов микроэлектроники. В диссертации будут рассмотрены два типа таких подложек.

Во-вторых, наличие диэлектрической основы в подложках класса КНИ может привести к изменению оптимальных режимов роста относительно температурных режимов роста на подложках Si, а также затрудняет контроль температуры на поверхности подложки (см. раздел 1.4). Поэтому помимо выбора наиболее подходящего метода роста слоя Ge на кремнии для интеграции с полупроводниками III-V, требуется оптимизация параметров роста данным методом на подложке класса КНИ.

В-третьих, требуется установить возможность создания платформы Ge/Si/КНИ, которая позволит наращивать на ней слои III-V, не уступающие по кристаллическому и оптическому качеству таким же слоям, сформированным на платформе Ge/Si.

В данной главе описан процесс создания платформы Ge/Si/КНИ для эпитаксии гетероструктур III-V, в ходе которого отобраны подложки класса КНИ, метод роста буферного слоя Ge и продемонстрирована возможность роста слоев III-V на созданной платформе с качеством, не уступающим качеству аналогичных гетероструктур III-V, выращенных на платформе Ge/Si [A1–A3, A8–A10].

3.1 Сравнение подложек класса «кремний-на-изоляторе»

Данный раздел посвящен обсуждению результатов исследования подложек класса «кремний-на-изоляторе» (КНИ). На начальном этапе нам были доступны подложки «кремний-на-сапфире» (R-срез) (КНС), изготовленные с применением метода газофазной эпитаксии. По мере развития микроэлектроники в регионе появились отечественные подложки «кремний-на-изоляторе» (001), изготовленные по технологии Smart Cut, которые демонстрируют структурные свойства и морфологию поверхности, сравнимые с объемными кремниевыми подложками. Представлены типичные результаты исследования серии образцов, состоящей из трех подложек класса КНИ каждого типа: КНИ и КНС.

3.1.1 Исследование гетероструктур Ge/Si и GaAs/III-V/Ge/Si на КНС (R-срез)

В гетероструктурах КНС наибольший объем занимает сапфир (Al_2O_3), имеющий ряд преимуществ перед подложкой Si, который является основным материалом КНИ. К ним относятся высокие диэлектрические свойства, химическая инертность, прочность, прозрачность в широком спектральном диапазоне от 0,3 до 7,0 мкм [154].

Для того чтобы получить высокого кристаллического качества гетероструктуру на основе III-V, необходимо сначала отработать технологию роста GaAs на подложке КНС с требуемыми значениями плотности прорастающих дефектов и шероховатости поверхности (см. раздел 1.5).

В приложении Б представлена обработка и обсуждение результатов исследования подложек КНС (R-срез), изготовленных методом газофазной эпитаксии, а также выращенных на них гетероструктур Ge/Si и GaAs/III-V/Ge/Si [A3, A1–-A18, A26–A29, A31, A32]. В используемых подложках КНС (R-срез) толщина приборного слоя Si варьировалась от 290 до 340 нм. На основе данных результатов можно сделать следующие выводы.

Продемонстрирована возможность роста монокристаллического слоя GaAs через буферные слои AlAs/GaAs/AlAs на платформе Ge/Si/КНС (R-срез), в которой слой Ge выращен методом газофазного осаждения с разложением моногермана на «горячей проволоке». Однако слой GaAs имеет низкое кристаллическое качество с высокой плотностью прорастающих дислокаций порядка 10^8 см$^{-2}$ и наличием дефектов двойникования, упаковки и политипа 9R, прорастающих до поверхности, а также шероховатый рельеф поверхности с разбросом высот 5 нм на линейном масштабе 22,8 нм, что является критичным, например, для квантовых ям III-V.

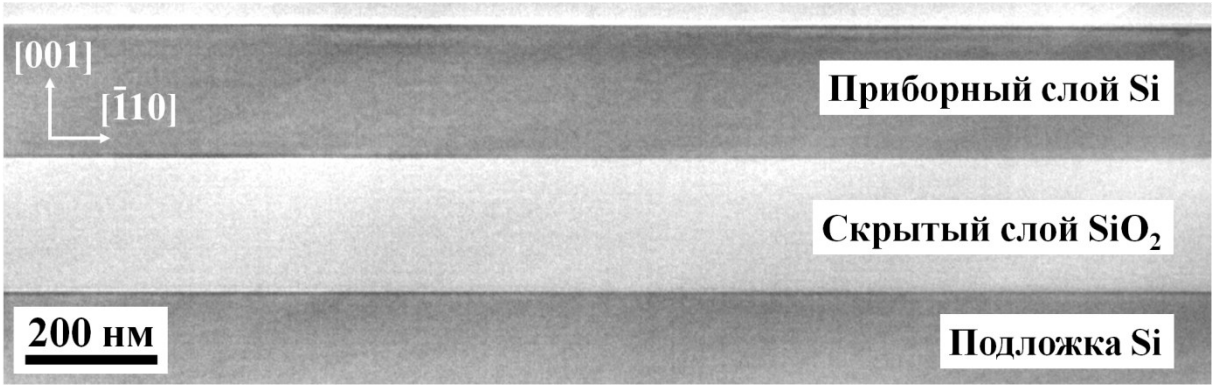
Электронно-микроскопические исследования поперечного среза гетероструктуры Ge/Si/КНС (R-срез) продемонстрировали высокую плотность дефектов двойникования, упаковки и политипа 9R не только вблизи гетерограницы Si/Al_2O_3, но и вблизи гетерограницы Ge/Si. При этом наблюдались двумерные дефекты, образовавшиеся на гетерогранице Si/Al_2O_3, которые прорастали через приборный и буферный слои Si до гетерограницы с Ge. Толщина слоя, на которую распространяется основная плотность перечисленных выше дефектов, вблизи гетерограницы Si/Al_2O_3 составляет ≈250 нм, а вблизи Ge/Si — ≈170 нм. В буферном слое Si толщиной ≈200 нм, выращенном на подложке КНС, наблюдались двумерные дефекты, которые зарождались на гомогранице приборного слоя Si подложки КНС и буферного слоя Si и прорастали через него. Вероятнее всего такие дефекты образовывались на загрязнениях, не удалившихся с поверхности подложки КНС во время ее подготовки. Прорастающие дислокации в системе Ge/Si/КНС (R-срез) наблюдались над местами взаимной аннигиляции двумерных дефектов и политипа 9R и распространялись преимущественно вертикально вплоть до гетерограницы Ge/Si или поверхности слоя Ge. В слое Ge комплексы таких дислокаций образовывали на поверхности ямки, которые выравнивались с поверхностью при увеличении толщины слоя от 550 нм до 1700 нм.

Все двумерные дефекты и политип 9R в слоях III-V, которые мы наблюдали на ПЭМ-изображениях поперечного среза гетероструктуры GaAs/III-V/Ge/Si/КНС (R-срез), начинались либо вблизи гетерограницы с Ge, либо в слоях III-V. Причем обнаружены двумерные дефекты и политип 9R, прорастающие через все слои III-V, по сравнению с ситуацией со слоем Ge, описанной ранее. Распространение таких дефектов через все слои III-V общей толщиной ≈1,3 мкм можно объяснить тем, что их плотность достаточно низкая, чтобы они успели встретиться за рост слоев III-V и в результате взаимно аннигилировать.

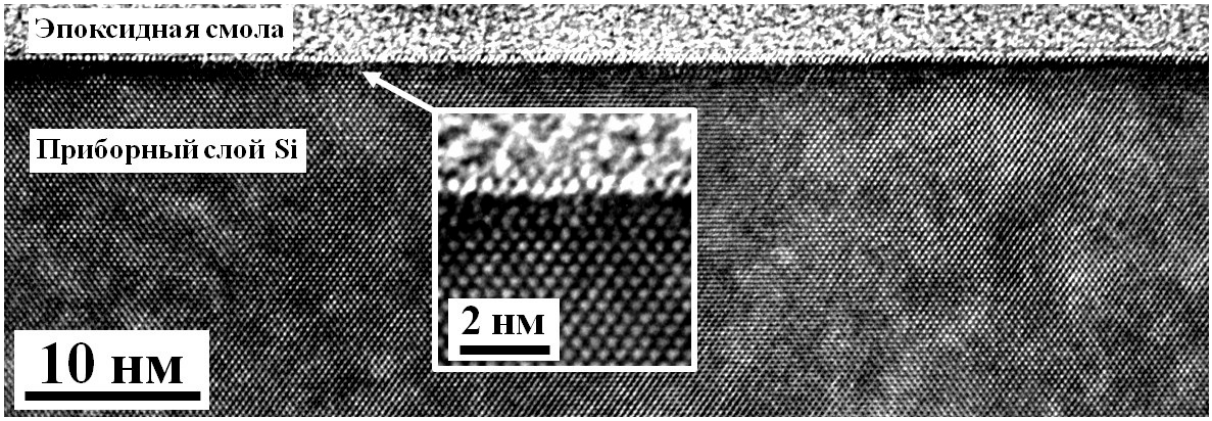
Для уменьшения плотности прорастающих дислокаций, устранения двумерных дефектов и политипа 9R в верхнем слое GaAs, а также для выравнивания поверхности гетероструктуры требуется, во-первых, технология производства подложек КНС (R-срез) с приборным слоем Si, структурные свойства которого соответствовали бы объемным подложкам Si, во-вторых, оптимизация температурных режимов роста слоев III-V/Ge/Si на КНС, а также внедрение и отработка подходов, используемых во время роста слоев III-V.

3.1.2 Исследование подложек КНИ (001)

Исследованы подложки КНИ (001), изготовленные по технологии Smart Cut [A2, A15]. В используемых подложках КНИ (001) толщины приборного слоя Si и скрытого слоя SiO_2 составляли ≈200 нм (рисунок 16 (а)). На ПЭМ-изображениях поперечного среза КНИ (001) отсутствует контраст, связанный с дефектами (рисунок 16 (а)). На совмещенных друг с другом СПЭМ-изображениях общей длиной 45 мкм не обнаружено прорастающих дислокаций, что указывает на то, что линейная плотность прорастающих дислокаций в приборном слое Si <0,02 мкм$^{-1}$. Если переводить это значение в поверхностную плотность прорастающих дислокаций (ППД), то получим значение ППД<$4\cdot10^4$ см$^{-2}$. Методом ПЭМ также продемонстрированы атомарно-гладкие рельефы интерфейсов SiO_2/Si, Si/SiO_2 и поверхности КНИ (рисунок 16 (б)) на участках длиной 140 нм.



(а)



(б)

Рисунок 16 — (а) Обзорное ПЭМ-изображение поперечного среза КНИ (001); (б) ВРПЭМ-изображение поперечного среза поверхности приборного слоя Si в КНИ (001) (ось зон [110])

Среднеквадратичная шероховатость поверхности (RMS), рассчитанная по изображениям, полученным с помощью интерференционной микроскопии с фазовым сдвигом в поле 351 на 264 мкм меньше 0,8 нм, что соответствует системному шуму и минимально возможному значению RMS, которое можно зарегистрировать на установке Leica DCM8 при описанной в разделе 2.3.2.1 методике обработки изображения. RMS, рассчитанная по изображениям 7 на 7 мкм, полученным с помощью АСМ, меньше 0,75 Å.

Таким образом, кристаллическое качество приборного слоя подложек КНИ (001), изготовленных по технологии Smart Cut, и его морфология поверхности соответствуют характеристикам объемных подложек Si (001) с углом отклонения среза <0,5°.

3.1.3 Выводы

Выводы сделаны на основе результатов исследования серии образцов, состоящей из трех подложек класса КНИ каждого типа: КНИ и КНС.

Для создания платформ Ge/Si/КНИ принято решение использовать отечественные подложки «кремний-на-изоляторе» (001), изготовленные по технологии Smart Cut, так как их структурные свойства значительно превосходят структурные свойства подложек «кремний-на-сапфире» (R-срез), в которых слой Si выращен методом газофазной эпитаксии.

3.2 Сравнение структурных свойств слоя Ge, выращенного разными методами

К настоящему времени два метода эпитаксии слоя Ge на подложках Si через буферный слой Si для создания платформы Ge/Si (001) достигли высокого уровня развития: метод молекулярно-пучковой эпитаксии с применением режима двухстадийного роста и термоциклического отжига в вакууме (МПЭ) [115] и метод газофазного осаждения с разложением моногермана на «горячей проволоке» (HWCVD — hot-wire chemical vapor deposition, метод «горячей проволоки») [114]. Образцы, с эпитаксиально выращенными на таких платформах гетероструктурами III-V, использованы для создания полупроводниковых лазеров различных конструкций [A5, A7], планарных p-n диодов [155], светоизлучающих диодов [156].

Для роста высокого кристаллического качества светоизлучающей гетероструктуры III-V требуются платформы с низкими значениями среднеквадратичной шероховатости поверхности (RMS) и плотности прорастающих дефектов. Основными дефектами, которые прорастают к поверхности Ge в гетероструктурах Ge/Si являются прорастающие дислокации (см. раздел 1.1.2). Известно, что для платформ Ge/Si, изготовленных с применением молекулярно-пучковой эпитаксии, характерны значения RMS <1 нм и плотности прорастающих дислокаций (ППД) ~10^7 см$^{-2}$ [115]. При использовании метода HWCVD значение RMS также <1 нм, однако ППД ~10^5 см$^{-2}$ по подсчету «ямок» травления от дислокаций как отмечено в статье [114].

Значения среднеквадратичной шероховатости поверхности, полученные от одного АСМ-скана, могут отличаться при его обработке в разных программных обеспечениях и с применением разной методики устранения артефактов изображения. Однако для значений <1 нм отличия будут незначительными. В свою очередь определение плотности прорастающих дислокаций с помощью подсчета «ямок» травления после селективного травления дефектов носит в значительной степени оценочный характер, поскольку зависит от многих факторов: выбранного травителя [157], внешних условий при проведении эксперимента [153], метода выявления «ямок» травления и порядка истинного значения плотности прорастающих дислокаций. Даже если правильно подобраны травитель и внешние условия, позволяющие проявить большинство «ямок» от прорастающих дислокаций (ПД) на поверхности образца, то метод селективного травления дефектов все равно имеет достаточно большое отклонение от истинного значения плотности ПД, так как «ямки» травления имеют достаточно большие размеры и могут слиться друг с другом [91], кроме этого они могут слиться и с «ямками» от других дефектов [A1], что продемонстрировано далее в разделе 3.3.2.4.

В связи с тем, что оба метода роста позволяют получить слой Ge со среднеквадратичной шероховатостью поверхности <1 нм, что удовлетворяет одному из критериев к создаваемой в диссертации платформе (см. раздел 1.5), а показания плотности «ямок» травления от прорастающих дислокаций (EPD) отличаются на порядки, причем при использовании метода HWCVD получаются рекордно низкие значения EPD ~10^5 см$^{-2}$ [114], то в диссертации акцент сделан на сравнении структурных свойств слоя Ge.

Сформированы четыре образца. В двух образцах слой Ge выращен на Si с кристаллографической ориентацией (001) методом HWCVD, а в остальных — методом МПЭ. Использовались стандартные для этих методов режимы роста слоев Ge/Si, указанные в статьях [114] и [115] для HWCVD и МПЭ соответственно.

Сравнение линейной плотности прорастающих дислокаций в слое Ge происходило методом СПЭМ, так как это прямой метод визуализации дефектов, позволяющий разделять их друг от друга. Другие преимущества метода СПЭМ для решения данной задачи описаны в разделе 2.3.2.2.

Для установления возможных причин различия структурных свойств слоев Ge, выращенных разными методами проводилась расшифровка дефектов на гетерогранице Ge/Si и определение толщины напряженного слоя Ge с помощью цифровой обработки ПЭМ-изображений.

Образцы Ge/Si (001), изготовленные с применением разных методов роста, склеивались лицом к лицу для более точного сравнения структурных свойств. Поскольку поперечный срез образцов находился в одном ПЭМ-диске, то воздействие от процесса препарирования на оба образца в паре было максимально одинаковым.

3.2.1 Обработка результатов

3.2.1.1 Гетерограница Ge/Si в высоком разрешении

Типичные результаты цифровой обработки ПЭМ-изображений высокого разрешения (ВРПЭМ-изображение) поперечного среза гетерограниц Ge/Si (001) с помощью метода анализа геометрической фазы (МГФ) представлены на рисунках 17, 18. Проведено дополнительное исследование областей с однородной решеткой Si и Ge, то есть областей без изменений деформаций решетки для определения погрешности МГФ. Подробное описание данного исследования представлено в приложении В. При этом использовалось, в том числе увеличение

просвечивающего электронного микроскопа, которое применялось и для получения ВРПЭМ-изображений, описанных в данном разделе. Оптимальное пространственное разрешение в методе анализа геометрической фазы для таких изображений, которое установлено экспериментальным путем, составило 3 нм. Погрешность МГФ для пространственного разрешения 3 нм равна 0,4 % и 0,6 % относительной деформации для карт распределения деформаций в латеральном и ростовом направлениях соответственно.

Резкие переходы с сине-зеленого цвета на желто-красный цвет на картах распределения деформаций указывают на возможное расположение дислокаций несоответствия (ДН) в данных местах. Однако наличие ДН требует подтверждения из-за возникновения артефактов при использовании метода анализа геометрической фазы [158]. Для нахождения ядер ДН применялись ВРПЭМ-изображения (рисунки 19, 20) и фильтрованные в рефлексах типа {111} изображения наподобие тех, что представлены на рисунках 20. Из-за пространственного разрешения использованного ПЭМ, которое составляет 0,19 нм, не было возможности расшифровать частичные дислокации [159], только совершенные смешанные 60°-ые ДН (рисунок 20 (а)) и их комбинации в виде краевых 90°-ых ДН (ломеровские) (рисунок 20 (б), (в), (г)). Из литературного обзора установлено, что возможно формирование дислокационных конфигураций, состоящих из двух не комплементарных 60°-ых ДН, однако согласно статье [62] они встречаются достаточно редко. При исследовании одного поперечного среза невозможно определить какой является пара 60°-ых ДН: комплементарной или не комплементарной [62]. Поэтому при расшифровке ДН принято допущение, что пары не комплементарных 60°-ых ДН в исследуемых областях поперечного среза отсутствуют. При этом обнаружены полуплоскости типа {111}, распространяющиеся в направление к поверхности гетероструктуры, поэтому на рисунках 18, 19 стрелками отмечены лишь те ДН, которые в общей сумме компенсируют рассогласование параметра решеток Ge и Si.

Наблюдаются отличительные особенности гетерограницы Ge/Si, формируемой разными методами.

Во-первых, гетерограница при использовании метода HWCVD получается более резкой — на ВРПЭМ-изображениях толщина сильного контраста на гетерогранице, связанного с деформациями решетки, значительно меньше (рисунок 17). Более детальное исследование показало, что основная плотность ядер полуплоскостей (в том числе ДН) расположена в слое Ge вблизи гетерограницы толщиной ≈5 нм при использовании метода HWCVD (рисунки 18, 19 (а)) и может достигать ≈15 нм для МПЭ (рисунок 19 (б)).

Во-вторых, распределение деформаций по поперечному срезу слоя Ge при использовании метода HWCVD более однородное (рисунок 17) — лишь незначительное количество ДН наблюдается на толщине до 10 нм от гетерограницы (рисунки 18). В случае использования

метода МПЭ дислокации несоответствия наблюдаются и на расстоянии до 27 нм (рисунок 19 (б)). Все резкие переходы с сине-зеленого цвета на желто-красный цвет на картах распределения деформаций, которые расположены выше этих значения являются артефактами, что установлено во время расшифровки ДН.

В-третьих, в случае использования метода HWCVD среди дислокаций несоответствия, которые в общей сумме компенсируют рассогласование параметра решеток, 70 % являются комплексами 90°-ых ДН, а при использовании МПЭ — 27 % (при исследовании гетерограницы общей длины ≈200 нм для каждого типа образцов). Среди 90°-ых ДН встречались как «рыхлые» [160] (рисунок 20 (б), (в)), так и компактные [63] (рисунок 20 (г)). При этом в тех областях на гетерогранице, где проведена расшифровка ДН происходит полная релаксация деформаций несоответствия за счет их введения. Данный факт установлен с помощью подсчета общего количества 90°-ых ДН и пары несвязанных 60°-ых ДН, которые в общей сумме компенсируют рассогласование параметра решеток на поперечном срезе (110), и расчета общего количества 90°-ых ДН и пары несвязанных 60°-ых ДН (N), требуемого для полной компенсации рассогласования параметров решеток Ge и Si на участке конечной длины (L_1) в направлении [$\bar{1}$10] по формуле (3). Данная формула выводится из геометрических соображений, учитывая, что наличие 90°-ых ДН или пары 60°-ых ДН эквивалентно отсутствию полуплоскости ($\bar{1}$10) в слое Ge в плане введения пластической деформации.

$$N=L_1\cdot(d_2-d_1)/(d_2\cdot d_1), \qquad (3)$$

где N — общее количество 90°-ых ДН и пары несвязанных 60°-ых ДН;

L_1 — это общая длина участков ВРПЭМ-изображений, в которых проведена расшифровка дислокаций несоответствия, нм;

d_1 и d_2 — межплоскостные расстояния ($\bar{1}$10) Si и Ge соответственно, нм.

В случае метода МПЭ наблюдается полное совпадение количества дислокаций несоответствия, которые в общей сумме компенсируют рассогласование параметра решеток Ge и Si на ВРПЭМ-изображениях, и значения N, рассчитанного по формуле (3) при L_1=200 нм. Для метода HWCVD количество ДН получилось на 1,5 единицы больше, чем значение N, что вероятно связано с конечной длиной исследуемого участка (L_1), но данный факт не противоречит сделанному выводу о полной релаксации слоев Ge.

В-четвертых, в слое Ge, выращенном методом HWCVD, наблюдается политип 9R-Ge, распространяющийся на толщину в несколько десятков нанометров (рисунок 21), расшифровка которого проведена по аналогии с расшифровкой политипа 9R-Si, представленной в

приложении Б. В слое Ge, выращенном методом МПЭ политипа 9R-Ge не обнаружено, что говорит о том, что если 9R-Ge и есть, то его линейная плотность меньше 0,05 мкм$^{-1}$, что является минимально возможным значением линейной плотности, которую можно было зафиксировать в данном эксперименте.

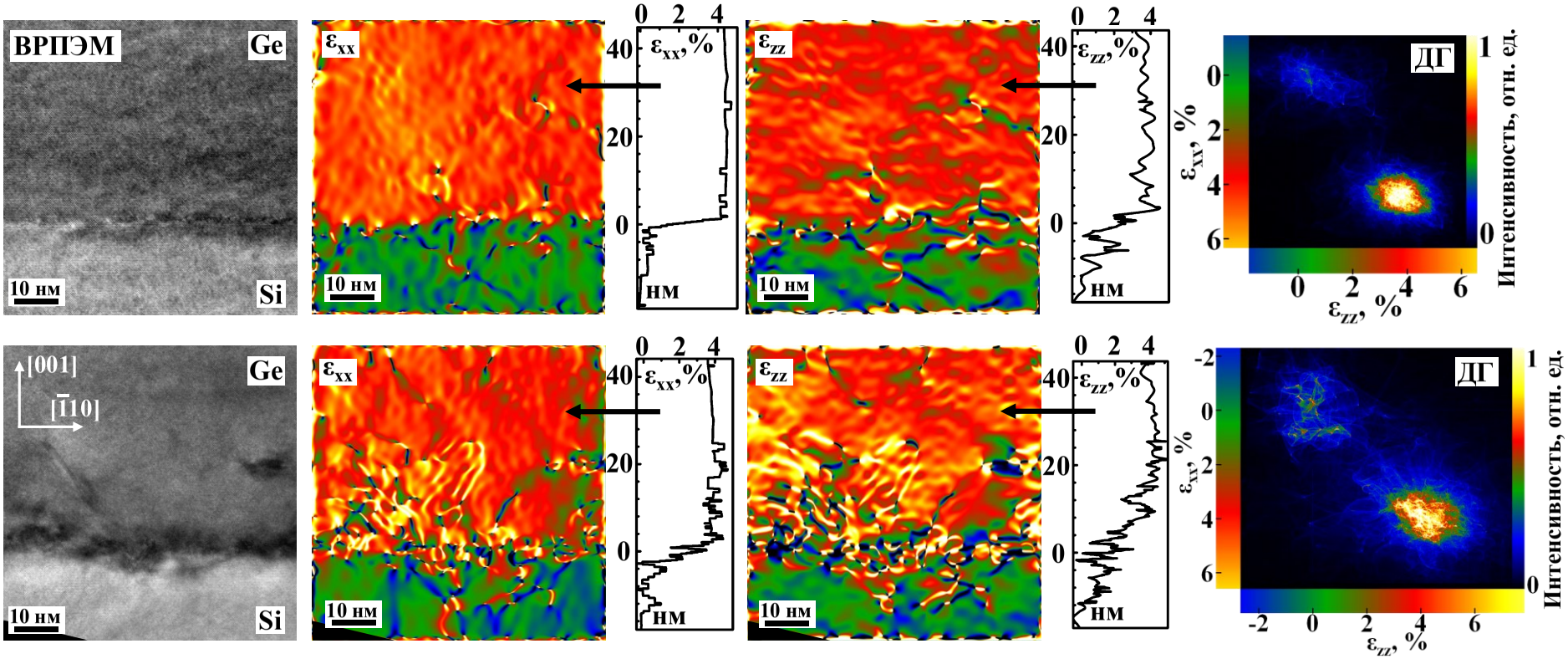


Рисунок 17 — Цифровая обработка ВРПЭМ-изображений поперечного среза (ось зон [110]) гетерограницы Ge/Si (001) методом анализа геометрической фазы: первый ряд изображений относится к гетероструктуре, в которой слой Ge выращен методом HWCVD, второй ряд — методом МПЭ

Примечания

1 Изображения слева направо в ряду: ВРПЭМ-изображение, карта распределения деформаций e_{xx} с суммарным профилем от данного изображения, аналогично для e_{zz}, двухмерная гистограмма (ДГ).

2 ДГ в обоих рядах представлены в одном масштабе.

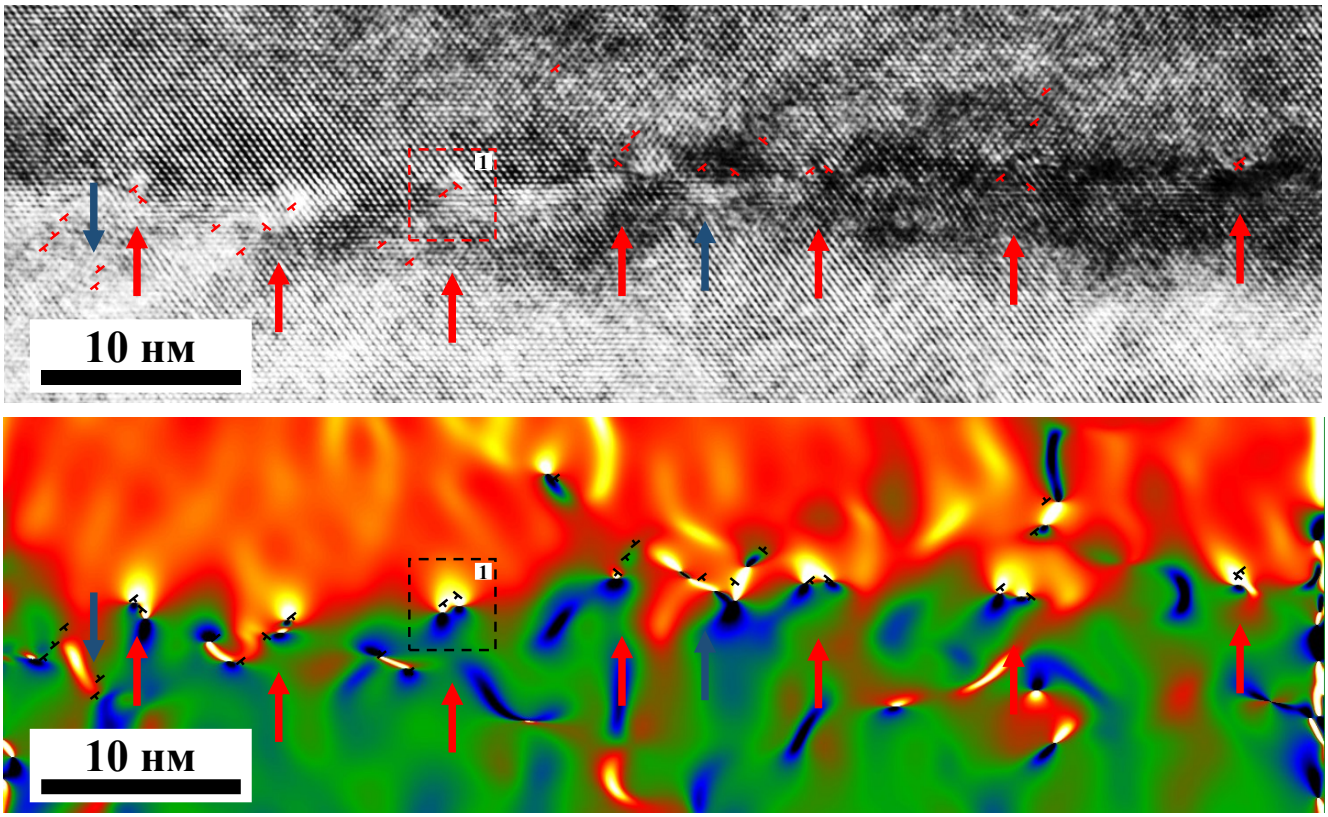
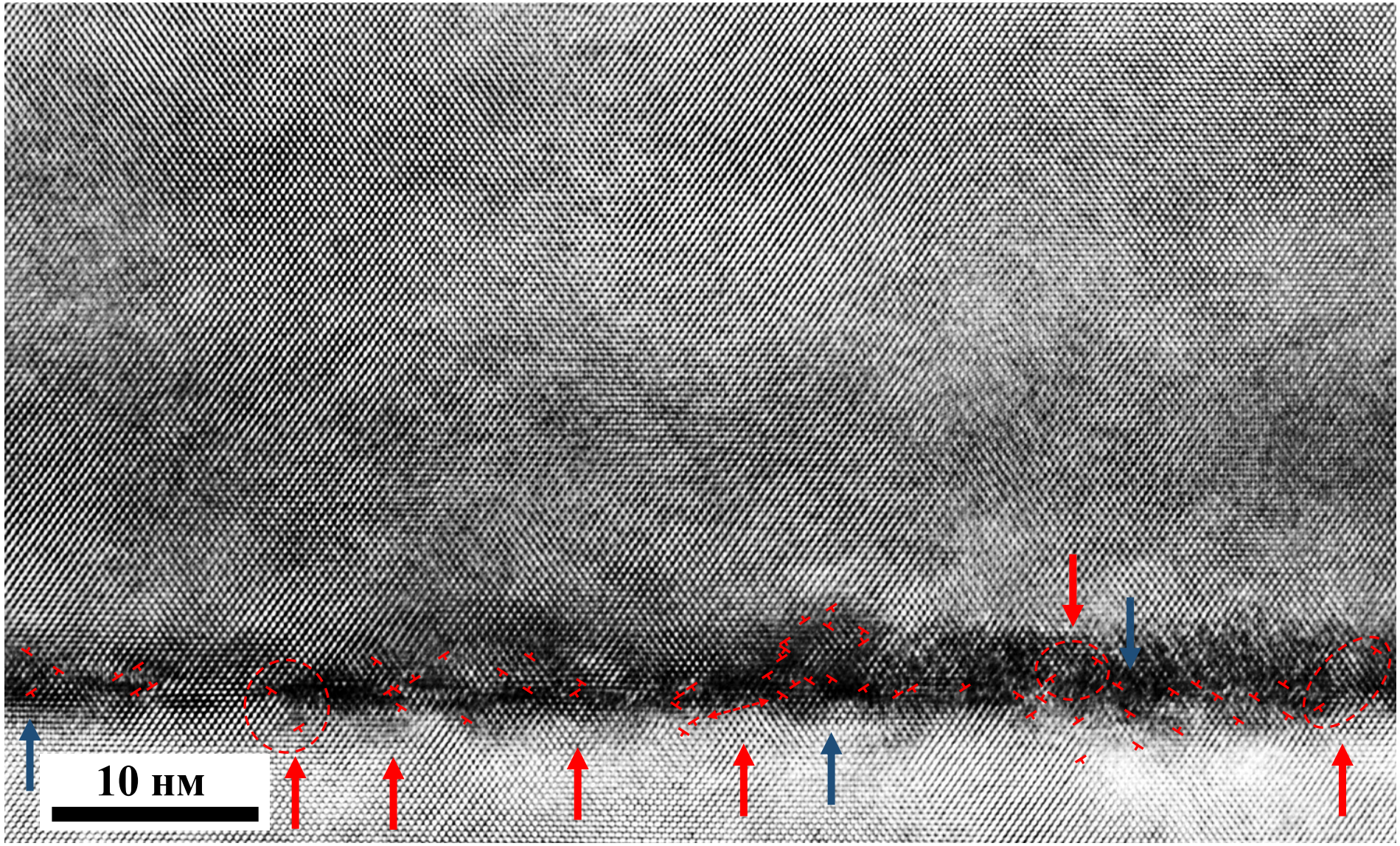


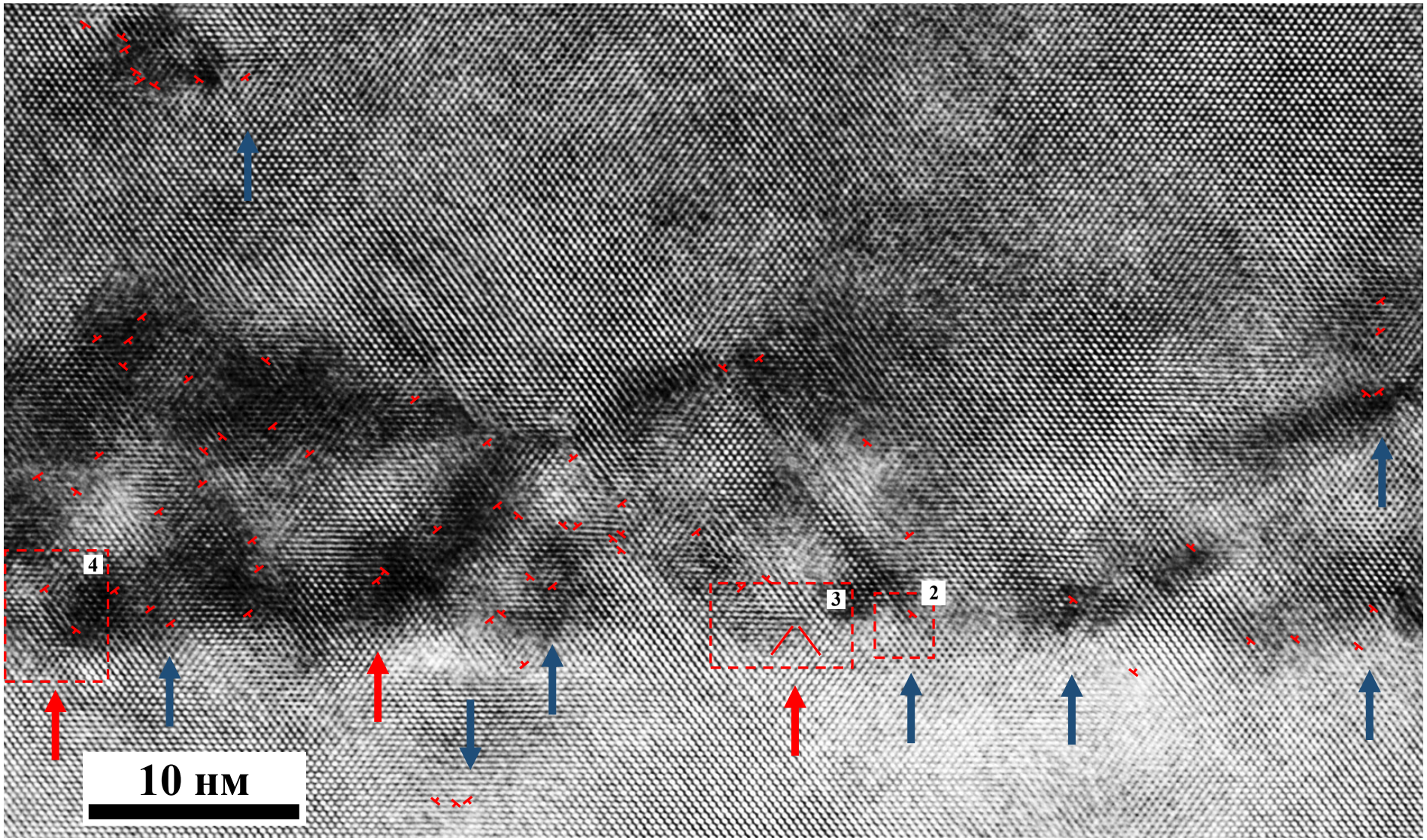
Рисунок 18 — Сверху — область гетерограницы Ge/Si (001) на ВРПЭМ-изображении, расположенном в первом ряду рисунка 17; снизу — такая же область, обработанная методом анализа геометрической фазы

Примечание — Стрелками указаны дислокации несоответствия, которые в общей сумме компенсируют рассогласование параметра решеток Ge и Si: красные — 90°-ые ДН, синие — 60°-ые ДН; полуплоскости отмечены характерным символом ⊥.



(а)

Рисунок 19 — ВРПЭМ-изображения поперечного среза (ось зон [110]) гетерограницы образцов Ge/Si (001), в которых слой Ge выращен: (а) методом HWCVD; (б) методом МПЭ (лист 1 из 2)



(б)

Рисунок 19 (лист 2 из 2)

Примечание — Стрелками указаны дислокации несоответствия, которые в общей сумме компенсируют рассогласование параметра решеток Ge и Si: красные — 90°-ые ДН, синие — 60°-ые ДН; полуплоскости отмечены характерным символом ⊥.

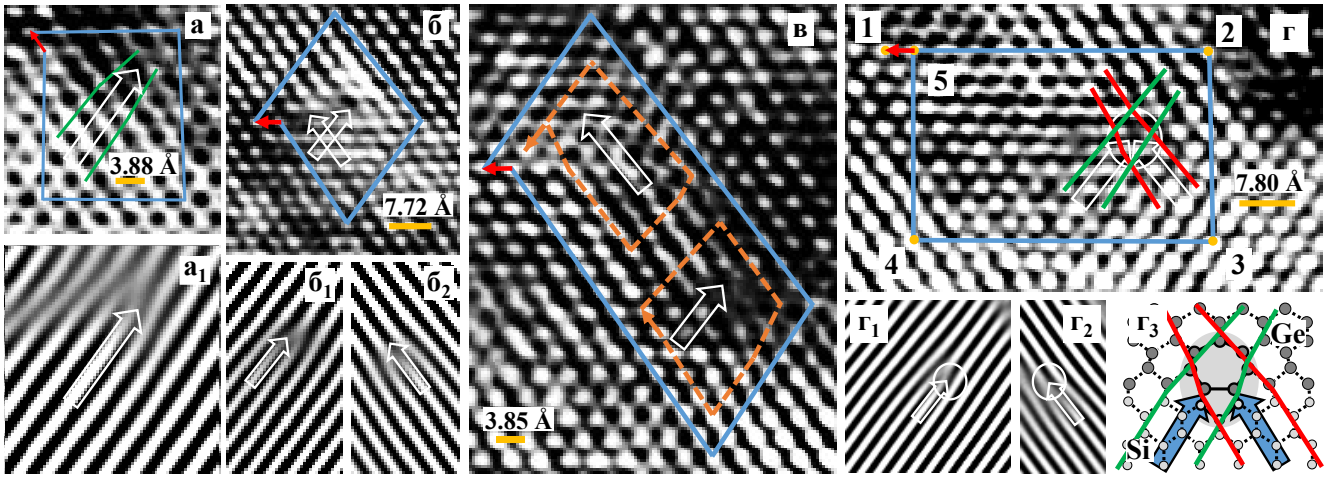


Рисунок 20 — ВРПЭМ-изображения (ось зон [110]) областей, выделенных пунктирными прямоугольниками, на рисунках 18, 19 (б): (а) — цифра (2), (б) — цифра (1), (в) — цифра (4), (г) — цифра (3)

Примечания

1 (а) — Несвязанная 60°-ая ДН, (б), (в) — «рыхлые» 90°-ые ДН, (г) — компактная 90°-ая ДН; ($а_1$), ($б_1$), ($б_2$), ($г_1$), ($г_2$) — цифровая обработка соответствующих ВРПЭМ-изображений; ($а_1$), ($б_1$), ($г_1$) и ($б_2$), ($г_2$) — изображения фильтрованные в рефлексе ($1\bar{1}1$) и ($\bar{1}11$) соответственно; ($г_3$) — схема атомарной структуры ядра компактной 90°-ой ДН, адаптированная из работы [161].

2 Красной стрелкой указан вектор Бюргерса; белой фигурной стрелкой указана полуплоскость; синий контур — контур Бюргерса; на рисунке (в) оранжевый пунктирный контур — контур Бюргерса для отдельной 60°-ой ДН, относящейся к комплексу «рыхлой» 90°-ой ДН, оранжевая стрелка — вектор Бюргерса для отдельной 60°-ой ДН; на рисунке (г) белый овал отмечает ядро компактной 90°-ой ДН, а цифрами отмечено направление обхода контура Бюргерса.

3 Обход контура Бюргерса определялся по правилу правого винта.

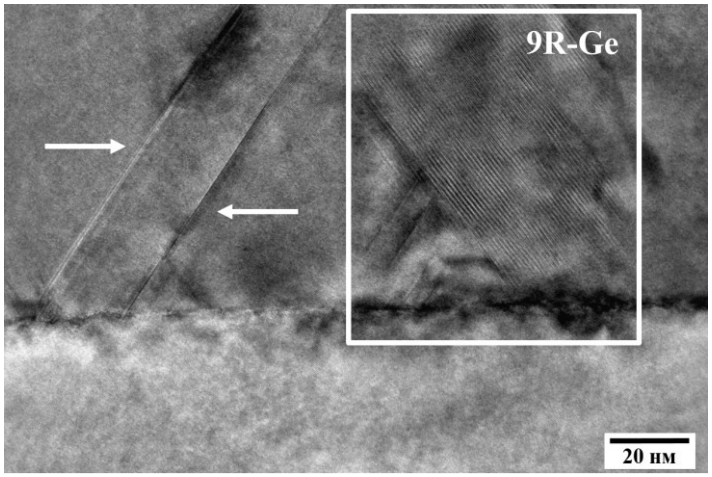


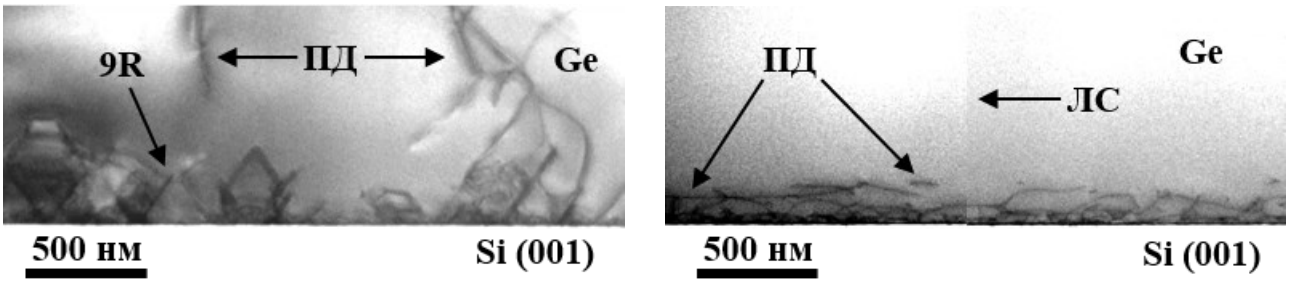
Рисунок 21 — ПЭМ-изображение поперечного среза (ось зон [110]) гетерограницы Ge/Si (001) с дефектами двойникования (указаны стрелками) и политипом 9R-Ge

Примечание — В приложении Б представлены более детальные ВРПЭМ-изображения дефектов двойникования и политипа 9R в Si на гетерогранице Si/Al_2O_3 (R-срез).

3.2.1.2 Плотность прорастающих дислокаций и ее зависимость от толщины слоя Ge

Линейная плотность прорастающих дислокаций (линейная ППД) рассчитывалась как отношение количества прорастающих дислокаций на длину совмещенных друг с другом СПЭМ-изображений (L_2). Для расчета линейной ППД вблизи гетерограницы Ge/Si значение L_2 составляло ≈20 мкм, а подсчет прорастающих дислокаций (ПД) велся в пределах толщины слоя Ge равной 100 нм. Для расчета линейной ППД вблизи поверхности слоя Ge значение L_2 составляло ≈45 мкм, а подсчет ПД велся в пределах глубины 100 нм.

В случае использования метода HWCVD вблизи гетерограницы Ge/Si линейная ППД составляет (1,56±0,16) мкм$^{-1}$, а в случае метода МПЭ на порядок больше — (12±2) мкм$^{-1}$ (рисунок 22).



(а) (б)

Рисунок 22 — ПЭМ-изображения поперечного среза (ось зон [110]) образцов Ge/Si (001), в которых слой Ge выращен (а) методом HWCVD; (б) методом МПЭ

Примечание — 9R — политип 9R-Ge, ПД — прорастающая дислокация, ЛС — линия сглаживания после сшифки СПЭМ-изображений.

По мере роста слоя Ge в случае метода HWCVD линейная плотность прорастающих дислокаций уменьшается незначительно и до поверхности дорастают прорастающие дислокации с линейной ППД равной (1,26±0,10) мкм$^{-1}$. В методе МПЭ благодаря эффективной аннигиляции ПД во время роста слоя HT-Ge [115] примерно через 200 нм линейная плотность прорастающих дислокаций резко падает на два порядка. В результате после постростового термоциклического отжига в вакууме линейная ППД вблизи поверхности Ge составляет (0,09±0,01) мкм$^{-1}$. Совмещенные друг с другом обзорные СПЭМ-изображения поперечного среза слоев Ge в гетероструктурах Ge/Si идентичны тем, что представлены в следующем разделе, с одним лишь отличием для образца, созданного с применением метода HWCVD, которое заключается в отсутствие термических трещин.

3.2.2 Обсуждение результатов

Для системы слоев Ge/Si в формуле (1) для расчета равновесной критической толщины параметр ядра 60°-ых дислокаций несоответствия (ДН) (β_1) принимает значение 0,76 [162], углы α_1 и λ_1 для 60°-ых ДН равны 60°, рассогласование параметра решеток Ge и Si (f) равно 0,042, коэффициент Пуассона (ν) для Ge равен 0,26 [163], модуль вектора Бюргерса 60°-ых ДН $b_{60°}=a/\sqrt{2}$ и для Ge равен 4 Å. В таком случае формулу (1) для гетероструктуры Ge/Si можно переписать в единицах измерения ангстрем следующим образом (формула (4)).

$$h_c=5.62\cdot(\ln(0,19h_c)+1). \quad (4)$$

Данное уравнение имеет два решения: 3,8 и 7,9 Å. Принято считать, что большее значение имеет физический смысл. В таком случае для системы Ge/Si теоретическая (равновесная) критическая толщина составляет 0,8 нм. Экспериментальную критическую толщину невозможно точно установить по ВРПЭМ-изображениям гетерограницы Ge/Si гетероструктуры с толстым слоем Ge хотя бы потому, что на 60°-ые ДН действует сила направленная к подложке Si, определяемая напряжениями в псевдоморфном слое [70]. Поэтому обнаруженные дислокации несоответствия непосредственно на гетерогранице могут изначально возникнуть при больших значениях толщины слоя Ge и во время последующего роста под действием данной силы переместиться по плоскости скольжения к гетерогранице. По причине скольжения дислокации несоответствия невозможно определить экспериментальным путем и толщину, при которой появляется возможность их размножения. Однако по максимальной толщине слоя Ge, при которой наблюдаются дислокации несоответствия можно установить при использовании какого метода роста Ge полная релаксация остаточных деформаций, связанных с рассогласованием параметров решеток Ge и Si, происходит за меньшую толщину. Так, в случае метода HWCVD это значение составляет ≈10 нм (рисунок 18), для МПЭ — ≈27 нм (рисунок 19 (б)). Полная релаксация слоя Ge подтверждается расчетами по количеству дислокаций несоответствия, которые в общей сумме компенсируют рассогласование параметра решеток Ge и Si, и методом анализа геометрической фазы (рисунок 17). Начиная с установленных выше толщин слоя Ge для соответствующего метода роста, значения деформаций на картах распределения деформаций изменяются в пределах погрешности данного метода и соответствуют объемному Ge. То есть релаксация, в слое Ge, выращенном методом HWCVD, происходит за меньшую толщину. Данный факт можно объяснить тем, что в слое Ge, выращенном методом HWCVD, в процентном соотношении формируется больше 90°-ых ДН, чем не связанных 60°-ых ДН в отличие от метода

МПЭ. Так как 90°-ые ДН являются чисто краевыми, то они эффективнее компенсируют деформации, связанные с рассогласованием параметров решеток.

Более компактное расположение 60°-ых ДН, в том числе и в виде 90°-ых ДН при использовании метода HWCVD (рисунок 19) может способствовать увеличению вероятности аннигиляции прорастающих дислокаций из-за увеличения вероятности их взаимодействия друг с другом. Кроме того, при использовании метода HWCVD релаксация слоя Ge происходит за счет введения не только дислокаций несоответствия, но и формирования в некоторых местах гетерограницы Ge/Si политипа 9R-Ge и двумерных дефектов. Релаксация деформаций в кремнии с помощью образования двумерных дефектов и политипа 9R наблюдалась и ранее [164]. В связи с этим предполагается, что политип 9R и двумерные дефекты на гетерогранице Ge/Si формируются вместо дислокаций несоответствия и, как следствие, способствуют уменьшению количества ветвей прорастающих дислокаций.

Незначительное уменьшение линейной плотности прорастающих дислокаций (ПД) при дальнейшем росте Ge методом HWCVD объясняется использованием низкой температуры роста, при которой ПД являются слабо подвижными. В то же время вероятность их аннигиляции также уменьшается из-за достаточно низкого начального значения плотности прорастающих дислокаций. В случае метода МПЭ наоборот после роста слоя LT-Ge плотность ПД достаточно велика, а использование высоких температур во время роста слоя HT-Ge повышает подвижность прорастающих дислокаций. Оба этих факта способствуют улучшению кристаллического качества Ge. Кроме того при использовании метода МПЭ применяется постростовой термоциклический отжиг в вакууме, который также уменьшает плотность прорастающих дислокаций [115].

В обоих методах роста Ge подавляется островковый рост, используются скорости роста ≈0,1 нм/с и низкие температуры роста ≈300 °C (в случае метода МПЭ температуры роста ≈300 °C используется только для зародышевого слоя LT-Ge). Однако существуют некоторые отличия этих методов, которые заключаются в физическом механизме роста Ge (см. разделы 2.1.1 и 2.1.2) и наличием высоких температур в методе МПЭ (рост HT-Ge и отжиг). Возможно, с ними и связаны описанные ранее отличия вблизи гетерограниц Ge/Si, сформированных разными методами. Для ответа на этот вопрос требуются дополнительные исследования. Особый интерес вызывает выяснение причин формирования политипа 9R-Ge при использовании метода HWCVD, так как теоретические расчеты показали, что политип 9R-Ge является прямозонным полупроводником [164]. Поэтому контролируемое образование политипа 9R-Ge эпитаксиальными методами является актуальным направлением исследований.

3.2.3 Выводы

Выводы сделаны на основе результатов исследования четырех образцов. В двух образцах слой Ge сформирован методом газофазного осаждения с разложением моногермана на «горячей проволоке» (HWCVD), а в других — методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) с использованием двухстадийного режима роста и термоциклического отжига в вакууме.

1. Метод МПЭ с использованием двухстадийного режима роста и термоциклического отжига в вакуум позволяет сформировать слой Ge толщиной ≈1 мкм с меньшей плотностью прорастающих дислокаций, чем метод HWCVD.

2. Метод HWCVD может быть использован для формирования прямозонного по теоретическим расчетам политипа 9R-Ge на подложке Si (001).

3. Формирование на гетерогранице Ge/Si (001) политипа 9R-Ge и двумерных дефектов, прорастающих на несколько десятков нанометров, может быть использовано в качестве способа уменьшения плотности прорастающих до поверхности слоя Ge дислокаций без воздействия высоких температур.

3.3 Сравнение гетероструктур $A^{III}B^{V}$ на платформах Ge/Si/КНИ, Ge/Si и GaAs

В предыдущих разделах продемонстрировано, что исследованные нами подложки КНИ, изготовленные по технологии Smart Cut, соответствуют кристаллическому качеству объемной подложки Si, а также, что метод молекулярно-пучковой эпитаксии с применением двухстадийного режима роста и термоциклического отжига в вакууме (МПЭ) позволяет сформировать слой Ge на подложке Si (001) с меньшей плотностью прорастающих дислокаций, чем метод газофазного осаждения с разложением моногермана на «горячей проволоке» (HWCVD). Также известно, что в методике роста слоев Ge/Si на КНИ с применением HWCVD температурные режимы не оптимизированы [A2], а с использованием МПЭ данная задача решена [33]. Поэтому в разделе 3.3 проведено сравнение структурных, оптических свойств, а также морфологии поверхности гетероструктур III-V, выращенных в одном ростовом процессе методом МОС-гидридной эпитаксии на платформах Ge/Si (001), Ge/Si/КНИ (001), где для роста Ge использовались методы HWCVD и МПЭ соответственно, и на подложке GaAs (контрольный образец). Данный эксперимент, во-первых, позволил достоверно сравнить уровень развития методов роста Ge для интеграции с III-V, так как установлено, что скрытый слой SiO_2 в КНИ не повлиял на свойства эпитаксиальных слоев III-V/Ge (см. раздел 3.3.2.2) [A1, A8–A10]. Во-вторых, сравнительный анализ с литературными данными продемонстрировал, что платформа Ge/Si/КНИ (001), созданная с применением оптимизированных температурных режимов роста Ge на КНИ методом МПЭ, позволяет наращивать на ней слои III-V, не уступающие по кристаллическому и оптическому качеству таким же слоям, сформированным на платформе Ge/Si, для создания которой использовался аналогичный метод роста Ge [A1, A8–A10].

Так как методы HWCVD и МПЭ для роста Ge имеют свои преимущества (см. разделы 2.1, 3.2), которые делают их незаменимыми для разных задач, то развитие обоих методов в направлении создания платформы Ge/Si/КНИ имеет практическую значимость. Поэтому проведены первые эксперименты по росту слоев Ge/Si на КНИ с применением метода HWCVD [A2, A11–A13, A22–A25], которые продемонстрировали необходимость оптимизации температурных режимов роста.

3.3.1 Режимы роста и особенности исследований

В качестве подложек использовались фрагменты, выколотые с применением скрайбирования из исходных подложек. Фрагмент подложки КНИ имел форму квадрата, а фрагменты подложек Si и GaAs представляли собой сектора, дуги которых были границами исходных подложек. Примерные площади подложек: Si — 480, GaAs — 540, КНИ — 380 мм^2, толщины: Si — (300±15), GaAs — (465±15), КНИ — (670±15) мкм. Подложки имели кристаллографическую ориентацию (001) с отличной друг от друга небольшой, <0,5°, разориентацией от направления [001], что установлено методом рентгеновской дифрактометрии. Использование точно ориентированных в плоскости (001) подложек Si и КНИ с углом отклонения среза <0,5° обусловлено высоким уровнем развития технологии кремниевой наноэлектроники именно на таких подложках. Для создания платформы Ge/Si (001) буферные слои Ge/Si выращены на подложке Si: слой Si — методом молекулярно-пучковой эпитаксии, а слой Ge — методом газофазного осаждения с разложением моногермана на «горячей проволоке» (см. раздел 2.1.1). Для создания платформы Ge/Si/КНИ (001) слои Ge/Si сформированы на подложке КНИ в сверхвысоковакуумной установке молекулярно-пучковой эпитаксии Riber SIVA-21 с использованием режима двухстадийного роста Ge, термоциклического отжига в вакууме и оптимизированных температурных режимов роста на подложке КНИ (см. раздел 2.1.2). Рост III-V-гетероструктур на различных платформах Ge/Si (001) (образец A), Ge/Si/КНИ (001) (образец B) и на подложке GaAs(001) (образец C) проводился в установке МОС-гидридной эпитаксии AIX 200RF при низком давлении (100 мбар) в одном ростовом процессе. В ростовой камере сначала проводился отжиг платформ и подложки при температуре 750 °C по термопаре (реальная температура ≈730 °C) в атмосфере водорода с арсином. После отжига температура была снижена до 710 °C по термопаре (реальная температура ≈690 °C), при которой и осуществлялся весь процесс роста. Отношение потоков веществ V/III во время роста поддерживалось на уровне 80. В качестве зародышевого слоя III-V выбран твердый раствор $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$, который эффективно проявил себя в уменьшении плотности антифазных границ [96]. Далее выращивались слои $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$/GaAs, так как показано, что вставки AlAs/GaAs/AlAs способствуют подавлению дефектов [A7]. После системы слоев $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$/GaAs/$Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ выращен слой GaAs толщиной ≈400 нм. Затем проводился термоциклический отжиг (2 повтора), улучшающий кристаллическое качество слоев III-V (см. раздел 1.2.2.1). После отжига и роста слоя GaAs ≈300 нм выращивались дислокационные фильтры InAlAs/GaAs (5 периодов), предназначенные для уменьшения плотности прорастающих дислокаций (см. раздел 1.2.2.2), с толщиной, не превышающей равновесное критическое значение. Слои GaAs с толщинами

≈400 нм и ≈300 нм отличались скоростью роста: в первом случае она равнялась скорости роста слоя GaAs в системе слоев $Al_{0,3}Ga_{0,7}As/GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As$, а во втором случае она была больше и равнялась скорости роста GaAs в дислокационных фильтрах (ДФ). Завершающим слоем III-V был GaAs толщиной ≈900 нм, верхняя половина которого легирована Si до концентрации носителей заряда $n \sim 10^{17}$ см$^{-3}$. Завершающий слой GaAs выращен со скоростью роста равной скорости роста GaAs в ДФ. Последовательность слоев III-V в ростовом направлении: AlGaAs/GaAs/AlGaAs, GaAs, дислокационные фильтры, состоящие из 5 периодов InAlAs/GaAs, GaAs и GaAs:Si (концентрация носителей заряда $n \sim 10^{17}$ см$^{-3}$).

В процессе препарирования поперечного среза образцов A (Ge/Si) и B (Ge/Si/КНИ) для исследования методами ПЭМ, выколотые от них пластинки склеивались лицом к лицу. Поскольку поперечный срез образцов A и B находился в одном ПЭМ-диске, то воздействие от процесса препарирования на оба образца было максимально приближенным, что делает более точным сравнение структурных свойств слоев III-V/Ge образцов A и B с помощью ПЭМ.

Для определения параметров дислокационных фильтров (состав и толщина слоев) проведена отработка методики измерения методом рентгеновской дифрактометрии, которая представлена в приложении Г. Отработка методики осуществлялась на контрольном образце C (GaAs) с дислокационными фильтрами InAlAs/GaAs.

3.3.2 Обработка и обсуждение результатов

3.3.2.1 Толщины слоев $A^{III}B^{V}$/Ge

Методом СПЭМ в режиме светлого поля получены изображения поперечного среза образцов A (Ge/Si) и B (Ge/Si/КНИ)*. Обработка СПЭМ-изображений и оценка толщин слоев III-V/Ge выполнена с помощью программного обеспечения (ПО) Gatan Digital Micrograph и ПО Gwyddion по методике, описанной в приложении Д. Результаты представлены в таблице 3. Полужирными линиями в таблице 3 выделен набор слоев $In_{0,12}Al_{0,88}As/GaAs$, который повторяется последовательно пять раз. Относительно высокая погрешность для слоев $Al_{0,3}Ga_{0,7}As/GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ связана со слабым контрастом между $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ и GaAs на СПЭМ-изображении, что усложняет определение ширины гетерограниц. Состав слоев AlGaAs в

* Во всей диссертации после буквенного обозначения образца в скобках указывается платформа или подложка, на которой проведен рост слоев III-V.

таблице 3 указан в соответствии с заданием на рост и в рамках диссертации не исследован. Состав слоев InAlAs определен методом рентгеновской дифрактометрии (приложение Г).

Таблица 3 — Толщины и скорости роста слоев III-V/Ge образцов A (Ge/Si) и B (Ge/Si/КНИ)

Материал	Толщина, нм				Скорость роста, нм/с			
	Образец A		Образец B		Образец A		Образец B	
	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.
1 Ge	2364,0	±66,0	1018,0	±22,0	≈0,10	—	≈0,10	—
2 $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$	23,5	±11,0	24,5	±11,5	0,24	±0,11	0,25	±0,12
3 GaAs	47,1	±12,0	49,0	±10,4	0,31	±0,08	0,33	±0,07
4 $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$	23,5	±12,0	29,4	±17,5	0,24	±0,11	0,29	±0,18
5 GaAs	675,0	±25,0	691,0	±20,0	—	—	—	—
$In_{0,12}Al_{0,88}As$	6,4	±2,3	7,3	±2,2	0,71	±0,26	0,81	±0,25
GaAs	26,1	±4,5	26,7	±3,0	0,87	±0,15	0,89	±0,10
16 GaAs	871,0	±24,0	903,0	±20,0	0,87	±0,03	0,90	±0,02
Общая толщина слоев III-V по СПЭМ	1800,0	±25,0	1890,0	±13,0	—	—	—	—

Примечания

1 Полужирными линиями выделен набор слоев $In_{0,12}Al_{0,88}As$/GaAs, который повторяется последовательно пять раз.

2 Для слоя GaAs до набора слоев, выделенного полужирными линиями, скорости роста не указаны, так как он состоит из двух частей, выращенных при разных скоростях роста (см. раздел 3.3.1).

3.3.2.2 Исследование влияния слоя SiO_2

Скрытый слой SiO_2 в подложке КНИ образца B (Ge/Si/КНИ) ввиду аморфной структуры и меньшего значения коэффициента термического расширения (КТР) ($0,5\cdot10^{-6}$ °C^{-1} [89]) в сравнении с Si, Ge, GaAs (примерные значения КТР для объемных материалов GaAs, Ge и Si составляют $5,9\cdot10^{-6}$ °C^{-1}; $5,8\cdot10^{-6}$ °C^{-1} и $2,6\cdot10^{-6}$ °C^{-1} соответственно [86]) мог скомпенсировать часть термоупругих деформаций, возникших из-за разницы КТР слоев GaAs/Ge и Si при остывании после ростовых процессов. Например, в работе [89] показана возможность релаксации

остаточных деформаций в готовой структуре с помощью формирования слоя SiO_2 толщиной 1 мкм со стороны подложки и последующего отжига.

Для установления влияния слоя SiO_2 в КНИ на характеристики образца В (Ge/Si/КНИ) методом рентгеновской дифрактометрии определены угол между кристаллографическими направлениями [001] слоя Si и подложки Si (α_2) и деформации в кристаллографическом направлении [001] слоя Si относительно подложки Si (ε_{Si}), а методом ПЭМ — толщина скрытого слоя SiO_2 (s) до и после роста слоев III-V/Ge/Si. Для определения угла α_2 записывались кривые качания для отражения (004) с широкой щелью перед детектором при четырех углах вращения нормали поверхности держателя образца (φ): 0°; 90°; 180°; 270°. По кривым качания определяли положения максимума пиков (ω) от слоя и подложки. Набор углов (φ, ω) аппроксимировали функцией, соответствующей формуле (5).

$$\omega(\varphi)=\omega_0+\delta\cdot\cos(\varphi-\eta), \qquad (5)$$

где ω_0 — ноль функции $\cos(\varphi-\eta)$;

δ — угол между нормалью к поверхности держателя и кристаллографическим направлением [001] слоя или подложки, рад;

η — азимут кристаллографического направления [001] слоя или подложки в дифрактометре, градус.

Результатом аппроксимации были углы (ω_0, δ, η) для слоя и подложки. Угол α_2 вычисляли по формуле угла между двумя прямыми в пространстве, используя углы (δ, η). Для определения деформаций ε_{Si} записывались 2θ-сканы для отражения (004) отдельно для слоя Si и подложки Si с кристаллом-анализатором перед детектором. По 2θ-сканам определяли положение максимума пиков. С помощью формулы Вульфа-Брэгга вычисляли межплоскостные расстояния, соответствующие семейству плоскостей (001), после чего определяли деформации слоя относительно подложки. Погрешности измерения толщины слоя рассчитывали так, как описано в приложении Д. Погрешности измерений деформации ε_{Si} и угла α_2 рассчитаны с помощью формулы абсолютной погрешности косвенных измерений для доверительной вероятности 0,95. Погрешность деформации ε_{Si} определялась шагом изменения углов 2θ и ω, а угла α_2 — погрешностью в аппроксимации. Результаты вычислений угла α_2, деформации ε_{Si} и толщины s представлены в таблица 4.

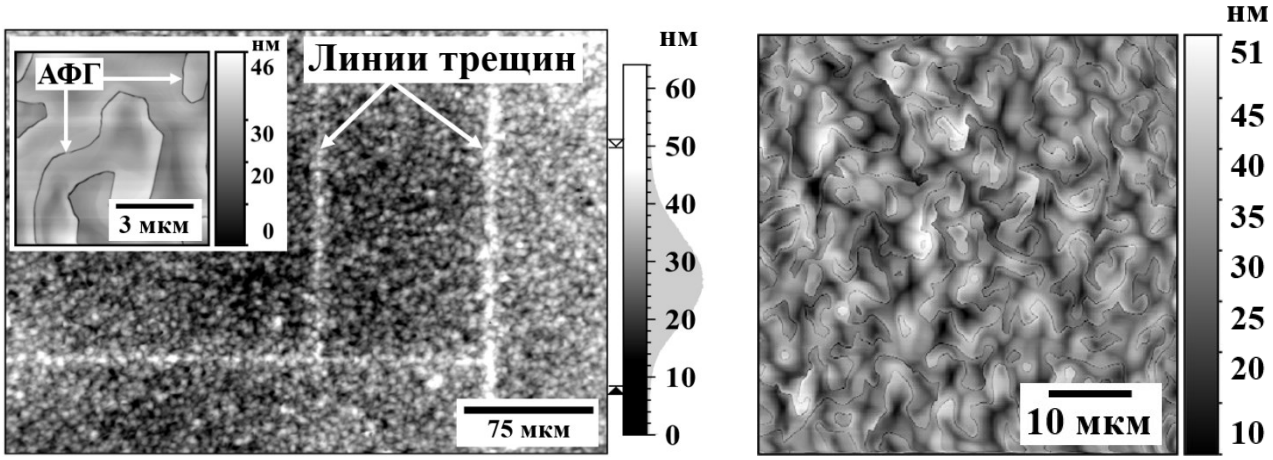
Таблица 4 — Деформация (ε_{Si}), угол разориентации (α_2) слоя Si относительно подложки Si и толщина слоя SiO_2 (s) в подложке «кремний-на-изоляторе» (КНИ)

КНИ	α_2		ε_{Si}, 10^{-3} %	s, нм	
	Номин.	Пред. откл.	±4	Номин.	Пред. откл.
До роста III-V/Ge/Si	234″	±30″	4	206	±7
После роста III-V/Ge/Si	239″	±31″	6	203	±16

Из таблицы 4 видно, что деформации ε_{Si} близки к 0 и так же, как угол α_2 и толщина s, после роста изменились незначительно в пределах погрешности измерений. На основе этих данных можно сделать вывод о том, что скрытый слой SiO_2 в подложке КНИ толщиной ≈200 нм не способствовал компенсации термоупругих деформаций, возникших из-за разницы коэффициентов термического расширения системы слоев GaAs/Ge и Si, и не мог, таким образом, повлиять на характеристики образца B (Ge/Si/КНИ).

3.3.2.3 Морфология поверхности

Поверхность образцов A (Ge/Si) и B (Ge/Si/КНИ) на изображениях, полученных методом интерференционной микроскопии с фазовым сдвигом (PSI-изображение) (рисунок 23 (a)), имеет схожую холмистую структуру с размерами холмов от 2 до 8 мкм в латеральных направлениях и от 4 до 50 нм для образца A (Ge/Si), от 5 до 39 нм для образца B (Ge/Si/КНИ) в вертикальном направлении. На поверхности образца A (Ge/Si), в отличие от образцов B (Ge/Si/КНИ) и C (GaAs), также наблюдаются взаимно перпендикулярные линии в кристаллографических направлениях типа <110> (рисунок 23 (a)). Аналогичные линии на поверхности образцов III-V/Ge/Si с помощью микроскопии Номарского обнаружены в работе [91], где их охарактеризовали как трещины. Наличие трещин в образце A (Ge/Si) подтвердилось при исследовании поперечного среза методом СПЭМ (см. далее). Хорошо известно, что появлению трещин в гетероструктурах III-V/Ge/Si способствуют возникающие в процессе охлаждения после роста слоев III-V/Ge деформации растяжения из-за разницы коэффициентов термического расширения системы слоев III-V/Ge и Si.



(а) (б)

Рисунок 23 — Изображения поверхности образца А (Ge/Si) с антифазными границами (АФГ): (а) PSI-изображение; (б) АСМ-скан 50 на 50 мкм

Примечания

1 Справа на масштабной шкале PSI-изображения приведена гистограмма распределения высот, а на вставке — АСМ-скан поверхности 7 на 7 мкм.

2 Качественный вид PSI-изображений и АСМ-сканов поверхностей образцов А (Ge/Si) и В (Ge/Si/КНИ) одинаковый за исключением отсутствия трещин в образце В.

На АСМ-сканах образцов А (Ge/Si) и В (Ge/Si/КНИ) обнаружены V-образные канавки от антифазных границ (АФГ). Пример АСМ-скана поверхности образца А (Ge/Si) с АФГ приведен на вставке рисунка 23 (а) и на рисунке 23 (б). Появление АФГ обусловлено ростом полярных полупроводников III-V на не отклоненной поверхности неполярного кристалла с ориентацией типа {001}, при котором возможно распределение атомов III и V групп на поверхности двумя разными способами. В качестве неполярного кристалла в исследуемых образцах А (Ge/Si) и В (Ge/Si/КНИ) выступает Ge с кристаллографической ориентацией (001). Профиль V-образной канавки от антифазных границ на АСМ-скане в большей степени имеет несимметричную форму из-за отличающихся скоростей роста разных фаз [43] и зачастую АФГ имеет по бокам гребни с высотой больше, чем уровень поверхности доменов. Несмотря на то, что реальные значения ширины и глубины АФГ могут отличаться от измеренных по АСМ-сканам из-за конечного размера зонда АСМ, было проведено сравнение этих параметров для образцов А (Ge/Si) и В (Ge/Si/КНИ). Глубина антифазных границ как высота самой высокой стенки V-образной канавки АФГ, оцененная по АСМ-сканам площадью 7 на 7 мкм, для образца А (Ge/Si) лежит в диапазоне от 14 до 25 нм, а для образца В (Ge/Si/КНИ) составляет — от 4 до 10 нм. Ширина антифазной границы как ширина на половине высоты самой низкой стенки V-образной канавки АФГ, оцененная по тем же АСМ-сканам, варьируется в диапазонах от 20 до 70 нм для образца А (Ge/Si) и от 100 до 165 нм для образца В (Ge/Si/КНИ). Для АСМ-сканов 50 на 50 мкм глубина

антифазных границ имеет меньшие значения по сравнению с приведенными ранее. Этот факт объясняется увеличением значения латерального разрешения при увеличении поля АСМ-скана. Однако стала более отчетливо проявляться холмистая структура, которая обнаружена на PSI-изображениях. Для образцов А (Ge/Si) и В (Ge/Si/КНИ) максимальный перепад высот, который зафиксирован на АСМ-сканах 50 на 50 мкм, составляет 59 нм. Стоит отметить, что на PSI-изображениях не обнаружены антифазные границы ввиду того, что латеральное разрешение в данном случае больше, чем ширина АФГ.

Таким образом, в образцах А (Ge/Si) и В (Ge/Si/КНИ) можно выделить две особенности поверхности: антифазные границы с относительно резкими перепадами высот (глубина АФГ <25 нм, ширина АФГ несколько десятков нанометров) и холмистая структура, которая имеет бóльшие перепады высот (несколько десятков нанометров) и бóльшие латеральные размеры отдельных холмов (несколько микрометров).

Среднеквадратичная шероховатость поверхности (RMS) образцов А (Ge/Si), В (Ge/Si/КНИ), С (GaAs), рассчитанная по АСМ-сканам с использованием программного обеспечения (ПО) Gwyddion и по PSI-изображениям в ПО Leica Map, представлена в таблице 5. Плотность антифазных границ, рассчитанная по АСМ-сканам с использованием ПО Gatan Digital Micrograph как длина АФГ, деленная на площадь изображения, и доля площади антифазных доменов, рассчитанная в ПО Gwyddion, также приведены в таблице 5. На АСМ-сканах образцов А (Ge/Si) и В (Ge/Si/КНИ), по которым проводился расчет RMS, присутствовали антифазные границы. Для расчета RMS образца А (Ge/Si) использовались PSI-изображения без трещин.

Таблица 5 — Среднеквадратичная шероховатость поверхности (RMS), рассчитанная по АСМ-сканам и PSI-изображениям образцов А (Ge/Si), В (Ge/Si/КНИ), С (GaAs); плотность антифазных границ (АФГ) и доля площади антифазных доменов (АФД), оцененная по АСМ-сканам 50 на 50 мкм поверхности образцов А и В

Образец	RMS, нм				Плотность АФГ, мкм$^{-1}$ ±0,01	Доля площади АФД ±0,01
	АСМ		PSI			
	7 на 7 мкм	50 на 50 мкм	351 на 264 мкм			
			Номин.	Пред. откл.		
А	6,4	9,1	5,1	±0,2	0,63	0,50
В	4,1	8,5	4,9	±0,2	0,41	0,50
С	1,6	1,9	0,9	±0,1	—	—

Примечания

1 Погрешность значения RMS, рассчитанной по PSI-изображениям определялась как стандартное отклонение по пяти PSI-изображениям поверхности образца.

2 Погрешности плотности АФГ и доли площади АФД обусловлены возможной ошибкой в обработке изображения.

Достаточно высокое значение среднеквадратичной шероховатости поверхности (RMS) образца C (GaAs) на подложке GaAs, (>1 нм) может быть связано с использованием слоев III-V с различными значениями параметра решеток ($Al_{0,3}Ga_{0,7}As$; GaAs; $In_{0,12}Al_{0,88}As$). Известно, что разница параметра решеток материалов гетероструктуры имеет критическое значение в развитии шероховатости поверхности [127]. Также из таблицы 5 видно, что рельеф поверхности образцов A (Ge/Si) и B (Ge/Si/КНИ) более развит, чем образца C (GaAs). По данным интерференционной микроскопии с фазовым сдвигом значения RMS образцов A и B достаточно близки друг к другу. Исследование поверхности методом АСМ говорит о том, что среднеквадратичная шероховатость поверхности образца B меньше, чем образца A, однако относительная разница уменьшается с увеличением площади измерения. Относительно большую разницу RMS образцов A и B на АСМ-сканах 7 на 7 мкм можно объяснить отсутствием существенных перепадов высот и меньшим значением глубины антифазных границ для образца B. Увеличение RMS и уменьшение ее относительной разницы для образцов A и B на АСМ-сканах 50 на 50 мкм по сравнению с АСМ-сканами 7 на 7 мкм связано с уменьшением влияния на шероховатость антифазных границ и увеличением влияния на шероховатость холмистой структуры. Стоит отметить, что порядок величин линейной плотности антифазных границ (АФГ) для образов A и B совпадает. Однако более точное сравнение поверхности образцов A и B по плотности АФГ некорректно, поскольку использовались разные подложки, которые имели отличные друг от друга небольшие <0,5° разориентации от кристаллографического направления [001], что было установлено методом рентгеновской дифрактометрии. Хорошо известно, что небольшое отклонение от сингулярной поверхности может привести к изменению плотности антифазных границ [43].

3.3.2.4 Структурные свойства

Сравнение сруктурных свойств

Для сравнения структурных свойств образцов использовались методы рентгеновской дифрактометрии (РД), СПЭМ и селективное травление дефектов. Методом РД записывались ω-сканы образцов A (Ge/Si) и B (Ge/Si/КНИ) с кристаллом-анализатором перед детектором, чтобы разделить пики от GaAs и Ge, а также кривая качания образца C (GaAs) с широкой щелью перед

детектором для отражения (004) в качестве эталона. Следует отметить, что, поскольку рентгеновское излучение в данных образцах проникает в подложку, значение полной ширины на полувысоте (FWHM) пика GaAs в образце C (GaAs) несет информацию как о подложке GaAs, так и об эпитаксиальных слоях GaAs. Методом СПЭМ для каждого образца A (Ge/Si) и B (Ge/Si/КНИ) получен ряд изображений поперечного среза общей длиной до 45 мкм. На совмещенных друг с другом СПЭМ-изображениях рассчитывалось значение линейной плотности прорастающих дислокаций (Линейная ППД). Подсчет прорастающих дислокаций велся в пределах глубины 100 нм для верхнего слоя GaAs (Поверхность) и для слоя Ge (Ge), а также в пределах глубины 100 нм под дислокационными фильтрами (ДФ). Значение плотности «ямок» травления от прорастающих дислокаций (EPD) рассчитано по изображениям поверхности, полученным с помощью оптического микроскопа (ОМ-изображение), с размерами 48 на 48 мкм и в областях между антифазными границами площадью 100 мкм^2. Результаты сравнения структурных свойств представлены в таблице 6.

Таблица 6 — Значение полной ширины на полувысоте (FWHM) пиков GaAs и Ge для отражения (004); плотность «ямок» травления от прорастающих дислокаций (EPD), рассчитанная по ОМ-изображениям (48 на 48 мкм) и в областях 100 мкм^2 без антифазных границ и линейная плотность прорастающих дислокаций (Линейная ППД), достигших гетерограницы AlGaAs/Ge (Ge), дислокационных фильтров (ДФ) и поверхности структуры (Поверхность) для образцов A (Ge/Si/КНИ), B (Ge/Si/КНИ), C (GaAs)

Образец	FWHM		EPD, 10^6 см$^{-2}$		Линейная ППД, мкм$^{-1}$					
					Ge		ДФ		Поверхность	
	GaAs	Ge	48[2] мкм^2	100 мкм^2	Номин	Пред откл.	Номин	Пред. откл.	Номин	Пред. откл.
A	166″	129″	15,0	45,0	1,26	±0,10	1,39	±0,11	0,54	±0,04
B	117″	137″	5,0	15,0	0,09	±0,01	0,11	±0,01	0,07	±0,01
C	13″	—	0,6	0,6	—	—	—	—	—	—

Примечания

1 Длина расчета линейной ППД составляла до 45 мкм.

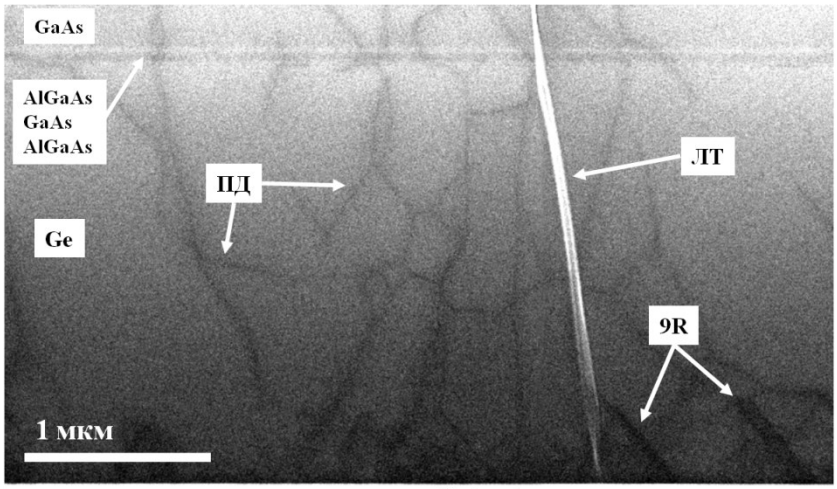
2 Подсчет прорастающих дислокаций велся в пределах глубины 100 нм.

Значение полной ширины на полувысоте (FWHM) пика от GaAs в образце C (GaAs) на порядок ниже, чем в образцах A (Ge/Si) и B (Ge/Si/КНИ). Этот факт в большей степени связан с дефектностью эпитаксиальных слоев GaAs в образцах A и B. Меньшее значение FWHM пика от

GaAs на ω-скане образца B указывает на более высокое кристаллическое качество слоев GaAs в образце B по сравнению с образцом A. Оценка качества верхних слоев GaAs методом селективного травления дефектов и методом СПЭМ подтверждает эти результаты (таблица 6). Большее значение плотности «ямок» травления от прорастающих дислокаций (EPD) в областях без антифазных границ (АФГ) указывает на тот факт, что АФГ мешают подсчету EPD и для более точной оценки плотности прорастающих дислокаций лучше использовать области без АФГ. Данный факт подтвердился при исследовании поперечного среза образцов методом СПЭМ (см. далее).

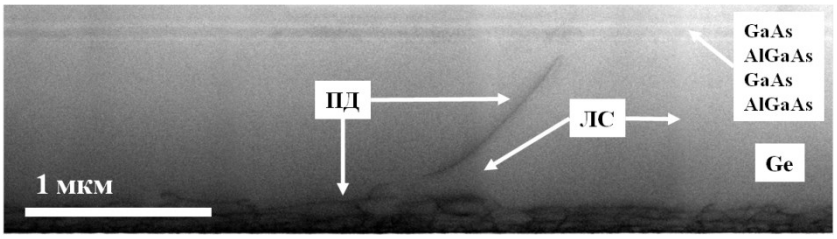
Достаточно трудно сравнивать кристаллическое качество слоя Ge образцов A (Ge/Si) и B (Ge/Si/КНИ) по FWHM пика Ge на ω-скане ввиду разных расстояний между рефлексами от GaAs и Ge в обратном пространстве, что было установлено при анализе сканов 2θ-ω для отражения (004) и карт обратного пространства вблизи отражений (004), полученных с использованием кристалла-анализатора перед детектором. В образце B рефлекс от Ge расположен ближе к рефлексу от GaAs. Кроме этого, в образце B рефлекс от GaAs в несколько раз интенсивнее рефлекса от Ge из-за того, что общая толщина слоев GaAs больше толщины слоя Ge в 1,9 раз. Благодаря этому рефлекс от GaAs внес вклад в уширение рефлекса от Ge, однако обратный эффект неощутим. В образце A рефлексы практически не перекрываются друг с другом. Разные расстояния между рефлексами от GaAs и Ge образцов A и B можно наблюдать на картах обратного пространства вблизи отражения (224+) (см. далее рисунок 26).

Оценка кристаллического качества слоев Ge методом СПЭМ в режиме светлого поля показывает, что плотность дислокаций, прорастающих до слоев III-V, выше в образце A (Ge/Si) (таблица 6). В образце B (Ge/Si/КНИ) прорастающие дислокации преимущественно расположены в слое Ge толщиной ~200 нм и образуют в поперечном срезе сетку дислокаций. Данные результаты согласуются с результатами детальных исследований с помощью СПЭМ поперечного среза слоя Ge, выращенного разными методами, описанными в разделе 3.2. Примеры совмещенных друг с другом обзорных СПЭМ-изображений поперечного среза слоя Ge образцов A и B, полученные в режиме светлого поля, представлены на рисунке 24. В отличие от образца B в образце A на СПЭМ-изображениях в области слоя Ge также обнаружены двумерные дефекты, политип 9R и распространяющиеся до поверхности структуры трещины (рисунок 24 (a)).



Подложка Si (001)

(а)



Подложка КНИ (001)

(б)

Рисунок 24 — СПЭМ-изображения в режиме светлого поля поперечного среза (ось зон [110]) слоев III-V/Ge в образцах (а) А (Ge/Si) и (б) В (Ge/Si/КНИ)

Примечание — ПД°— прорастающая дислокация, 9R°— политип 9R-Ge, ЛТ°— линия трещины, ЛС — линия сглаживания после сшивки СПЭМ-изображений.

Антифазные дефекты

На СПЭМ-изображениях в режиме светлого поля образцов А (Ge/Si) и В (Ge/Si/КНИ) в области слоев III-V присутствует контраст, связанный с антифазными границами (АФГ) (рисунок 25, вставка (а)). АФГ образовались на гетерогранице AlGaAs/Ge и распространялись как в ростовом направлении [001], так и под углом к нему. На поверхности структуры антифазные границы сформировали характерную V-образную канавку (рисунок 25, вставки (а), (б)). Из рисунка 25 (вставка (а)) видно, что вдоль АФГ распространяется прорастающая дислокация до поверхности структуры. Это возможно, исходя из соображений, что дислокации компенсируют несоответствие решетки. А как отмечалось ранее (см. раздел 1.1.1.2) в области антифазной границы как раз существует деформация решетки [55]. Таким образом, подтверждается предположение о том, что антифазные границы мешают подсчету «ямок» травления от прорастающих дислокаций (ПД), так как «ямки» травления от АФГ могут скрывать «ямки» травления от ПД.

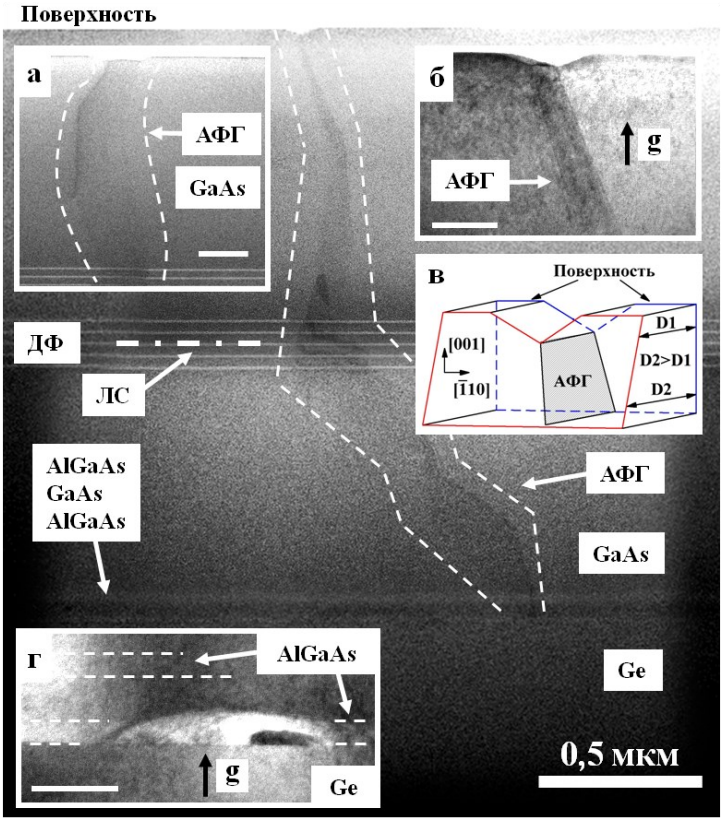


Рисунок 25 — Сшитые друг с другом СПЭМ-изображения, полученные в режиме светлого поля, поперечного среза (ось зон [110]) слоев III-V/Ge/Si образца B (Ge/Si/КНИ) с антифазной границей (АФГ) и со вставками: (а) — СПЭМ-изображение слоев GaAs/ДФ (ДФ — дислокационные фильтры InAlAs/GaAs) образца A (Ge/Si) с АФГ и прорастающей дислокацией (темная ломанная линия); (б), (г) — ПЭМ-изображения, полученные с применением двухпучкового режима при **g**=(002), поперечного среза верхнего слоя GaAs с АФГ и слоев AlGaAs/GaAs/AlGaAs/Ge соответственно образца B (Ge/Si/КНИ); (в) — схема, представляющая собой косой срез ПЭМ-диска и поясняющая уменьшение ширины проекции АФГ на СПЭМ- и ПЭМ-изображениях, с указанием кристаллографических направлений, которые соответствуют и другим изображениям

Примечания

1 Масштабный отрезок на вставках (а), (б), (г) равен 100 нм.

2 На вставке (в) плоскость с АФГ тонирована, красными и синими линиями очерчены передняя и задняя плоскости ПЭМ-диска соответственно, D1 и D2 — расстояния, которые прямо пропорциональны толщине ПЭМ-диска, вблизи поверхности структуры и ближе к подложке соответственно.

3 Штрих-пунктирной линией отмечено расположение линии сглаживания (ЛС) двух СПЭМ-изображений, сшитых друг с другом.

4 На вставке (г) показаны предполагаемые границы слоев AlGaAs.

Отсутствие контраста от доменов разной фазы на СПЭМ-изображениях объясняется тем, что кристаллы с обеих сторон от антифазной границы связаны между собой лишь поворотом на 180° вокруг оси, параллельной любому из шести эквивалентных направлений <110> [165].

Однако домены разной фазы в GaAs можно визуализировать с помощью, например, двухпучкового режима ПЭМ при использовании вектора отражения **g**=(002) [42]. Это возможно благодаря тому, что рефлексы (002) и (00$\bar{2}$) на дифракционной картине (110) от GaAs имеют разные интенсивности [165]. Согласно теоретическим расчетам, исключениями являются случаи, когда исследуемая область на ПЭМ-диске имеет определенные значения толщины [165]. Поскольку рефлекс (002) для домена с одной стороны от антифазной границы (АФГ) эквивалентен рефлексу (00$\bar{2}$) для домена с другой стороны от АФГ, то при использовании двухпучкового режима (**g**=(002)) появляется контраст на ПЭМ-изображении между разными фазами. Примеры ПЭМ-изображений, полученных с применением двухпучкового режима (**g**=(002)), приведены на вставках (б) и (г) рисунка 25. Наличие контраста от антифазных границ на СПЭМ- и ПЭМ-изображениях связано с небольшим смещением решетки одного домена относительно другого [55].

Поскольку ПЭМ-диск имеет малую конечную толщину, а антифзные границы представляют собой на поверхности структуры замкнутые линии неправильной геометрической формы, судя по АСМ-сканам (рисунок 23 (б), вставка 23 (а)), мы можем наблюдать проекцию антифазных границ на СПЭМ- и ПЭМ-изображениях (вставки (а), (б) рисунка 25). Ввиду особенности технологии изготовления ПЭМ-дисков, использованной в диссертации, толщина ПЭМ-диска уменьшается в направлении к поверхности структуры. В связи с этим ширина проекции антифазной границы на СПЭМ- и ПЭМ-изображениях также может уменьшаться по мере приближения антифазной границы к поверхности структуры, что видно на рисунке 25 и вставке (б). Схема, поясняющая уменьшение ширины проекции антифазной границы на СПЭМ- и ПЭМ-изображениях, представлена на вставке (в) рисунка 25.

На вставке (г) рисунка 25 видны островки, предположительно антифазных доменов, которые образовались на гетерогранице зародышевого слоя AlGaAs и слоя Ge. Присутствие островков вдоль гетерограницы AlGaAs/Ge указывает на то, что в образцах A (Ge/Si) и B (Ge/Si/КНИ) происходил 3D рост полупроводников III-V на Ge. Предположение о том, что островки являются антифазными доменами, требует подтверждения, которое будет описано в следующей главе.

Термоупругая деформация слоя Ge и релаксация слоя GaAs

Для определения деформаций и релаксации решетки в эпитаксиальных слоях использовался метод рентгеновской дифрактометрии. Для расчета деформации слоя Ge в направлении перпендикулярном гетерогранице Ge/Si (ε_{zz}), записывались карты обратного пространства вблизи отражений (004) Si и GaAs/Ge. Для определения деформации слоя Ge (ε_{xx}) в латеральных направлениях записывались карты обратного пространства вблизи отражений

(224+) Si и GaAs/Ge в двух взаимно перпендикулярных направлениях типа <110>. Карты собраны в ПО AMASS из набора (2θ-ω)-сканов, каждый из которых получен со смещением вдоль оси ω.

Согласно расчетам, проведенным в разделе 3.2.2, толщина псевдоморфного слоя Ge на Si ≈0,8 нм. Учитывая, что толщина Ge в исследуемых образцах на три порядка больше, слой Ge можно считать полностью релаксированным. Для подтверждения данного предположения проведено исследование методом ПЭМ с высоким разрешением при использовании разных параметров линзовой системы ПЭМ (разные увеличения) совместно с инструментом для измерения деформаций — методом анализа геометрической фазы [150, 151]. Результаты представлены в приложении В. В таком случае ε_{zz} и ε_{xx} представляют собой термоупругие деформации, возникшие при охлаждении структуры до комнатной температуры после роста, что обусловлено различием в коэффициенте термического расширения Ge и Si.

Набор данных 2θ и ω для карт обратного пространства пересчитан в координаты обратного пространства Q_x (2π/нм) и Q_z (2π/нм) с помощью программного обеспечения (ПО) AMASS по формулам (6), (7).

$$Q_x = (2\pi/\lambda)\cdot\big(\cos(\omega) - \cos(2\theta - \omega)\big), \tag{6}$$

$$Q_z = (2\pi/\lambda)\cdot\big(\sin(\omega) + \sin(2\theta - \omega)\big), \tag{7}$$

где λ — длина волны излучения, нм.

Для каждой карты обратного пространства в ПО AMASS определены центры пиков Si (Q_{xSi}, Q_{zSi}), GaAs (Q_{xGaAs}, Q_{zGaAs}) и Ge (Q_{xGe}, Q_{zGe}).

Для расчета ε_{zz} использовались формулы (8)–(10).

$$\varepsilon_{zz} = \text{Perpendicular MM} - \text{Bulk MM}, \tag{8}$$

$$\text{Perpendicular MM} = ((Q_{zSi} - Q_{zGe})/Q_{zGe})\cdot 100\ \%, \tag{9}$$

$$\text{Bulk MM} = ((a_{Ge} - a_{Si})/a_{Si})\cdot 100\ \%, \tag{10}$$

где Perpendicular MM — рассогласование межплоскостных расстояний Ge и Si в кристаллографическом направлении [001], которое рассчитано на основе экспериментальных данных, %;

Bulk MM — рассогласование параметра решеток Ge и Si при релаксации слоя Ge 100 %, которое составляет 4,17 %;

a_{Ge}, a_{Si} — параметры решеток Ge и Si соответственно, нм.

Для расчета ε_{xx} использовались формулы (10)–(12).

$$\varepsilon_{xx}=\text{Parallel MM}-\text{Bulk MM}, \quad (11)$$

$$\text{Parallel MM}=((Q_{xSi}-Q_{xGe})/Q_{xGe}))\cdot 100\%, \quad (12)$$

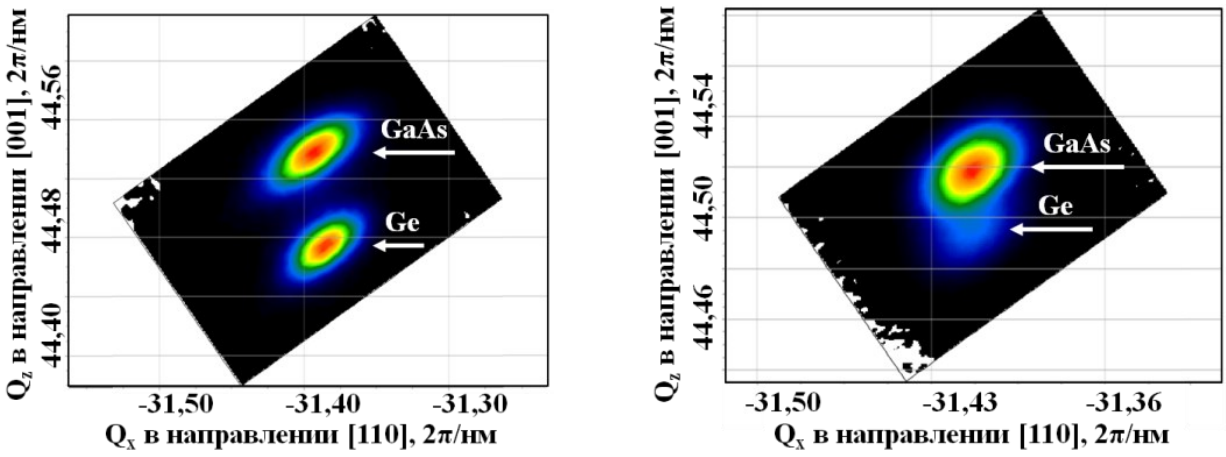
где Parallel MM — рассогласование межплоскостных расстояний Ge и Si в кристаллографическом направлении типа <110>, которое рассчитано на основе экспериментальных данных, %.

Погрешности измерений рассчитаны с помощью формулы абсолютной погрешности косвенных измерений для доверительной вероятности 0,95 и обусловлены шагом изменения углов 2θ и ω. Примеры карт обратного пространства вблизи отражений (224+) GaAs и Ge образцов A (Ge/Si) и B (Ge/Si/КНИ) представлены на рисунке 26. Карты обратного пространства в направлениях [110] и [1$\bar{1}$0] имеют качественно одинаковый вид. Результаты расчета термоупругих деформаций слоя Ge образцов A (Ge/Si) и B (Ge/Si/КНИ) представлены в таблице 7.

Для проверки связи величин ε_{zz} с ε_{xx} в соответствии с теорией упругости использовалась формула (13) зависимости нормальной деформации (ε^*_{zz}) от латеральной деформации (ε_{xx}) в кубической решетке.

$$\varepsilon^*_{zz}=((-2\nu)/(1-\nu))\cdot\varepsilon_{xx}. \quad (13)$$

Коэффициент Пуассона Ge, рассчитанный в статье [163] на основе экспериментальных данных, составляет 0,260. Результаты расчета ε^*_{zz} для Ge приведены в таблице 7.



(а) (б)

Рисунок 26 — Карты обратного пространства вблизи отражений (224+) GaAs и Ge образцов (а) A (Ge/Si) и (б) B (Ge/Si/КНИ), снятые в направлении [110]

Примечания

1 Интенсивность сигнала в каждой точке качественно определяется по температурной шкале и имеет линейный масштаб (не логарифмический).

2 Карты обратного пространства в направлении [1$\bar{1}$0] имеют качественно такой же вид.

Таблица 7 — Деформация сжатия слоя Ge в направлении [001] (ε_{zz}), а также деформация растяжения слоя Ge (ε_{xx}) в направлениях [110] и [1$\bar{1}$0] образцов A (Ge/Si) и B (Ge/Si/КНИ)

Размеры в процентах

Образец	ε_{zz} ±0,01	ε_{xx} ±0,01		ε^*_{zz} ±0,01	
	[001]	[110]	[1$\bar{1}$0]	[110]	[1$\bar{1}$0]
A	–0,12	0,18	0,16	–0,13	–0,11
B	–0,19	0,12	0,11	–0,08	–0,08

Примечание — Величина ε^*_{zz} рассчитана по формуле (13) с использованием ε_{xx} для двух направлений [110] и [1$\bar{1}$0].

Из таблицы 7 видно, что теория упругости хорошо описывает связь ε_{zz} с ε_{xx} для образца A (Ge/Si) в отличие от образца B (Ge/Si/КНИ). Разные значения ε_{zz} и ε^*_{zz} образца B, а также более близкое расположение рефлекса Ge к рефлексу GaAs на картах обратного пространства в образце B (рисунок 26), чем в образце A, можно объяснить присутствием малой доли Si в слое Ge образца B. Формирование твердого раствора Si_xGe_{1-x} с малой долей Si связано с использованием Si-тигля, в который был загружен Ge, в электронно-лучевом испарителе установки Riber SIVA-21 для

молекулярно-пучковой эпитаксии. При высокой скорости роста Ge происходит разогрев Si тигля, что приводит к образованию потока Si [166].

Считая все остаточные деформации термоупругими, оценка доли Si в твердом растворе проведена с использованием координат центров рефлексов Ge и Si на картах обратного пространства вблизи отражений (004) и (224+), формулы Вегарда для параметра решетки и коэффициента Пуассона твердого раствора Si_xGe_{1-x}, а также формулы (13), полагая коэффициент Пуассона для Si равным 0,279 [163]. Варьируя долю Si (x), найден диапазон x, при котором величина ε^*_{zz} соответствовала ε_{zz} в пределах погрешности. Результаты расчетов представлены в таблице 8.

Таблица 8 — Оценка доли Si (x), термоупругих деформаций ε_{zz} и ε_{xx} в твердом растворе Si_xGe_{1-x} образца B (Ge/Si/КНИ)

Размеры в процентах

x, ат. % ±0,2	ε_{zz} ±0,01	ε^*_{zz} ±0,01		ε_{xx} ±0,01	
	[001]	[110]	[1$\bar{1}$0]	[110]	[1$\bar{1}$0]
1,5	–0,13	–0,14	–0,13	0,19	0,17

Оценка доли Si в Si_xGe_{1-x} находится в достаточно хорошем соответствии с результатами вторично-ионной масс-спектрометрии, полученными для слоя Ge, выращенного на подложке Si в такой же установке для молекулярно-пучковой эпитаксии с использованием электронно-лучевого испарителя, которые дают значение ≈1,5 ат. % [166]. В таком случае деформации ε_{xx} и ε_{zz} слоя Si_xGe_{1-x} образца B (Ge/Si/КНИ) совпадают в пределах погрешности с деформациями ε_{xx} и ε_{zz} слоя Ge образца A (Ge/Si). Близкие значения деформаций слоев Ge и Si_xGe_{1-x} (x≈1,5 ат. %) образцов A и B соответственно указывают на то, что образованию трещин в образце A (Ge/Si) кроме деформаций, возникающих из-за различных значений коэффициента термического расширения и рассогласования параметров решеток Si и Ge, способствовали и другие факторы: например, меньшее в два с лишним раза значение толщины подложки, и (или) большее в два с лишним раза значение толщины слоя Ge по сравнению с образцом B.

Что касается релаксации решетки слоя GaAs ($R_{[hkl]}$) и ее анизотропии во взаимно перпендикулярных направлениях <110> ($R_{[110]}$– $R_{[1\bar{1}0]}$), то в образце A (Ge/Si) в направлении [110] — $R_{[110]}$=(36±12) %, в направлении [1$\bar{1}$0] — $R_{[1\bar{1}0]}$=(43±12) %, а в образце B (Ge/Si/КНИ) релаксация GaAs в обоих направлениях близка к 0, однако с большой погрешностью измерений ±38 % ввиду того, что учитывается погрешность измерения доли Si в твердом растворе Si_xGe_{1-x}.

В результате в системе слоев GaAs/Ge/Si анизотропия релаксации GaAs меньше погрешности измерений, а релаксация слоя GaAs в гетероструктуре III-V, выращенной на созданной платформе Si_xGe_{1-x}/Si/КНИ (001) с x=(1,5±0,2) ат. %, близка к 0.

Учитывая незначительную долю атомов Si в решетке твердого раствора Si_xGe_{1-x}, в диссертации платформа Si_xGe_{1-x}/Si/КНИ (001) обозначается как Ge/Si/КНИ (001).

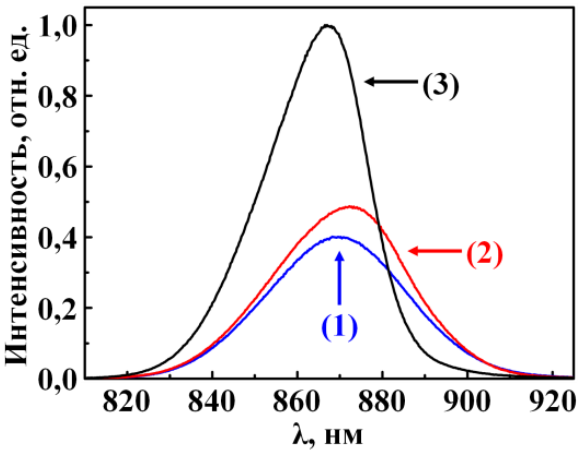
3.3.2.5 Оптические свойства

В качестве источника возбуждения для получения спектров и карт фотолюминесценции (ФЛ) при комнатной температуре использовался Nd:YAG-лазер с длиной волны 532 нм и оптической плотностью мощности 341,7 Вт/см^2. Средние параметры ФЛ пика GaAs и их стандартные отклонения по одинаковой площади образцов с отступом от края как минимум 3 мм представлены в таблице 9. Типичные спектры ФЛ образцов A (Ge/Si), B (Ge/Si/КНИ), C (GaAs) представлены на рисунке 27.

Таблица 9 — Средние параметры фотолюминесценции (ФЛ) пика GaAs и их стандартные отклонения по одинаковой площади образцов A (Ge/Si), B (Ge/Si/КНИ), C (GaAs) с отступом от края как минимум 3 мм при комнатной температуре. FWHM — full width at half maximum (полная ширина на полувысоте)

Образец	λ, нм		Интенсивность		FWHM, нм	
	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.
A	870,7	±3,8	0,40	±0,06	39,2	±5,2
B	871,4	±2,3	0,48	±0,08	39,4	±3,0
C	866,5	±1,9	1,00	±0,18	29,7	±3,5

Примечание — Интенсивность нормирована на максимум пика GaAs образца C.



Зависимости для следующих образцов: 1 — A (Ge/Si); 2 — B (Ge/Si/КНИ); 3 — C (GaAs).

Рисунок 27 — Типичные спектры фотолюминесценции (ФЛ) образцов A (Ge/Si), B (Ge/Si/КНИ), C (GaAs), полученные при комнатной температуре

Примечание — Интенсивность нормирована на максимум пика GaAs образца C.

Хорошо известно, что дефекты в структуре служат центрами безызлучательной рекомбинации, которые приводят к уменьшению интенсивности, а также расширению пика фотолюминесценции [21]. Из таблицы 9 видно, что полная ширина на полувысоте (full width at half maximum, FWHM) пика GaAs образца C (GaAs) в 1,3 раза меньше, а интенсивность в 2 с лишним раза больше, чем для образцов A (Ge/Si) и B (Ge/Si/КНИ). Средние значения по площади FWHM пика GaAs образцов A и B близки по значению, а интенсивность в 1,2 раза выше в случае образца B. Стоит отметить, что результаты рентгеновской дифрактометрии приведены для областей образцов A и B, в которых более существенная разница в FWHM и интенсивности пиков фотолюминесценции (ФЛ) GaAs, чем средние значения по площади: FWHM в 1,1 раза ниже и интенсивность в 1,6 раза выше в образце B. По данным в таблицы 9 также можно сделать вывод о более однородном распределении по площади параметров ФЛ (λ и FWHM) в образце B (Ge/Si/КНИ), чем в образце A (Ge/Si). Сравнение параметров фотолюминесценции свидетельствует о более высоком оптическом качестве слоев GaAs в образце B, чем в образце A, однако они значительно уступают образцу C на подложке GaAs.

Смещение пика фотолюминесценции GaAs образца C на подложке GaAs в коротковолновую область относительно пика ФЛ объемного GaAs (870 нм) связано с эффектом Бурштейна-Мооса. Расчеты по формуле (14) из работы [167] подтверждают данное предположение.

$$E_{max}=1,426+2,4\cdot10^{-14}\cdot n^{2/3}, \quad (14)$$

где E_{max} — максимум пика на спектре фотолюминесценции, эВ;

n — концентрация носителей заряда электронов, $см^{-3}$.

По формуле (14) при $n=10^{17}$ $см^{-3}$ (из задания на рост) E_{max}=1,43 эВ, чему соответствует λ=867 нм, что мы и наблюдаем в эксперименте (таблица 9). Смещение пика фотолюминесценции GaAs образцов A, B относительно образца C (GaAs) в длинноволновую область связано с наличием деформаций в эпитаксиальных слоях GaAs на платформах Ge/Si (образец A) и Ge/Si/КНИ (образец B) [168].

3.3.2.6 Сравнительный анализ

Проведен сравнительный анализ морфологии поверхности, структурных и оптических свойств слоев III-V, выращенных на платформе Ge/Si/КНИ образца B с подобными III-V-гетероструктурами, выращенными на платформе Ge/Si в других работах.

В работе [A7] гетероструктура III-V выращена на буферных слоях Ge/Si и точно ориентированной подложке Si (001). На поверхности такой структуры, как и в образце B (Ge/Si/КНИ), обнаружены антифазные границы (АФГ). Несмотря на то, что некорректно сравнивать плотность АФГ на поверхности структур, выращенных на разных подложках и с разными зародышевыми слоями III-V, стоит отметить, что плотность АФГ образца B (Ge/Si/КНИ) и образца из публикации [A7] одного порядка, 0,4 и 0,3 $мкм^{-1}$ соответственно, что указывает на схожие особенности поверхности гетероструктур III-V/Ge/Si (001) и III-V/Ge/Si/КНИ (001).

В работе [169] показано, что полная ширина на полувысоте (FWHM) пика фотолюминесценции (ФЛ) GaAs в III-V-гетероструктуре, выращенной на платформе Ge/Si примерно в 1,6 раза больше, чем FWHM пика ФЛ GaAs, выращенного на подложке GaAs при условии одинакового уровня легирования слоев GaAs. Отношение FWHM пиков фотолюминесценции GaAs образца B на подложке КНИ и образца C на подложке GaAs составляет 1,3. Учитывая, что III-V-гетероструктура в образцах B (Ge/Si/КНИ) и C (GaAs) выращена в едином ростовом процессе, уровень легирования слоев GaAs в этих образцах можно считать примерно одинаковым. Данный факт говорит о достаточно близких оптических свойствах слоев GaAs, выращенных на платформах Ge/Si и Ge/Si/КНИ.

Важно отметить, что в упомянутых выше работах [A7, 169] слой Ge сформирован таким же методом, как и в образце B (Ge/Si/КНИ), — молекулярно-пучковая эпитаксия с использованием режима двухстадийного роста и термоциклического отжига в вакууме.

В публикации [91] в верхних слоях гетероструктур III-V, выращенных на подложке Si через буферный слой Ge значение плотности «ямок» травления от дислокаций (EPD) составляет ~10^7 см$^{-2}$, что сравнимо с EPD верхнего слоя GaAs в образце B (Ge/Si/КНИ) на подложке КНИ и указывает на близкие структурные свойства слоев III-V.

3.3.3 Выводы

Слой GaAs выращен через зародышевые слои AlGaAs/GaAs/AlGaAs, дислокационные фильтры AlInAs/GaAs и с применением термоциклического отжига на платформах Ge/Si (001) (образец A), Ge/Si/КНИ (001) (образец B) и подложке GaAs (001) (образец C). Слой Ge в платформе Ge/Si (001) сформирован методом газофазного осаждения с разложением моногермана на «горячей проволоке», а в платформе Ge/Si/КНИ (001)°— методом молекулярно-пучковой эпитаксии с применением режима двухстадийного роста и термоциклического отжига в вакууме (МПЭ). Рост слоев $A^{III}B^{V}$ в образцах A, B и C осуществлялся в одном процессе методом химического осаждения металлорганических соединений из газовой фазы.

Методом рентгеновской дифрактометрии установлено, что скрытый слой SiO_2 в КНИ толщиной ≈200 нм не способствовал компенсации термоупругих деформаций, возникающих из-за разницы коэффициента термического расширения слоев GaAs/Ge и Si, и не мог таким образом повлиять на характеристики образца B (Ge/Si/КНИ). Следовательно, сравнение уровня развития методов роста Ge для интеграции с III-V путем сравнения образцов A (Ge/Si) и B (Ge/Si/КНИ) можно считать достоверным.

Исследование морфологии поверхности позволило, во-первых, обнаружить эффект «растрескивания» в образце A (Ge/Si) и, во-вторых, выделить две особенности поверхности образцов A и B: антифазные границы, которые имеют в большей степени несимметричный профиль с относительно резкими перепадами высот (глубина АФГ <25 нм, ширина АФГ несколько десятков нанометров), и холмистая структура, которая имеет бóльшие перепады высот (несколько десятков нанометров) и бóльшие латеральные размеры отдельных холмов (несколько микрометров).

Методом рентгеновской дифрактометрии обнаружено, что в образце B (Ge/Si/КНИ) сформировался слой не чистого Ge, а твердого раствора Si_xGe_{1-x} с долей Si=(1,5±0,2) ат. %.

Термоупругие деформации слоя Ge как в направлении перпендикулярном гетерогранице Ge/Si, так и в латеральных направлениях типа <110> совпадают в пределах погрешности для образцов A (Ge/Si) и B (Ge/Si/КНИ). Этот результат указывает на то, что «растрескиванию» в образце A кроме деформаций, возникающих из-за различных значений коэффициентов термического расширения и рассогласования параметров решеток Si и Ge, способствовали и другие факторы°— например, меньшее в два с лишним раза значение толщины подложки и (или) большее в два с лишним раза значение толщины слоя Ge по сравнению с образцом B (Ge/Si/КНИ). Релаксация слоя GaAs в гетероструктуре $A^{III}B^{V}$, выращенной на созданной платформе Ge/Si/КНИ (001) с долей Si в решетке Ge (1,5±0,2) ат. %, близка к 0.

Исследование структурных и оптических свойств слоев GaAs свидетельствует о преимуществе образца B (Ge/Si/КНИ) перед образцом A (Ge/Si). При этом они уступают структурным и оптическим свойствам образца C (GaAs). Методом сканирующей просвечивающей электронной микроскопии (СПЭМ) установлено, что линейная плотность прорастающих дислокаций (ПД) как в слое Ge, так и в слоях $A^{III}B^{V}$ в образце B (Ge/Si/КНИ) на порядок меньше, чем в образце A (Ge/Si).

С помощью метода селективного травления дефектов обнаружено и подтверждено методом СПЭМ, что наличие антифазных границ (АФГ) увеличивает ошибку в оценке плотности «ямок» травления от ПД и для увеличения точности необходимо использовать области без АФГ.

Использование двухпучкового режима просвечивающей электронной микроскопии с отражением **g**=(002) позволило обнаружить островки III-V вдоль гетерограницы зародышевого слоя AlGaAs и слоя Ge. Наличие островков указывает на 3D рост полупроводников $A^{III}B^{V}$ на Ge. Данные островки могут быть антифазными доменами. В главе 4 описаны результаты исследований, которые позволят ответить на этот вопрос.

Сравнительный анализ гетероструктур $A^{III}B^{V}$ на Ge/Si/КНИ (001) образца B с подобными гетероструктурами на платформах Ge/Si (001) из других работ позволил сделать вывод о схожих особенностях морфологии поверхности, структурных и оптических свойствах слоев $A^{III}B^{V}$.

Анализ результатов указывает на то, что метод молекулярно-пучковой эпитаксии с двухстадийным режимом роста Ge и термоциклическим отжигом в вакууме (МПЭ) более развит, чем метод газофазного осаждения с разложением моногермана на «горячей проволоке» (HWCVD) для создания платформы, направленной на интеграцию с полупроводниками $A^{III}B^{V}$ методом МОС-гидридной эпитаксии. Данный вывод согласуется с результатами раздела 3.2, где проводилось сравнение структурных свойств слоев Ge, выращенных разными методами HWCVD и МПЭ на подложках Si (001) через буферный слой Si, что свидетельствует об его достоверности. Кроме того установлено, что метод МПЭ может быть использован для формирования слоя Ge в платформе Ge/Si/КНИ (001), ориентированной на эпитаксиальный рост слоев $A^{III}B^{V}$ со

структурными и с оптическими свойствами, не уступающими слоям $A^{III}B^{V}$, сформированным на платформе Ge/Si (001). Однако требуется дальнейшее развитие технологии монолитной интеграции $A^{III}B^{V}$ с КНИ через эпитаксиальные буферные слои $A^{III}B^{V}$/Ge/Si для приближения к характеристикам гетероструктур, получаемых на подложках GaAs.

3.4 Выводы к главе 3

Проведенные в третьей главе исследования позволили отобрать подложки класса «кремний-на-изоляторе» и метод роста слоя Ge для создания платформы Ge/Si/КНИ (001), направленной на эпитаксию на ней полупроводников $A^{III}B^{V}$ со структурными и с оптическими свойствами, не уступающими полупроводникам $A^{III}B^{V}$, выращенным на платформе Ge/Si (001). В качестве подложек класса «кремний-на-изоляторе» выбраны подложки «кремний-на-изоляторе», изготовленные по технологии Smart Cut. В качестве метода роста слоев Ge/Si — метод молекулярно-пучковой эпитаксии с применением двухстадийного режима роста слоя Ge и термоциклического отжига в вакууме.

Созданная платформа Ge/Si/КНИ (001) имеет следующие свойства: решетка слоя Ge полностью релаксирована, содержит атомов Si (1,5±0,2) ат. %, слой Ge имеет толщину (1075±85) нм, среднеквадратичная шероховатость поверхности меньше 1 нм (≈0,6 нм), плотность прорастающих дислокаций ~10^7 см$^{-2}$ по «ямкам» травления (линейная плотность прорастающих дислокаций (0,09±0,01) мкм$^{-1}$ на участках поперечного среза общей длиной ≈95 мкм). Стоит отметить, что при создании платформы Ge/Si/КНИ достигнуты все критерии, указанные в разделе 1.5. Следовательно, платформы Ge/Si/КНИ (001) имеют достаточно низкие значения среднеквадратичной шероховатости поверхности и плотности прорастающих дислокаций для отработки в перспективе технологии формирования на них высокого кристаллического и оптического качества гетероструктур $A^{III}B^{V}$ на основе квантовых точек, излучающих в области прозрачности кремния.

Исходя из результатов главы 3 выносится на защиту положение № 1 — способ создания платформы Ge/Si/КНИ (001) пригодной для МОС-гидридной эпитаксии светоизлучающих гетероструктур $A^{III}B^{V}$ путем нанесения Ge на подложку «кремний-на-изоляторе» методом двухстадийной молекулярно-пучковой эпитаксии через буферный слой Si с последующим применением термоциклического отжига в вакууме.

ГЛАВА 4. ИССЛЕДОВАНИЕ МОС-ГИДРИДНОЙ ЭПИТАКСИИ $A^{III}B^{V}$

Данная глава посвящена исследованию и внедрению методов уменьшения плотности дефектов и шероховатости поверхности в выращиваемых гетероструктурах III-V на созданной платформе Ge/Si/КНИ (001) и установлению возможности формирования на ней светоизлучающих гетероструктур III-V. Для всех образцов на созданной платформе Ge/Si/КНИ (001) использовались фрагменты из одной подложки КНИ (001), что позволило исключить влияние разного отклонения среза подложки.

Установлены параметры роста эпитаксиальных слоев III-V методом МОС-гидридной эпитаксии на созданной платформе Ge/Si/КНИ (001), позволяющие подавить основную плотность антифазных дефектов в буферных слоях. Представлены два набора дислокационных фильтров III-V, позволяющие уменьшить плотность прорастающих дислокаций (ППД) в слоях III-V, выращенных на Ge/Si/КНИ (001), из которых выбран наиболее эффективный в уменьшении ППД. Продемонстрирована эффективность in-situ отжига в уменьшении плотности антифазных границ и в изменении режима роста III-V с 2D-островокового на наиболее благоприятный для заращивания антифазных доменов ступенчатый режим роста. Кроме этого исследована эффективность системы зародышевых слоев $Al_{0,3}Ga_{0,7}As/GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ в подавлении взаимной диффузии, прорастающих дислокаций и антифазных границ в системе слоев III-V/Ge на точно ориентированной подложке (001), которой может быть, как Si, так и КНИ.

Для определения возможности создания светоизлучающих гетероструктур III-V на созданной платформе Ge/Si/КНИ (001) представлены результаты формирования и исследования светоизлучающего p-i-n диода с активной областью из трех квантовых ям InGaAs/GaAs. Комплексное исследование контрольного образца на подложке GaAs (001) разными методами позволило обозначить направления исследований с целью улучшения кристаллического качества квантовых ям.

4.1. Режимы роста и параметры светоизлучающих гетероструктур

4.1.1 Режимы роста светоизлучающих гетероструктур

В качестве подложек использовались двухдюймовая полуизолирующая подложка GaAs и подложка КНИ размером 40 на 30 мм, выколотая с применением скрайбирования из исходной подложки КНИ. Подложки имели кристаллографическую ориентацию (001) с отличной друг от друга небольшой, <0,5°, разориентацией от направления [001], что установлено методом рентгеновской дифрактометрии.

Создание платформы Ge/Si/КНИ (001) описано в разделе 3.3.1. Рост гетероструктур III-V на подложке GaAs (001) (образец D) и на платформе Ge/Si/КНИ (001) (образец E) проводился в установке CCS для МОС-гидридной эпитаксии при низком давлении (100 мбар) двумя разными процессами. Установка CCS выбрана в связи с тем, что она оснащена дополнительным модулем EpiCurveTT, который позволяет проводить оптическими методами in-situ измерения отражательной способности и кривизны гетероструктуры. Во время процесса роста слоев III-V на платформе Ge/Si/КНИ (001) (образец E) на пьедестале также присутствовала подложка-спутник GaAs для наиболее точной оценки разницы между температурами роста на подложках GaAs и платформе Ge/Si/КНИ, а также для сравнения результатов in-situ измерения отражательной способности и кривизны. Применение оптического метода измерения температуры роста во время МОС-гидридной эпитаксии и подложки-спутника GaAs позволило скорректировать температуру роста на платформе Ge/Si/КНИ (001) таким образом, чтобы она максимально близко соответствовала температуре роста на подложке GaAs, используемой во время другого процесса роста (Образец D). Использование такого подхода позволило гарантировать близкие значения толщины, состава и уровня легирования слоев светоизлучающих гетероструктур III-V на GaAs (образец D) и Ge/Si/КНИ (образец E).

Процессы для контрольного образца D на подложке GaAs (001) и образца E на созданной платформе Ge/Si/КНИ (001) отличались температурой отжига по Agrus: 710 °C и 730 °C соответственно — и наличием III-V буферных слоев и термоциклического отжига с выдержкой при высокой температуре ≈725 °C (по Agrus) в течение общего времени ≈30 мин в образце E (Ge/Si/КНИ).

Отжиг подложки GaAs и платформы Ge/Si/КНИ проводился в атмосфере водорода с арсином. Во время нагрева до температуры отжига в процессах при определенных значениях температуры по термопаре проводилась стабилизация температуры для оценки разницы в

значениях температур на подложке GaAs и платформе Ge/Si/КНИ, измеренных оптическими методами. В процессе E (Ge/Si/КНИ) после отжига температура была снижена до 690 °C (по Argus) и рост слоев III-V начинался с зародышевого слоя $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ и формирования четырех периодов GaAs/$Al_{0,3}Ga_{0,7}As$. В процессе E (Ge/Si/КНИ) по сравнению с процессом B (Ge/Si/КНИ) увеличены скорости роста слоев GaAs и AlGaAs с (0,33±0,07) и (0,25±0,12) нм/с до (0,71±0,07) и (1,33±0,19) нм/с соответственно за счет увеличения потока веществ с элементами III группы при сохранении отношения V/III равным ≈80. Увеличение скорости роста зародышевых слоев использовано для исследования влияния скорости роста на распространение антифазных границ (АФГ). Использование системы зародышевых слоев $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$/GaAs/$Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ обусловлено высокой эффективностью в уменьшении плотности АФГ [95, 96]. Кроме этого важным является установить эффективность зародышевого слоя $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ в подавлении взаимной диффузии атомов на гетерогранице с Ge и эффективность вставки $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ совместно с термоциклическим отжигом в уменьшении плотности прорастающих дислокаций в гетероструктурах III-V/Ge на Si (001). Четыре периода GaAs/$Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ использованы для того, чтобы проследить развитие морфологии фронта роста на начальных этапах методами СПЭМ и in-situ измерения отражательной способности. Материал AlGaAs на СПЭМ-изображениях будет более светлым по сравнению с GaAs и Ge, и по изгибам линии от слоев AlGaAs на СПЭМ-изображениях можно оценивать рельеф фронта роста в зависимости от толщины эпитаксиальных слоев. В методе in-situ измерения отражательной способности границы от разных материалов дадут осцилляции, по поведению которых можно судить о шероховатости фронта роста при использовании излучения на 405 нм. После четырех периодов GaAs/$Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ выращен слой GaAs при тех же параметрах роста, что и слой GaAs в системе GaAs/$Al_{0,3}Ga_{0,7}As$. Далее проводился термоциклический отжиг (ТЦО). Его отличие от ТЦО, используемого в образцах A (Ge/Si), B (Ge/Si/КНИ) и C (GaAs), заключается в следующем. Во-первых, он начинался не с увеличения температуры, а с уменьшения для того, чтобы увеличить количество резких перепадов температур с меньшими затратами по времени. Известно, что термические напряжения, возникающие при резких перепадах температур, являются движущей силой для миграции прорастающих дислокаций, и с увеличением их плотности эффективность ТЦО по подавлению прорастающих дислокаций растет (см. раздел 1.2.2.1). Во-вторых, присутствовала выдержка при высокой температуре, так как известно, что ex-situ высокотемпературный отжиг способствует уменьшению плотности антифазных границ (см. раздел 1.2.1.2). Кроме этого актуальными являются исследования поведения антифазных границ после отжига в объеме III-V. После термоциклического отжига начинался рост светоизлучающей структуры, которая была одинакова для образцов D (GaAs) и E (Ge/Si/КНИ).

Температура роста светоизлучающей структуры, которая представляла собой p-i-n структуру с тремя квантовыми ямами (КЯ) InGaAs/GaAs в i-области, поддерживалась на значении 635 °C кроме температуры роста сильнолегированного углеродом слоя p+GaAs, в котором температура снижалась во время роста до значения 510 °C. Время установление требуемой температуры составляло 40% от времени роста слоя p+GaAs. Снижение температуры роста требуется для увеличения количества активированных атомов углерода в решетке GaAs с целью увеличения количества носителей заряда дырок [170]. Снижение температуры именно во время роста слоя p+GaAs используется для сохранения низкого значения среднеквадратичной шероховатости поверхности гетероструктур, содержащих достаточно толстые слои AlGaAs с высоким содержанием Al. Так как в перспективе планируется отработать технологию роста лазерных гетероструктур, работающих в области прозрачности Si (λ>1100 нм), то использование слоев AlGaAs с высоким содержанием алюминия необходимо для увеличения эффективности работы лазера. Последовательность слоев светоизлучающей структуры в ростовом направлении: n+GaAs ($n=2\cdot10^{18}$ см$^{-3}$), n-GaAs ($n=5\cdot10^{17}$ см$^{-3}$), i-GaAs, три КЯ $In_{0,14}Ga_{0,86}As$/GaAs, i-GaAs, p-GaAs ($p=3\cdot10^{16}$ см$^{-3}$), p-GaAs ($p=5\cdot10^{17}$ см$^{-3}$), p+GaAs ($p=4\cdot10^{19}$ см$^{-3}$). Концентрации носителей заряда указаны в соответствии с заданием на рост. Доля In в $In_{0,14}Ga_{0,86}As$ установлена методом рентгеновской дифрактометрии (см. далее). Реальные значения определены методом электрохимического CV профилирования и представлены далее. Слои с концентрацией носителей заряда $5\cdot10^{17}$ см$^{-3}$ использовались для уменьшения перепада энергетических зон. Поскольку подвижность дырок ниже, то для компенсации потока электронов часть слоя i-GaAs после квантовых ям была легирована углеродом до концентрации носителей заряда $p=3\cdot10^{16}$ см$^{-3}$. Для улучшения резкости гетерограниц квантовых ям использовались следующие подходы: пауза перед подачей веществ с элементами III группы перед и после роста слоя InGaAs, задержка подачи TMGa перед ростом слоя InGaAs и задержка прекращения подачи TMGa после роста слоя InGaAs [118].

Технология изготовления светоизлучающих p-i-n диодов описана в разделе 2.2.

4.1.2 Толщины слоев $A^{III}B^{V}$/Ge

С помощью ПЭМ нельзя измерить толщины всех III-V слоев образцов D (GaAs) и E (Ge/Si/КНИ) в отдельности, так как невозможно визуализировать контраст между слоями GaAs разного уровня легирования. Однако можно использовать фундаментальные знания о

зависимостях скорости роста III-V методом МОС-гидридной эпитаксии от различных параметров, чтобы оценить толщины отдельных слоев.

Методом СПЭМ по методике, представленной в приложении Д, измерены по отдельности толщины слоев с порядковыми номерами 1–8, 14–18, общая толщина слоев под номерами 19–22 и общая толщина гетероструктуры III-V образца E (Ge/Si/КНИ), а также измерены по отдельности толщины слоев с порядковыми номерами 14–18 и общая толщина слоев под номерами 19–22 образца D (GaAs) (таблица 10). Для оценки толщины остальных слоев применялись следующие фундаментальные знания [171].

Во-первых, в диффузионном режиме скорость роста слабо зависит от температуры роста.

Примечание — Рост слоев III-V в светоизлучающей гетероструктуре кроме слоя p+GaAs под порядковым номером 22 происходил в диффузионном режиме.

Во-вторых, скорость роста в диффузионном режиме напрямую зависит от потока веществ с элементами III группы таблицы Менделеева при неизменных других параметрах роста.

Так как присутствовал градиент температуры во время роста слоя p+GaAs в кинетическом режиме, то и скорость роста могла сильно изменяться. Таким образом, скорость роста, указанная в таблице 10 для слоя с порядковым номером 22, является средним значением по толщине и сильно зависит от соотношения полного времени роста и времени установления температуры роста.

Результаты измерения и оценки толщин слоев образцов D (GaAs) и E (Ge/Si/КНИ) представлены в таблице 10. Полужирными линиями в таблице 10 выделены наборы слоев GaAs/AlGaAs и GaAs/InGaAs, которые повторяются последовательно три раза. Состав слоев AlGaAs в таблице 10 указан в соответствии с заданием на рост и в рамках диссертации не исследован. Состав слоев InGaAs установлен методом рентгеновской дифрактометрии (приложение А).

Таблица 10 — Толщины и скорости роста слоев образцов D (GaAs) и E (Ge/Si/КНИ)

Материал	Толщина, нм				Скорость роста, нм/с			
	Образец D		Образец E		Образец D		Образец E	
	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.
1 Ge	—	—	1148,3	±5,5	—	—	≈0,10	—
2 $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$	—	—	19,0	±4,8	—	—	0,95	±0,24
3 GaAs	—	—	58,5	±6,1	—	—	0,82	±0,09

Продолжение таблицы 10

Материал	Толщина, нм				Скорость роста, нм/с			
	Образец D		Образец E		Образец D		Образец E	
	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.
$Al_{0,3}Ga_{0,7}As$	—	—	26,5	±3,7	—	—	1,33	±0,19
GaAs	—	—	51,0	±4,6	—	—	0,71	±0,07
10 GaAs	—	—	510,0	±46,0	—	—	0,71	±0,07
11 GaAs:Si ($n=2\cdot10^{18}$ см$^{-3}$)	≈2500	—	2550,7	±230,1	≈0,70	—	0,71	±0,07
12 GaAs:Si ($n=5\cdot10^{17}$ см$^{-3}$)	≈100	—	102,1	±9,3	≈0,70	—	0,71	±0,07
13 GaAs	108,0	±4,0	111,0	±4,0	0,60	±0,03	0,62	±0,03
$In_{0,14}Ga_{0,86}As$	6,6	±1,1	6,5	±1,2	0,74	±0,13	0,73	±0,14
GaAs	54,0	±2,0	55,5	±2,0	0,60	±0,03	0,62	±0,03
20 GaAs:C ($p=3\cdot10^{16}$ см$^{-3}$)	54,0	±2,0	55,5	±2,0	0,60	±0,03	0,62	±0,03
21 GaAs:C ($p=5\cdot10^{17}$ см$^{-3}$)	593,2	±3,7	102,1	±9,3	—	—	0,71	±0,07
22 GaAs:C ($p=4\cdot10^{19}$ см$^{-3}$)			500,4	±10,4	—	—	0,42	±0,01
Общая толщина III-V слоев по СПЭМ	≈3537	—	4668,2	±22,0	—	—	—	—

Примечания

1 Полужирными линиями выделены наборы слоев GaAs/AlGaAs и GaAs/InGaAs, которые повторяются последовательно три раза.

2 Концентрации носителей заряда указаны в соответствии с заданием на рост.

3 Доля Al в $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ указана в соответствии с заданием на рост, а доля In в $In_{0,14}Ga_{0,86}As$ установлена методом рентгеновской дифрактометрии

4.1.3 Параметры светоизлучающих гетероструктур

Так как режимы роста светоизлучающих гетероструктур в образцах D (GaAs) и E (Ge/Si/КНИ) поддерживались одинаковыми, то предполагается, что параметры квантовых ям и барьеров, а также концентрации носителей заряда в слоях GaAs данных образцов одинаковы. Параметры квантовых ям и барьеров, а также концентрации носителей заряда слоев p+ и n+GaAs определялись по образцу D (GaAs), так как данная гетероструктура заведомо имеет более высокое кристаллическое качество по сравнению с образцом E (Ge/Si/КНИ), что увеличивает достоверность результатов.

Для характеристики качества квантовых ям в гетероструктуре на подложке GaAs и составления рекомендаций по его улучшению проводился комплекс исследований: морфологии и кривизны поверхности, оптических, структурных и электрофизических свойств, а также распределения температуры роста светоизлучающей гетероструктуры по поверхности подложки. После обработки всех данных проведено сравнение экспериментальных результатов с теоретическими расчетами и сформулированы рекомендации для дальнейших исследований.

Обработка и обсуждение результатов представлены в приложении А. Выводы, сделанные на основе данных результатов следующие.

Во-первых, методом электрохимического CV профилирования установлено, что распределение концентрации носителей заряда дырок по глубине слоя p+GaAs не однородное, меняется от $5{,}15\cdot10^{17}$ см$^{-3}$ до $3{,}62\cdot10^{19}$ см$^{-3}$ с относительной погрешностью 6 % со средним по глубине значением $p=1{,}93\cdot10^{19}$ см$^{-3}$, распределение концентрации носителей заряда электронов по глубине слоя n+GaAs однородное со значением $n=(1{,}18\pm0{,}05)\cdot10^{18}$ см$^{-3}$.

Во-вторых, обнаружено, что в приповерхностной области слоя p+GaAs концентрация атомов углерода (легирующая примесь p-типа), а также концентрация носителей заряда дырок резко уменьшается. При этом установлено, что наблюдаемый спад концентрации носителей заряда в приповерхностной области связан с пассивацией акцепторов C атомами H во время роста. Продемонстрировано, что для выравнивания распределения концентрации носителей заряда дырок (p) и увеличения значения p можно использовать постростовой отжиг в атмосфере азота без подачи AsH_3 при температуре 535 °C.

В-третьих, методом рентгеновской дифрактометрии определены наиболее вероятные значения с доверительными интервалами доли In в квантовых ямах InGaAs — 0,140 (0,138–0,143), толщины квантовых ям и барьеров — 6,81 нм (6,58–7,16) нм и 53,95 нм (53,32–54,77) нм соответственно.

Примечание — В скобках указаны доверительные интервалы к соответствующим значениям.

В-четвертых, с помощью электронно-микроскопических исследований поперечного среза активной области установлено, что смещению длины волны энергетических переходов квантовых ям (КЯ) в образце D (GaAs) в длинноволновую область на ≈11 нм относительно рассчитанных значений для определенных в эксперименте параметров КЯ способствуют неоднородность толщины КЯ и сегрегация In. Для улучшения кристаллического качества квантовых ям InGaAs/GaAs (без учета дефектов в образце E, образующихся при гетероэпитаксии на платформе Ge/Si/КНИ), в том числе и для увеличения резкости гетерограниц требуется дальнейшая оптимизация подходов подавления сегрегации In, описанная в разделе 4.1.1. Например, так как установлено, что ширина верхней гетерограницы квантовых ям больше, чем нижней, то предлагается увеличить время задержки прекращения подачи TMGa после роста КЯ, чтобы скомпенсировать избыток атомов In, сегрегирующих по мере роста и (или) увеличить паузу перед подачей веществ с элементами III группы после роста квантовых ям.

Оптимизация подходов подавления сегрегации индия будет также необходима в перспективе при отработке технологии формирования на платформе Ge/Si/КНИ (001) квантовых точек III-V, оптические свойства которых менее чувствительны к прорастающим дислокациям, чем оптические свойства квантовых ям (см. раздел 1.1.2.4).

4.2 Исследование и внедрение методов уменьшения плотности дефектов и шероховатости поверхности

При проведении обзора литературы установлены актуальные направления исследований, достижение успехов в которых позволит приблизиться к требуемому уровню кристаллического качества гетероструктур III-V, выращиваемых на созданной платформе Ge/Si/КНИ. К ним относятся: оптимизация параметров роста буферных слоев III-V на платформе Ge/Si/КНИ с применением МОС-гидридной эпитаксии для аннигиляции антифазных границ; исследование процессов движения антифазных границ в объеме и на поверхности гетероструктуры III-V/Ge/Si/КНИ, а также исследование модификации поверхности, происходящие во время отжига; установление эффективности системы зародышевых слоев $Al_{0,3}Ga_{0,7}As/GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ для подавления взаимной диффузии атомов и запирания прорастающих дислокаций в гетероструктурах III-V/Ge на точно ориентированных подложках с кристаллографической ориентацией (001).

Помимо актуальных направлений исследований существуют подходы для уменьшения плотности прорастающих дислокаций, основные рекомендации для которых найдены во время проведения обзора литературы. К ним относятся дислокационные фильтры и термоциклический отжиг. Если параметры термоциклического отжига не требуют детальных расчетов, то для дислокационных фильтров существует острая необходимость в использовании параметров, при которых эпитаксиальные слои находятся в стабильном (равновесном) состоянии. Для этого необходимо проведение детального проектирования дислокационных фильтров (ДФ): расчет равновесной критической толщины для определенного состава твердого раствора, оценка толщины разделительного слоя GaAs, а также расчет режимов роста методом МОС-гидридной эпитаксии для получения требуемых параметров ДФ.

Что касается термических трещин, то, как отмечалось в обзоре литературы, для определения необходимости использования способов контролирования трещин для той или иной прикладной задачи, требуется экспериментальным путем установить критическую толщину трещинообразования.

4.2.1 Дислокационные фильтры

Исследовались два распространенных набора дислокационных фильтров (ДФ) InGaAs/GaAs и InAlAs/GaAs. Проектирование ДФ осуществлялось на основе рекомендаций, сформулированных в обзоре литературы (см. раздел 1.2.2.2).

4.2.1.1 Проектирование и рост

Наиболее оптимальным значением доли In для дислокационных фильтров (ДФ) $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ является x=0,14, так как при увеличении доли In качество ДФ, а следовательно, и эпитаксиально выращенных на них слоев III-V ухудшается [91]. Поскольку при проведении обзора литературы не найдено работ по исследованию влияния доли In в сверхрешетке $In_xAl_{1-x}As/GaAs$ на качество эпитаксиальных слоев, то было принято решение ориентироваться на аналогичное значение x=0,14.

Для определения толщины твердых растворов использовалась формула (1) равновесной критической толщины (h_c) Мэтьюса и Блейксли [70]. Известно, что при толщине слоя меньше h_c слой находится в равновесном напряженном состоянии и вероятность образования дислокаций минимальна [56]. В связи с этим слои выращивались с толщиной меньше, чем значение h_c для соответствующего слоя.

Для системы слоев $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ параметр ядра 60°-ных дислокаций несоответствия (ДН) (β_1) равен 4 [172], углы a_1 и λ_1 для 60°-ных ДН равны 60°, рассогласование параметра решеток (f), коэффициент Пуассона $In_xGa_{1-x}As$ (ν), учитывая коэффициенты Пуассона для InAs и GaAs равными 0,352 [173] и 0,312 [174] соответственно, модуль вектора Бюргерса 60°-ных ДН в $In_xGa_{1-x}As$ (b) определяются по формулам (15)–(17) соответственно.

$$f=0{,}0716x\approx 0{,}07x, \quad (15)$$

$$\nu=0{,}31+0{,}04x\approx 0{,}31, \quad (16)$$

$$b=a/\sqrt{2}=3{,}9975+0{,}2864x\approx 4\ \text{Å}. \quad (17)$$

Используя представленные выше выражения, формула (1) в единицах измерения ангстрем принимает вид, соответствующий формуле (18).

$$h_c=(2,43/x)\cdot(\ln(h_c)+1). \quad (18)$$

Для оценки равновесной критической толщины в системе слоев $In_xAl_{1-x}As/GaAs$ параметр ядра 60°-ных ДН (β_1) принимается равным 4, углы a_1 и λ_1 для 60°-ных ДН равны 60°, рассогласование параметра решеток (f), коэффициент Пуассона $In_xAl_{1-x}As$ (ν), учитывая коэффициент Пуассона для AlAs равным 0,329 [175], модуль вектора Бюргерса 60°-ных ДН в $In_xAl_{1-x}As$ (b) определяются по формулам (19)–(21) соответственно.

$$f=0,0702x+0,0014\approx0,07x, \quad (19)$$

$$\nu=0,329+0,023x\approx0,330, \quad (20)$$

$$b=a/\sqrt{2}=4,0032+0,2807x\approx4\ Å. \quad (21)$$

Используя представленные выше выражения, формула (1) в единицах измерения ангстрем принимает вид, соответствующий формуле (22).

$$h_c=(3,15/x)\cdot(\ln(h_c)+1). \quad (22)$$

Равновесная критическая толщина при x=0,14, расчет которой выполнен по формуле (18), составляет 9,7 нм, а по формуле (22) — 13,2 нм.

Что касается толщины разделительного слоя, то, как отмечено в обзоре литературы для гетероструктуры $In_{0,2}Ga_{0,8}As/GaAs$ толщина GaAs, при которой остаточные напряжения спадают до нуля (s_0) составляет 15 нм [118]. Значение s_0 зависит от рассогласования параметра решеток материалов твердого раствора и разделительного слоя (f), а также от материала разделительного слоя. При этом, чем больше значение f, тем больше значение s_0. Для системы слоев $In_{0,2}Ga_{0,8}As/GaAs$ значение f=0,012, что соответствует f для $In_{0,15}Al_{0,85}As/GaAs$. Получается, что для обоих наборов дислокационных фильтров при x<0,15 толщина разделительного слоя GaAs может быть >15 нм.

Дислокационные фильтры (ДФ) InGaAs/GaAs использовались в образце E (Ge/Si/КНИ), где они выступали в качества квантовых ям, а ДФ InAlAs/GaAs в образцах A (Ge/Si) и B (Ge/Si/КНИ). Применение одинаковых ДФ в образцах A и B с платформами, отличающимися структурными свойствами, позволит исследовать влияние начальной плотности прорастающих дислокаций (ППД) на эффективность ДФ в уменьшении ППД. В свою очередь использование разных наборов дислокационных фильтров InAlAs/GaAs и InGaAs/GaAs в образцах B и E

соответственно с одинаковыми платформами Ge/Si/КНИ позволит сравнить эффективность разных ДФ InGaAs/GaAs и InAlAs/GaAs.

Для наиболее достоверного определения параметров дислокационных фильтров проводилось моделирование (2θ-ω)-скана к экспериментальной кривой, полученной методом рентгеновской дифрактометрии для аналогичных III-V-гетероструктур, выращенных на подложках GaAs при соответствующих образцам B (Ge/Si/КНИ) или E (Ge/Si/КНИ) параметрах роста. Обработка результатов измерений для дислокационных фильтров (ДФ) InAlAs/GaAs представлена в приложении Г, а для ДФ InGaAs/GaAs — в приложении А. Согласно проведенным измерениям (см. приложение А) в образце D (GaAs), в котором III-V-гетероструктура с дислокационными фильтрами InGaAs/GaAs выращена на двухдюймовой подложке GaAs, существуют три зоны на поверхности, незначительно отличающиеся параметрами ДФ. Тем не менее при округлении до требуемой значащей цифры существует разница только для толщины разделительного слоя GaAs. Так как площади зон поверхности образца D (GaAs) с разными параметрами дислокационных фильтров имеют примерно равные значения, то в качестве наиболее достоверного значения толщины разделительного слоя GaAs использовано среднее арифметическое. Таким образом, в образце E (Ge/Si/КНИ) сформировались дислокационные фильтры (ДФ) $In_{0,14}Ga_{0,86}As$/GaAs с наиболее вероятными значениями толщины слоев InGaAs и GaAs — 6,8 и 54,0 нм соответственно, а в образцах A (Ge/Si) и B (Ge/Si/КНИ) — ДФ $In_{0,12}Al_{0,88}As$/GaAs с наиболее вероятными значениями толщины слоев InAlAs и GaAs — 7,6 и 25,7 нм соответственно. Стоит отметить, что указанные значения толщины слоев дислокационных фильтров, измеренные с помощью метода рентгеновской дифрактометрии, совпадают со значениями, рассчитанными на СПЭМ-изображениях поперечного среза в пределах доверительных интервалов. Данный факт указывает на близкие значения параметров дислокационных фильтров (ДФ) в III-V-гетероструктурах, выращенных на подложке GaAs (001) со значениями параметров ДФ в аналогичных III-V гетероструктурах, выращенных на платформах Ge/Si (001) и Ge/Si/КНИ (001).

4.2.1.2 Эффективность

Сравнение эффективности дислокационных фильтров (ДФ) в уменьшении плотности прорастающих дислокаций проводилось прямым методом — СПЭМ. Для этого методом СПЭМ получен ряд изображений поперечного среза, которые сшивались с помощью программного обеспечения. Длина совмещенных друг с другом СПЭМ-изображений составляла до 50 мкм.

Далее считалась линейная плотность прорастающих дислокаций, дошедших до дислокационных фильтров и поверхности гетероструктуры. Эффективность ДФ (χ) представляла собой отношение линейной плотности прорастающих дислокаций (Линейная ППД), дошедших до ДФ (ДФ), к линейной ППД, дошедших до поверхности гетероструктуры (Поверхность). Результаты представлены в таблице 11.

Таблица 11 — Эффективность дислокационных фильтров (χ), а также линейная плотность прорастающих дислокаций (Линейная ППД) в образцах A (Ge/Si), B (Ge/Si/КНИ), E (Ge/Si/КНИ), достигших гетерограницы AlGaAs/Ge (Ge), дислокационных фильтров (ДФ), поверхности гетероструктур (Поверхность)

Образец	Линейная ППД, мкм$^{-1}$						χ	
	Ge		ДФ		Поверхность			
	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.
A	1,26	±0,10	1,39	±0,10	0,54	±0,05	2,6	±0,4
B	0,09	±0,01	0,11	±0,01	0,07	±0,01	1,6	±0,3
E	0,09	±0,01	0,11	±0,01	0,07	±0,01	1,6	±0,3

Примечание — Длина расчета линейной ППД составляла до 50 мкм.

Из таблицы 11 видно, что эффективность дислокационных фильтров (ДФ) $In_{0,14}Ga_{0,86}As$/GaAs с толщинами слоев $In_{0,14}Ga_{0,86}As$ и GaAs 6,8 и 54,0 нм соответственно и ДФ $In_{0,12}Al_{0,88}As$/GaAs с толщинами слоев $In_{0,12}Al_{0,88}As$ и GaAs 7,6 и 25,7 нм соответственно в гетероструктурах на созданной нами платформе Ge/Si/КНИ (001) получилась одинаковой и равна (1,6±0,3). Для сравнения с результатами, полученными другими научными группами, требуется перевести значения линейной плотности в плотность по площади (ППД). Для этого значения линейной плотности нужно возвести в квадрат. При этом χ^2 получается равным (2,5±0,9).

Согласно статье [119] полученное значение χ^2=(2,5±0,9) для дислокационных фильтров (ДФ) $In_{0,14}Ga_{0,86}As$ в образце с начальным значение плотности прорастающих дислокаций (ППД) ~10^7 см$^{-2}$ является максимально возможным. Такого эффекта в образце E (Ge/Si/КНИ) удалось добиться благодаря соответствию параметров выращенных ДФ InGaAs/GaAs параметрам, которые были заданы на рост. Что касается ДФ InAlAs/GaAs, то значения доли In и толщины твердого раствора получились меньше планируемых значений. В связи с этим ожидается, что при использовании дислокационных фильтров InAlAs/GaAs можно получить большее значение

эффективности в уменьшении ППД. Данное предположение согласуется с результатами в статьях [119, 120].

Из таблицы 11 также можно заметить, что эффективность дислокационных фильтров (ДФ) InAlAs/GaAs в образце А (Ge/Si) оказалась выше, чем в образце В (Ge/Si/КНИ). Дело в том, что в слоях III-V образца А начальная линейная плотность прорастающих из платформы Ge/Si дислокаций больше, чем в образце В (Ge/Si/КНИ) на порядок (таблица 11). Данный результат указывает на то, что эффективность дислокационной фильтрации с помощью ДФ во многом зависит от начальной плотности прорастающих дислокаций (ППД), что также было экспериментально обнаружено в недавней работе 2020 года [91]. Вероятность аннигиляции дислокаций, изогнутых из-за полей деформаций, создаваемых решеткой ДФ, будет уменьшаться при уменьшении начального значения ППД.

Примеры дислокационной фильтрации в образцах А (Ge/Si), В (Ge/Si/КНИ), Е (Ge/Si/КНИ) представлены на рисунке 28.

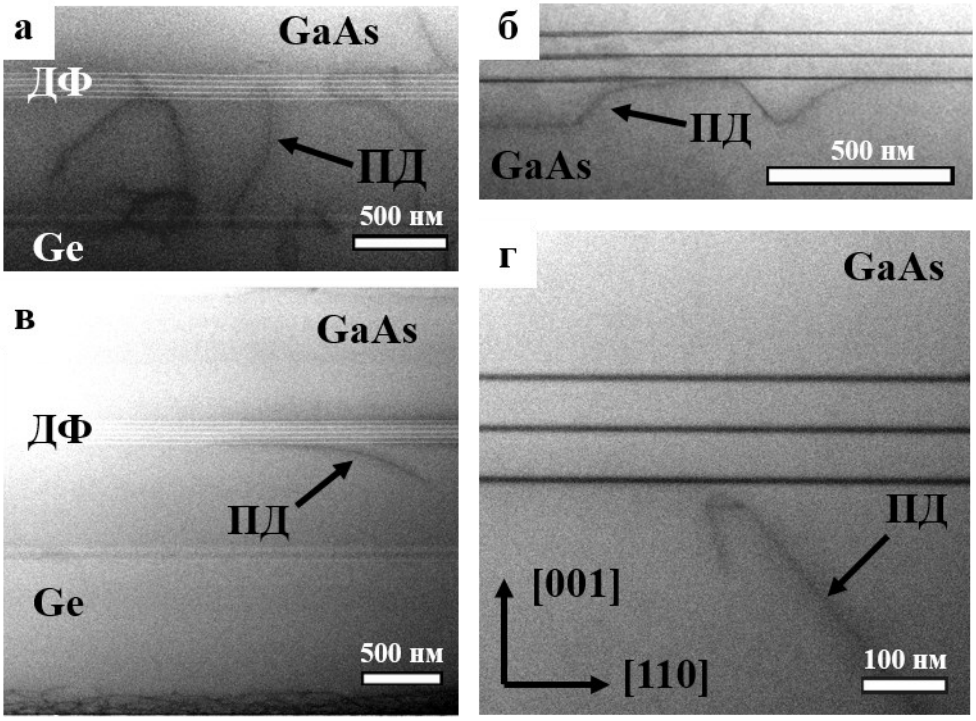


Рисунок 28 — СПЭМ-изображения поперечного среза области с дислокационными фильтрами (ДФ) (а) $In_{0,12}Al_{0,88}As$/GaAs в образце А (Ge/Si); (б), (г) $In_{0,14}Ga_{0,86}As$/GaAs в образце Е (Ge/Si/КНИ); (в) $In_{0,12}Al_{0,88}As$/GaAs в образце В (Ge/Si/КНИ) с указанием прорастающих дислокаций (ПД)

Примечание — Светлые горизонтальные линии на изображениях — твердые растворы $In_{0,12}Al_{0,88}As$ в матрице GaAs, а темные горизонтальные линии — твердые растворы $In_{0,14}Ga_{0,86}As$ в матрице GaAs.

Стоит отметить, что в образце E (Ge/Si/КНИ), толщина слоев III-V в котором составляла ≈4,7 мкм, наблюдались термические трещины, преимущественно распространяющиеся в одном направлении типа <110> (рисунок 29), а в образце B, толщина слоев III-V в котором составляла ≈1,9 мкм, термических трещин не наблюдалось. На основе данных результатов можно сделать вывод, что дислокационные фильтры безусловно стоит применять в случае, если толщина слоев III-V, эпитаксиально выращенных на созданной нами платформе Ge/Si/КНИ (001), в которой слой Ge имеет толщину 1 мкм, меньше 2 мкм. Предполагается, что значение критической толщины трещинообразования больше, чем 2 мкм. Для ее уточнения требуются дополнительные ростовые эксперименты.

Согласно зависимости плотности прорастающих дислокаций (ППД) от числа периодов дислокационных фильтров (ДФ), представленной в работе [119], значение эффективности ДФ выходит на насыщение с ППД~10^7 см$^{-2}$. Следовательно, добавление второго набора ДФ не приведет к ощутимому уменьшению ППД, однако значительно увеличит вероятность образования термических трещин из-за увеличения общей толщины III-V-гетероструктуры.

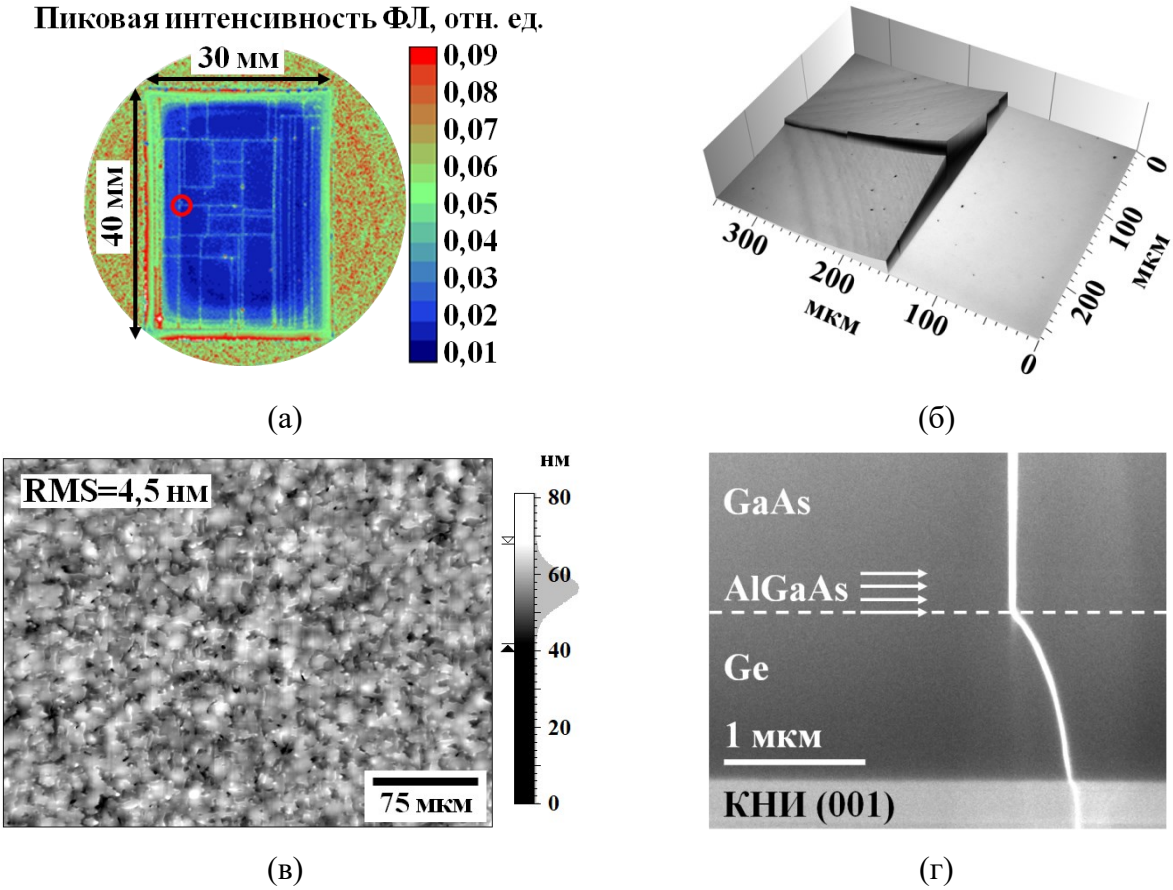


Рисунок 29 — (а) Карта интенсивности пика фотолюминесценции (ФЛ) от энергетического перехода 1e-1hh квантовых ям InGaAs/GaAs образца E (Ge/Si/КНИ); (б) изображение поверхности без топографического контраста в 3D формате, полученное методом интерференционной микроскопии с вертикальным сканированием, области, выделенной красной окружностью на изображении (а); (в) изображение поверхности без трещин с топографическим контрастом, полученное методом интерференционной микроскопии с фазовым сдвигом (PSI-изображение); (г) СПЭМ-изображение поперечного среза (ось зон [1$\bar{1}$0]) образца E (Ge/Si/КНИ) в области с трещиной

Примечания

1 Интенсивность на карте (а) нормирована на максимальное значение пика ФЛ от GaAs.

2 Светлые взаимно перпендикулярные линии на карте ФЛ (а) связаны с наличием трещин.

3 Среднеквадратичная шероховатость поверхности по пяти PSI-изображением подобным изображению (в) в разных местах поверхности равна (4,5±0,2) нм.

4 Пунктирной линией на изображении (г) отмечена гетерограница слоев III-V с Ge.

4.2.1.3 Выводы

Продемонстрировано, что дислокационные фильтры InAlAs/GaAs эффективнее, чем дислокационные фильтры InGaAs/GaAs в уменьшении плотности прорастающих дислокаций. Кроме этого, показано, что эффективность дислокационных фильтров зависит от начальной плотности прорастающих дислокаций — чем выше начальная плотность, тем эффективнее дислокационная фильтрация. Однако стоит учитывать, что использование дислокационных фильтров увеличивает вероятность образования термических трещин в системах $A^{III}B^{V}$/Ge/Si.

4.2.2 Методы для уменьшения плотности антифазных дефектов

Согласно обзору литературы (см. раздел 1.1.1.1) аннигиляция антифазных границ — результат заращивания антифазных доменов (АФД) благодаря отличающимся скоростям включения атомов на двух типах ступеней A и B, расположенных преимущественно на поверхности α- и β-фазы соответственно [48, 49] и различиям в направлении усиленной диффузии атомов III на поверхности разных фаз [93]. Эффективное заращивание АФД возможно только в том случае, если существует некоторая доля режим роста на ступенях (Step flow growth) [43]. Отношение скоростей роста разных фаз определяется параметрами роста: отношением потоков V/III, температурой роста и скоростью роста III-V. Для метода молекулярно-пучковой эпитаксии в работе [43] построена зависимость отношения скоростей роста α- и β-фаз при определенных значениях отношений потоков V/III от температуры роста, однако такие зависимости не найдены для метода МОС-гидридной эпитаксии. Кроме этого актуальными являются и исследование влияния скорости роста III-V на эффективность аннигиляции антифазных границ (АФГ) при использовании точно ориентированных подложек и метода роста МОС-гидридной эпитаксии (см. раздел 1.2.1.1), а также исследование влияния отжига на поведение АФГ в объеме полупроводника III-V (см. раздел 1.2.1.2).

В данном разделе продемонстрированы параметры роста методом МОС-гидридной эпитаксии: отношение потоков V/III, температура роста, скорость роста, при которых основная плотность антифазных границ аннигилирует в пределах толщины буферных слоев III-V, а также параметры in-situ отжига, способствующие уменьшению плотности антифазных границ, а также модификации поверхности, приводящей к выравниванию фронта роста и, как следствие, к уменьшению среднеквадратичной шероховатости поверхности готовой гетероструктуры.

4.2.2.1 Начальное распределение фаз $A^{III}B^{V}$ на поверхности Ge/Si/КНИ (001)

Выделяют начальное распределение фаз «террасозависимое», когда террасы на поверхности подложки имеют размеры больше длины поверхностной диффузии атомов, и распределение фаз «островковое», когда размеры террас меньше длины поверхностной диффузии атомов [43]. На самом деле рассмотренный в статье [43] идеальный случай, когда поверхность полупроводника IV представляет собой набор террас и ступеней не совсем соответствует той действительности, с которой мы имеем дело. Дело в том, что поверхность созданной платформы Ge/Si/КНИ (001) имеет на порядок большее значение среднеквадратичной

шероховатости поверхности (RMS) ≈0,60 нм, а не ≈0,06 нм как в случае подложки Si (001) или КНИ (001). Увеличение RMS на АСМ-сканах поверхности созданной платформы Ge/Si/КНИ (001) является результатом формирования на ней холмистой структуры, представленной на рисунке 30. В связи с этим распределение фаз на начальном этапе роста III-V на платформе Ge/Si/КНИ (001) может носить более сложный характер, который на основе полученных результатов в диссертации нельзя точно описать. Результаты исследования поперечного среза методом ПЭМ, приведенные далее, являются тому доказательством и научным заделом для проведения исследований поверхности созданной платформы Ge/Si/КНИ (001) и начального распределения фаз III-V на атомарном уровне.

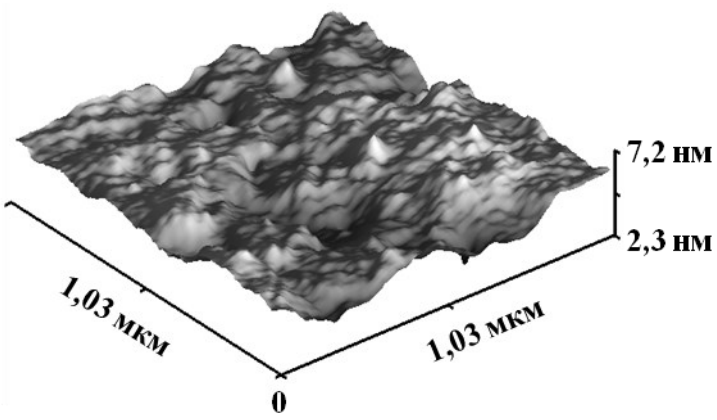


Рисунок 30 — 3D вид АСМ-скана поверхности созданной платформы Ge/Si/КНИ (001)

4.2.2.2 Идентификация островков антифазных доменов на поверхности Ge

Для усиления дифракционного контраста от антифазных дефектов методом ПЭМ с помощью объективной апертуры были вырезаны несколько рефлексов. Результаты представлены на рисунке 31.

На вставках рисунка 31 заметна большая плотность светлых и темных островков III-V вблизи гетерограницы с Ge, которые наблюдались и в образцах A (Ge/Si), B (Ge/Si/КНИ) (см. раздел 3.3.2.4). Для подтверждения, что данные островки являются антифазными доменами, использовался режим темного поля в ПЭМ и в дополнение, чтобы исключить причину такого контраста, связанную со скоплением атомов Al, проведен элементный анализ в соответствующих областях.

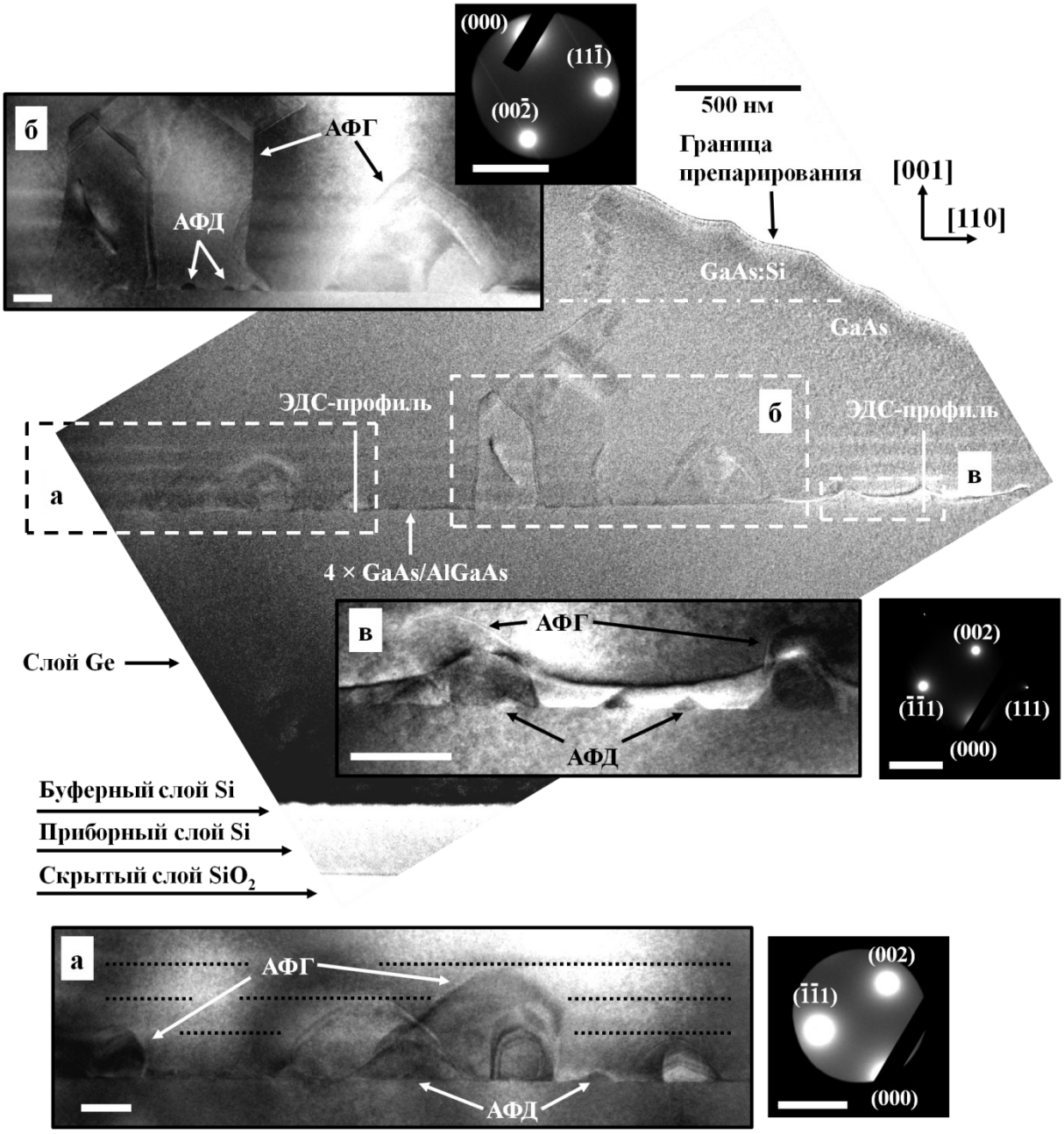


Рисунок 31 — ПЭМ-изображения поперечного среза (ось зон [1$\bar{1}$0]) слоев III-V/Ge/Si/SiO_2 образца E (Ge/Si/КНИ) с антифазными доменами (АФД) и границами (АФГ)

Примечания

1 На дифракционных картинах указаны рефлексы, электронные пучки которых участвовали в формировании изображений на соответствующих вставках (а)–(в).

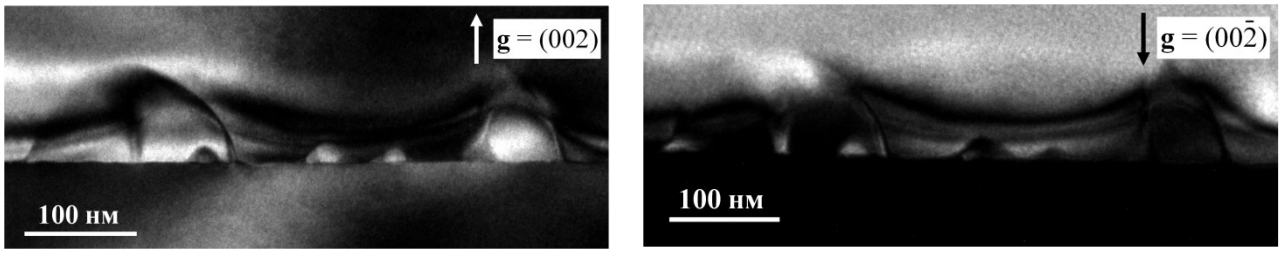
2 Масштабная шкала на вставках (а)–(в) 100 нм, на дифракционных картинах от соответствующих областей 2 1/нм.

3 Штрих-пунктирной линией отмечается приблизительное расположение границы между слоями i-GaAs и GaAs:Si.

4 Сплошными линиями отмечаются ЭДС-профили, которые получены методом энергодисперсионной спектроскопии (ЭДС).

5 Пунктирной линией на вставке (а) отмечено примерное расположение слоев AlGaAs за исключением зародышевого слоя AlGaAs.

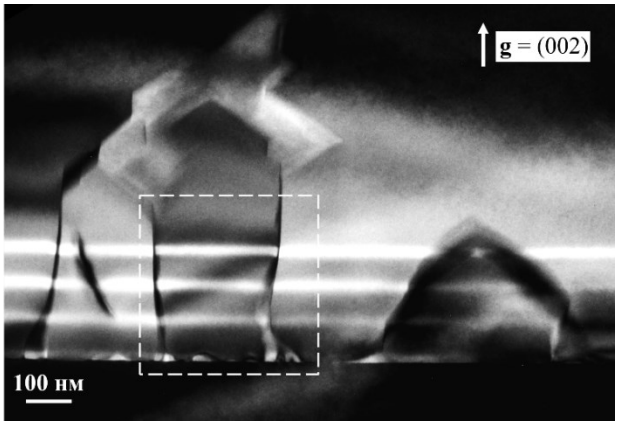
Исследовалось несколько областей на поперечном срезе гетерограницы III-V/Ge со светлыми и темными островками III-V. Для каждой области снималось два темнопольных ПЭМ-изображения, отличающихся друг от друга используемым отражением. Объективной апертурой самого маленького размера вырезался рефлекс (002) для получения одного темнопольного ПЭМ-изображения и рефлекс $(00\bar{2})$ для получения другого темнопольного ПЭМ-изображения. Объяснение появления контраста от антифазных доменов при использовании одного из отражений типа {002} представлено в разделе 3.3.2.4. Типичные результаты исследования представлены на рисунке 32.



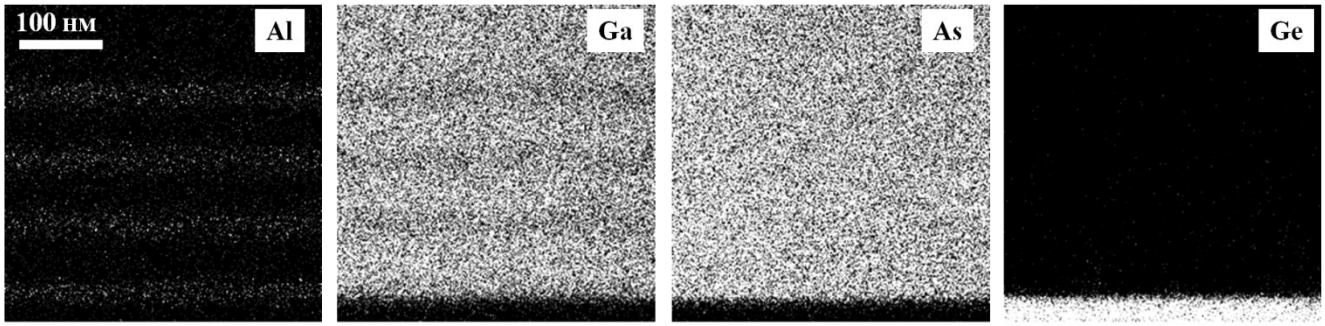
(а) (б)

Рисунок 32 — Темнопольные ПЭМ-изображения поперечного среза (ось зон $[1\bar{1}0]$) слоев III-V/Ge образца E (Ge/Si/КНИ) области (в) на рисунке 31, полученные с использованием разных векторов отражения: (а) **g**=(002), (б) **g**=$(00\bar{2})$

Элементный анализ проводился методом энергодисперсионной спектроскопии (ЭДС) в областях со светлыми и темными островками III-V. Результаты ЭДС-картирования в области (б) на рисунке 31 представлены на рисунке 33, а ЭДС-профили, проведенные через предполагаемые места расположения антифазных доменов, указанные на рисунке 31, представлены на рисунке 34.



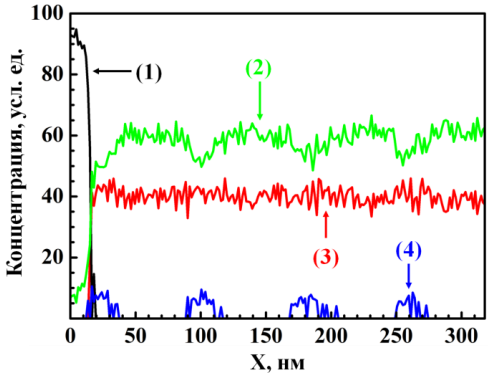
(а)



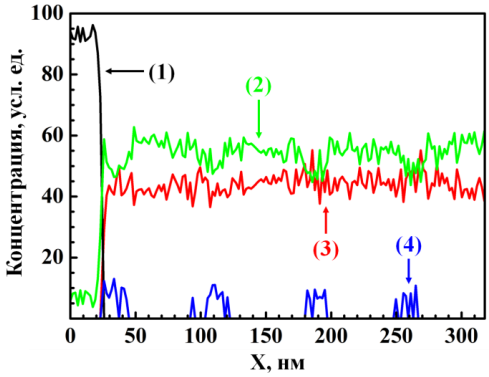
(б)

Рисунок 33 — (а) Темнопольное ПЭМ-изображение поперечного среза (ось зон [1$\bar{1}$0]) слоев III-V/Ge образца E (Ge/Si/КНИ) области (б) на рисунке 31; (б) ЭДС-картирование по элементам в выделенной области на рисунке (а)

Примечание — Максимальное смещение области исследование во время картирования за один кадр 3 нм с последующей автоматической коррекцией смещения с помощью функции «SiteLock».



(а)



(б)

Зависимости распределения концентрации следующих атомов от координаты ЭДС-профиля (X): 1 — Ge; 2 — Ga; 3 — As; 4 — Al.

Рисунок 34 — ЭДС-профили (а) через антифазные домены (АФД) в области (а) на рисунке 31, (б) через АФД в области (в) на рисунке 31

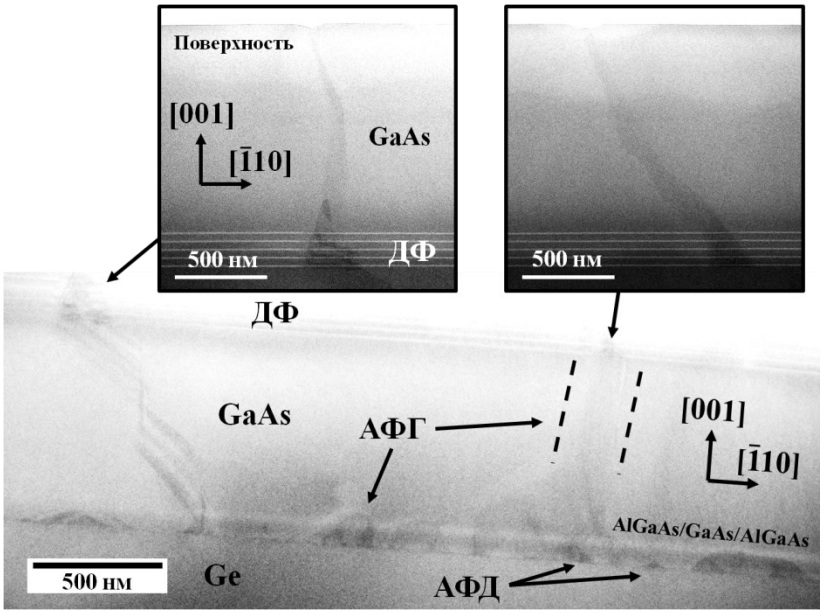
Примечание — Погрешность: по оси ординат — 5 усл. ед.; абсцисс — 4 нм.

Во-первых, ЭДС-картирование и ЭДС-профилирование не показали скопления Al в предполагаемых областях с антифазными доменами. Во-вторых, на темнопольных ПЭМ-изображениях можно наблюдать, как при смене рефлекса островки меняют цвет с темного на светлый и наоборот. Данные результаты свидетельствуют о том, что островки III-V являются антифазными доменами (АФД).

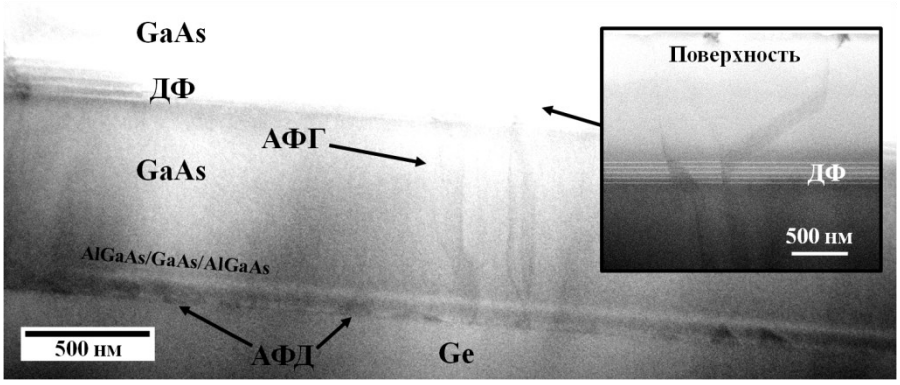
Учитывая, что на темнопольных ПЭМ-изображениях (рисунки 32, 33), чувствительных к химическому составу, зародышевый слой AlGaAs выглядит сплошным с наличием островков АФД, то можно предположить, что островковый рост слоев III-V на Ge/Si/КНИ (001) завершается в зародышевом слое AlGaAs толщиной (19±5) нм при используемых методом МОС-гидридной эпитаксии параметрах роста: отношение потоков V/III=80, температура роста 690 °C, скорость роста (0,95±0,24) нм/с.

4.2.2.3 Развитие антифазных дефектов по мере роста слоев $A^{III}B^{V}$

На ПЭМ-изображениях поперечного среза кроме островков антифазных доменов в зародышевом слое AlGaAs наблюдаются и антифазные границы (АФГ), которые выходят из него (рисунок 31). Их можно разделить на АФГ, имеющие наклонные и вертикальные плоскости. Независимо от начального направления распространения, АФГ могут изменить его на гетерогранице со слоем AlGaAs. Характерный пример — рисунок 33: антифазная граница справа на рисунке резко меняет плоскость на наклонную во втором слое AlGaAs, а одна из АФГ в левой части рисунка наоборот меняет плоскость на вертикальную. Антифазные границы могут поменять плоскость распространения и на дислокационных фильтрах. Примеры представлены на рисунке 35.



(а)



(б)

Рисунок 35 — ПЭМ-изображения поперечного среза (ось зон [110]) слоев III-V/Ge/Si образца B (Ge/Si/КНИ)

Примечания

1 На вставках СПЭМ-изображения областей, указанных стрелками.

2 ДФ — дислокационные фильтры InAlAs/GaAs; АФГ — антифазная граница; АФД — антифазный домен.

Тем не менее существует тенденция к аннигиляции антифазных границ (АФГ) — вблизи начала второго периода GaAs/AlGaAs большая часть вертикальных АФГ резко меняет плоскости распространения на наклонные, а большая часть наклонных АФГ продолжает распространяться в таком же направлении (рисунки 31, 36).

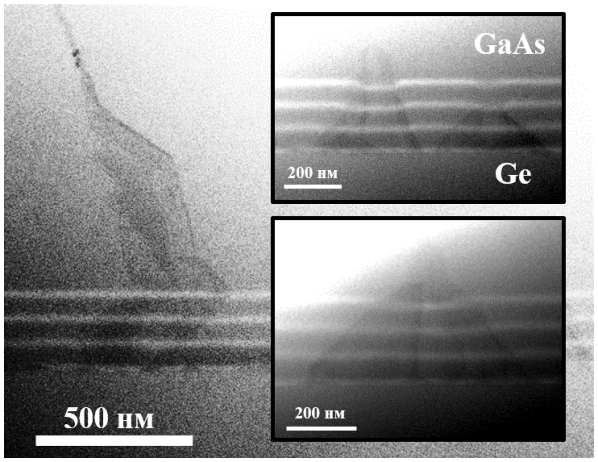
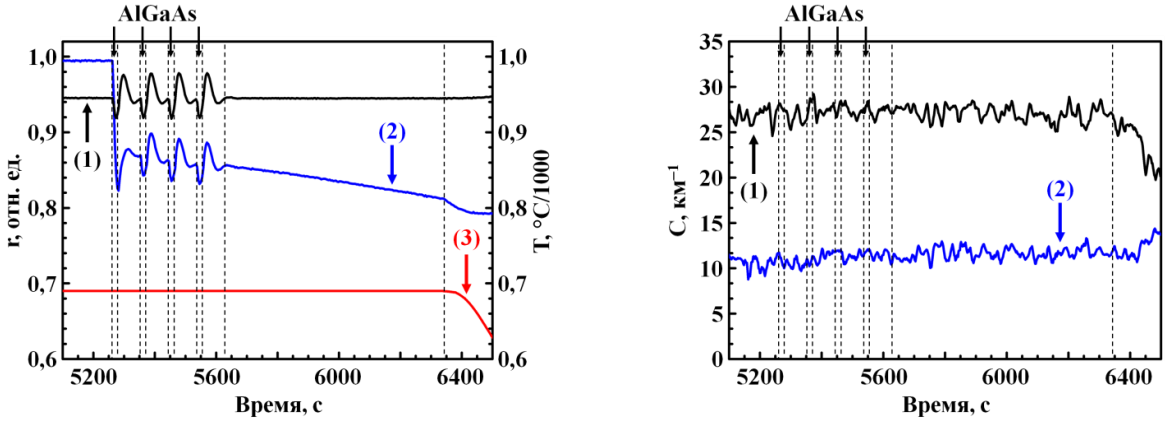


Рисунок 36 — СПЭМ-изображения в режиме светлого поля поперечного среза (ось зон [1$\bar{1}$0]) слоев III-V/Ge образца E (Ge/Si/КНИ) с антифазными границами

Примечание — Светлые горизонтальные линии — слои AlGaAs в матрице GaAs.

Самая большая плотность антифазных границ наблюдается в пределах зародышевых слоев AlGaAs/GaAs/AlGaAs (рисунки 31, 35). Данный факт подтверждается результатами in-situ измерения отражательной способности, которые свидетельствуют о сильном развитии морфологии фронта роста в пределах роста первого периода GaAs/AlGaAs (рисунок 37). Все представленные в диссертации результаты in-situ измерений отражательной способности подробно обсуждаются в приложении Е.



(а) (б)

1 — Зависимости отражательной способности (r) и кривизны (C) от времени роста для образца-спутника на подложке GaAs;

2 — зависимости r и C от времени роста для образца E (Ge/Si/КНИ);

3 — зависимость температуры роста (T) от времени.

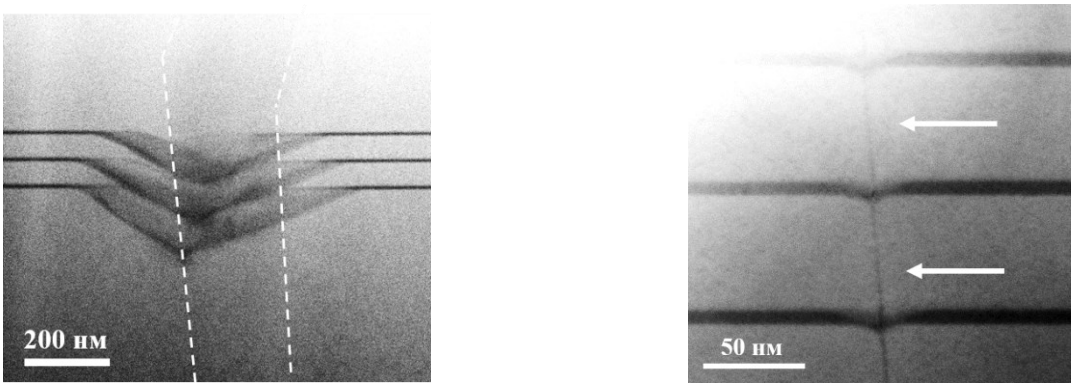
Рисунок 37 — In-situ измерения (а) r, T, (б) C образца E (Ge/Si/КНИ) и образца-спутника на подложке GaAs (GaAs) во время роста буферных слоев III-V

Примечания

1 Значения r нормированы на максимальные значения для соответствующей гетероструктуры за все время роста.

2 Для получения значения r использовалось излучение с длиной волны 405 нм.

Тем не менее наблюдаются антифазные границы, которые распространяются вертикально в направлении поверхности III-V-гетероструктуры. В результате мы видим характерные V-образные канавки на АСМ-сканах поверхности целой гетероструктуры (рисунок 23), а также V-образный рельеф поверхности (рисунок 35 (а), (б)) и V-образную форму квантовых ям на поперечном срезе (рисунок 38).



(а) (б)

Рисунок 38 — СПЭМ-изображения в режиме светлого поля поперечного среза (ось зон [1$\bar{1}$0]) слоев III-V образца E (Ge/Si/КНИ) с антифазными границами (АФГ) в активной области III-V-гетероструктуры

Примечания

1 Штриховой линией очерчена и стрелками отмечена антифазные границы.

2 Темные горизонтальные линии — слои InGaAs в матрице GaAs.

Существует отличие в толщине буферных слоев, в пределах которых происходит аннигиляция основной плотности антифазных (АФГ) в образцах B (Ge/Si/КНИ) и E (Ge/Si/КНИ). В образце B мы наблюдаем, что АФГ преимущественно аннигилируют в пределах первого периода буферных слоев GaAs/AlGaAs (рисунок 35), тогда как в образце E аннигиляция АФГ происходит и в последующих периодах (рисунок 31). Единственный параметр роста буферных слоев GaAs и AlGaAs, который отличался в образцах B и E — это скорость роста: (0,33±0,07); (0,25±0,12) нм/с и (0,71±0,07); (1,33±0,19) нм/с соответственно.

Примечание — Первое значение скорости роста в паре относится к слою GaAs, а второе — к слою AlGaAs.

Увеличение скорости роста в слоях GaAs/AlGaAs образца E происходило за счет увеличения потока веществ с элементами III группы при сохранении отношения V/III равным 80.

В ходе выполнения обзора литературы нами найдено исследование влияния скорости роста на плотность антифазных границ лишь в системе слоев GaP/Si, в которой подложка Si имела вицинальную поверхность (001) с углом отклонения среза 4° в направлении [110] и с применением метода роста III-V молекулярно-пучковой эпитаксии [93]. В диссертации сообщается тот факт, что заключения по поводу влияния скорости роста III-V на аннигиляцию антифазных границ и возможные причины таких изменений, сформулированные в статье [93] (см. раздел 1.2.1.1), также справедливы и в системе III-V/Ge на точно ориентированной подложке (001) с использованием МОС-гидридной эпитаксии в качестве метода роста слоев III-V.

4.2.2.4 Влияние in-situ отжига на поведение антифазных границ

Значимое отличие в поведении антифазных границ (АФГ) в образцах A (Ge/Si), B (Ge/Si/КНИ) по сравнению с образцом E (Ge/Si/КНИ) заключается в следующем. В образцах A и B вертикальные АФГ, наблюдаемые на поперечном срезе, в той области образца, где проведен термоциклический отжиг (ТЦО), не меняли плоскости распространения и доростали до поверхности. В образце E, где ТЦО был с выдержкой при высокой температуре, картина обратная (рисунок 39). В последнем случае на поперечном срезе мы можем наблюдать множество замкнутых АФГ в буферном слое GaAs, который выращен до проведения ТЦО, но после четырех периодов буферных слоев GaAs/AlGaAs (такие АФГ отмечены цифрами 1–2, 3–4 на рисунке 39). Причем такие замкнутые АФГ отличаются от тех антифазных границ, которые аннигилировали во время роста буферных слоев GaAs/AlGaAs (цифра 5 на рисунке 39). Замкнутые АФГ, наблюдаемые в буферном слое GaAs после слоев GaAs/AlGaAs, имеют преимущественно либо резкую смену плоскости с вертикальной на наклонную как указано цифрами 1; 2; 3 на рисунке 39, либо они имеют зигзагообразную форму как отмечено цифрой 4 на рисунке 39. Похожую зигзагообразную форму антифазной границы можно наблюдать на рисунках 31, 33.

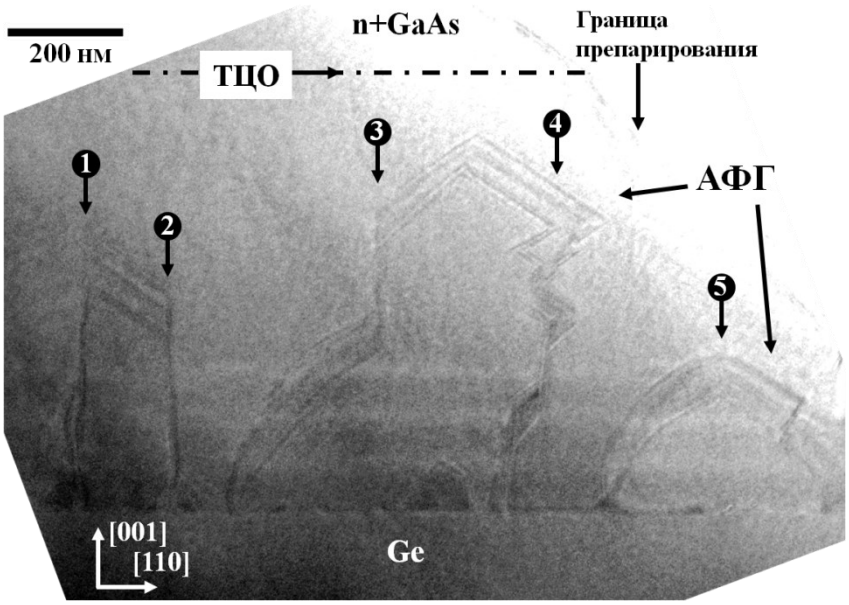
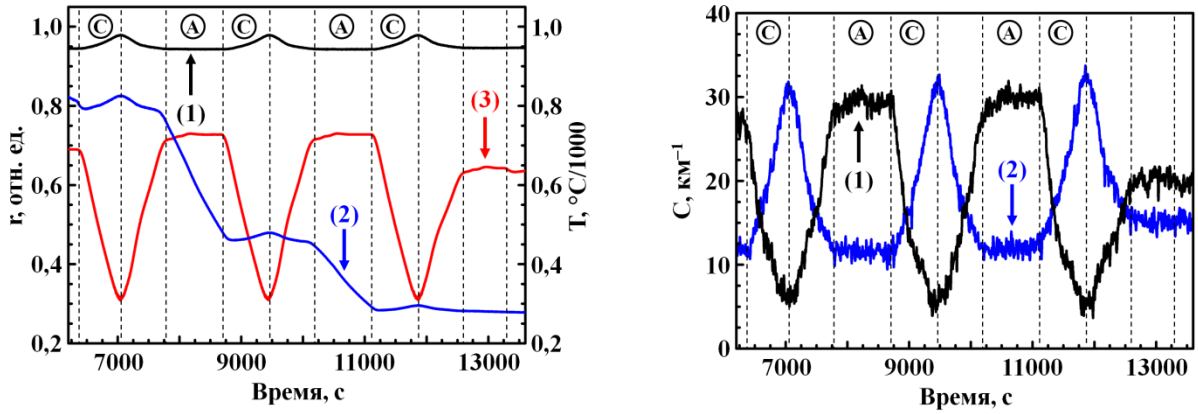


Рисунок 39 — ПЭМ-изображение поперечного среза (ось зон [1$\bar{1}$0]) слоев III-V/Ge/Si образца E (Ge/Si/КНИ) с замкнутыми антифазными границами 1-2, 3-4 (АФГ), которые предположительно аннигилировали после проведения термоциклического отжига (ТЦО) с выдержкой при высокой температуре

Как отмечено в литературном обзоре, АФГ подвижны во время отжига, и их движение происходит к центрам кривизны, которое в конечном итоге приводит к аннигиляции [94]. Вероятнее всего именно движение АФГ во время выдержки при высокой температуре (на рисунке 40 эти участки времени термоциклического отжига отмечены буквой А) стало причиной развития шероховатости поверхности, зафиксированного методом in-situ измерения отражательной способности (рисунок 40). Мы предполагаем, что наличие замкнутых антифазных границ (АФГ) в буферном слое GaAs, который выращен до проведения ТЦО, но после четырех периодов буферных слоев GaAs/AlGaAs является следствием термоциклического отжига с выдержкой при высокой температуре. По-видимому, во время отжига после аннигиляции антифазные границы распространяются вглубь материала III-V, что мы и наблюдаем на поперечном срезе (рисунок 39).



(а) (б)

1 — Зависимости отражательной способности (r) и кривизны (C) от времени роста для образца-спутника на подложке GaAs;

2 — зависимости r и C от времени роста для образца E (Ge/Si/КНИ);

3 — зависимость температуры роста (T) от времени.

Рисунок 40 — In-situ измерения (а) r, T и (б) C образца E (Ge/Si/КНИ) и образца-спутника на подложке GaAs (GaAs) во время термоциклического отжига

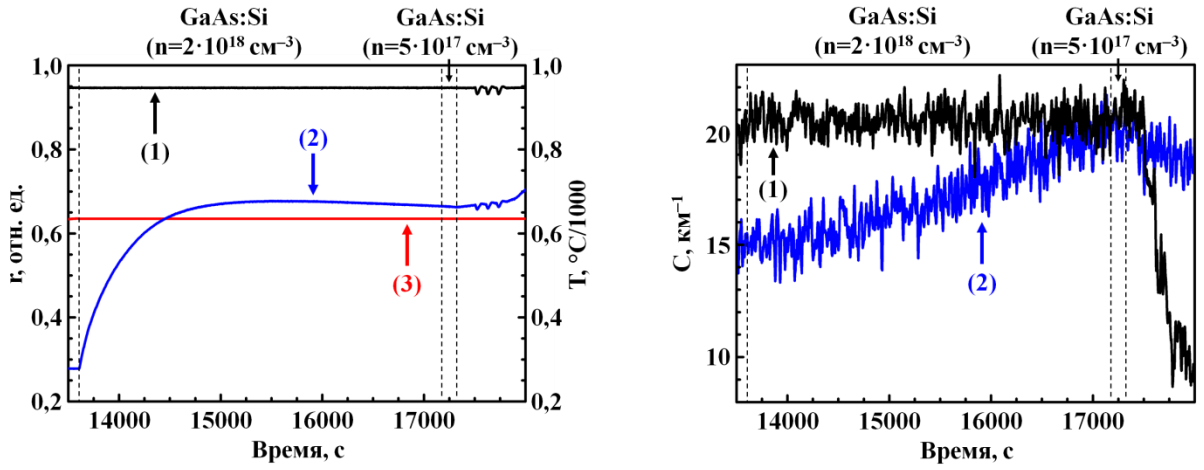
Примечания

1 Значения r нормированы на максимальные значения для соответствующей гетероструктуры за все время роста.

2 Для получения значения r использовалось излучение с длиной волны 405 нм.

3 Обозначения: C — cooling (охлаждение), A — annealing (отжиг).

Примечательно, что во время роста n+GaAs после термоциклического отжига с выдержкой при высокой температуре фронт роста стал выравниваться согласно результатам in-situ измерения отражательной способности (рисунок 41). Причины такого эффекта будут обсуждаться в следующем разделе.



(а) (б)

1 — Зависимости отражательной способности (r) и кривизны (C) от времени роста для образца-спутника на подложке GaAs;

2 — зависимости r и C от времени роста для образца E (Ge/Si/КНИ);

3 — зависимость температуры роста (T) от времени.

Рисунок 41 — In-situ измерения (а) r, T и (б) C образца E (Ge/Si/КНИ) и образца-спутника на подложке GaAs во время роста слоев GaAs:Si

Примечания

1 Значения r нормированы на максимальные значения для соответствующей гетероструктуры за все время роста.

2 Для получения значения r использовалось излучение с длиной волны 405 нм.

3 Концентрации носителей заряда указаны в соответствии с заданием на рост.

4 Пунктирными вертикальными линиями ограничены интервалы роста отмеченных сверху слоев.

4.2.2.5 Обсуждение результатов

Наличие с одной стороны антифазных доменов (АФД) в зародышевом слое AlGaAs и антифазных границ (АФГ), аннигилирующих вблизи слоев AlGaAs, а с другой стороны АФГ, распространяющихся вертикально, свидетельствует об изменении отношения скорости роста α- и β-фаз (C α/β) по поверхности от значений сильно отличающихся от 1 до значений близких к 1. Известно, что скорость включения атомов различна на ступенях A и B [48, 49], поэтому ожидается, что скорости роста разных фазы, будут значительно отличаться, если будет преобладать режим роста III-V на ступенях. Согласно заключениям, сделанным в работе [43], в тех местах, где C α/β близок к 1, края ступеней A и B во время роста задействованы незначительно, то есть преобладает режим роста 2D-островковый (2D-nucleation), и скорости

роста α- и β-фаз выравниваются [43]. Стоит подчеркнуть, что идет речь о росте III-V на поверхности III-V, то есть уже после коалесценции 3D-островков III-V на Ge.

В подтверждении гипотезы о том, что происходил 2D-островковый режим роста можно рассмотреть АСМ-сканы поверхности 50 на 50 мкм и 7 на 7 мкм образцов A (Ge/Si) и B (Ge/Si/КНИ) (рисунок 42). В случае АСМ-сканов 50 на 50 мкм площади разных фаз одинаковы (таблица 12), что указывает на их равные скорости роста. На АСМ-сканах 7 на 7 мкм видна картина, характерная для 2D-островкового режима роста, представляющая собой множество 2D-островков с окружающим их набором замкнутых ступеней (рисунок 42 (г), (и)). Для подтверждения того, что наблюдаемая на АСМ-сканах 7 на 7 мкм картина связана с морфологией поверхности, а не артефактами изображений проведены дополнительные эксперименты, описанные в приложении Ж.

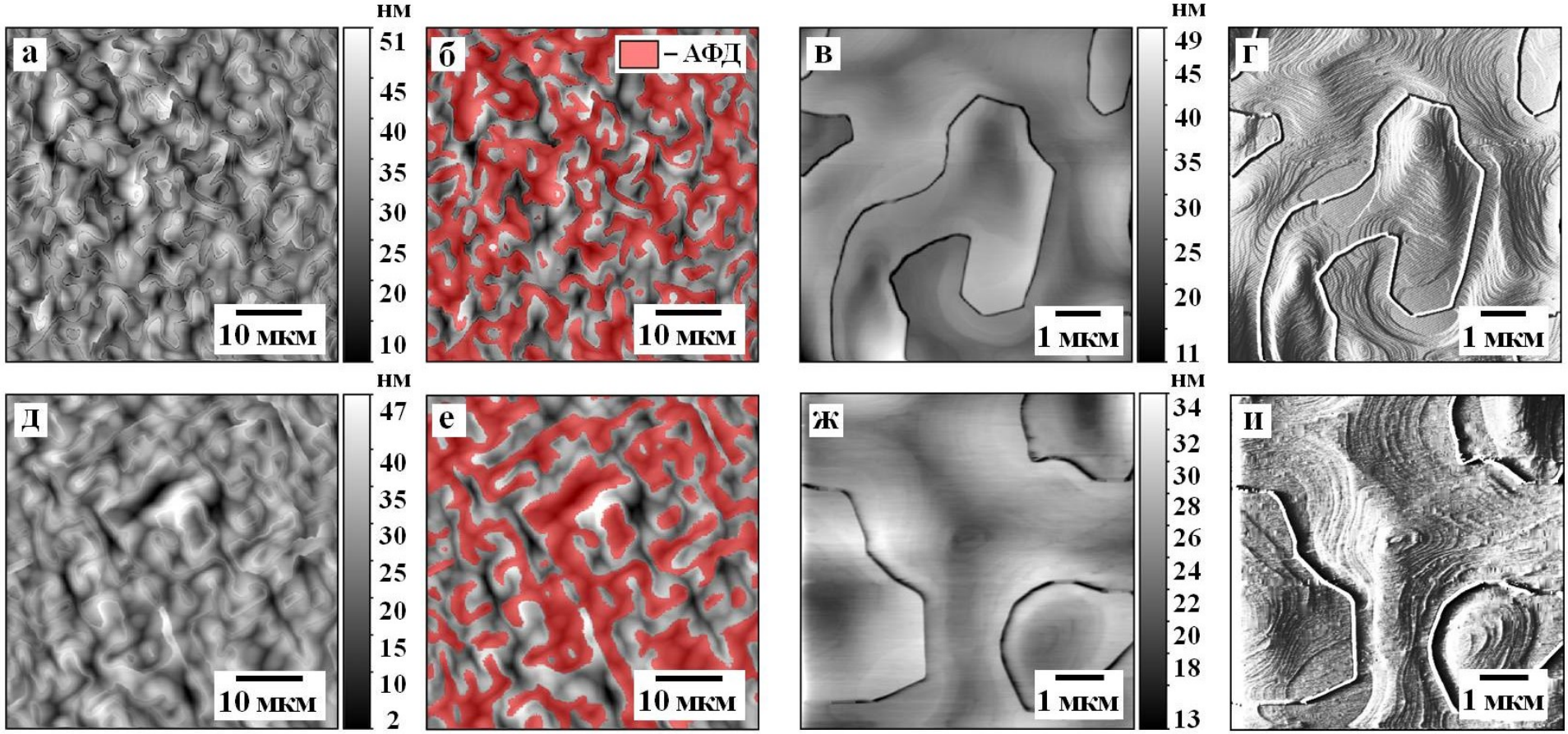


Рисунок 42 — АСМ-сканы поверхности образцов (а)–(г) А (Ge/Si); (д)–(и) В (Ge/Si/КНИ)

Примечания

1 АСМ-сканы (б) и (е) соответствуют сканам (а) и (д), на которых красной маской отмечены антифазные домены (АФД).

2 АСМ-сканы (г) и (и) соответствуют сканам (в) и (ж), над которыми проведены дополнительные операции адаптивной нелинейной установки цветовой шкалы и затенения данных.

Заметно отличающаяся картина поверхности наблюдается в образце E (Ge/Si/КНИ), в котором использовался термоциклический отжиг с выдержкой при высокой температуре (рисунок 43). Можно выделить четыре особенности. Во-первых, линейная плотность антифазных границ, подсчитанная на АСМ-сканах 50 на 50 мкм, в образце E (Ge/Si/КНИ) более чем в два раза меньше — 0,18 мкм$^{-1}$, чем в образце B (Ge/Si/КНИ) — 0,41 мкм$^{-1}$. Во-вторых, холмистая структура поверхности образца E практически отсутствует (рисунок 43 (а)). В-третьих, на АСМ-сканах 50 на 50 мкм образца E проявилось увеличение площади одной фазы III-V относительно другой (таблица 12). В-четвертых, на АСМ-сканах 7 на 7 мкм образца E наблюдается ступенчатая морфология поверхности, в которой ступени, имеющие в большей степени волнистый контур, чередуются с террасами в кристаллографическом направлении <110> (рисунок 43 (г)).

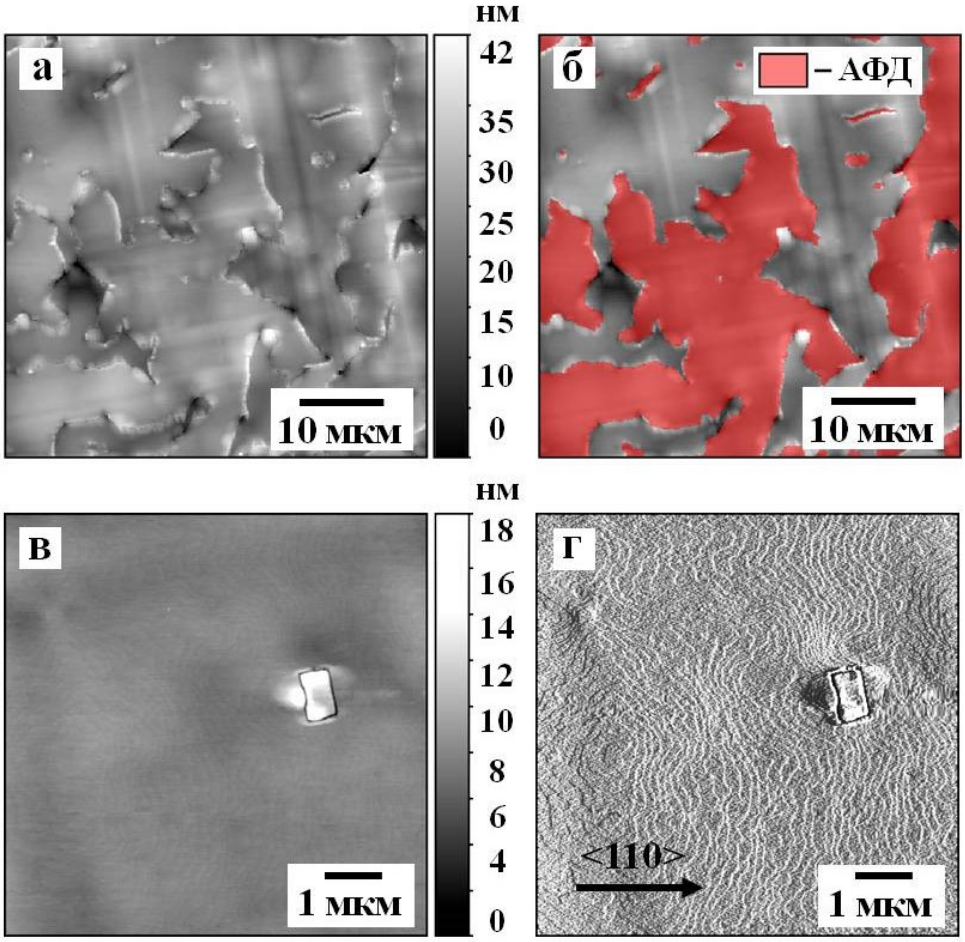


Рисунок 43 — АСМ-сканы поверхности образца E (Ge/Si/КНИ)

Примечания

1 АСМ-скан (б) соответствует скану (а), на котором красной маской отмечены антифазные домены (АФД).

2 АСМ-скан (г) соответствует скану (в), над которым проведены дополнительные операции адаптивной нелинейной установки цветовой шкалы и затенения данных.

Учитывая тот факт, что антифазные границы после буферных слоев и термоциклического отжига в обоих образцах B (Ge/Si/КНИ) и E (Ge/Si/КНИ) распространяются преимущественно вертикально (рисунки 35 и 36 соответственно), можно сделать два предположения. Во-первых, вклад в уменьшение плотности антифазных границ, связанный с увеличением толщины слоев III-V в образце E по сравнению с образцом B является незначительным. Во-вторых, изменение параметров роста (температура, отношение V/III, скорость роста) относительно параметров роста буферных слоев в образцах B и E является не благоприятным для эффективного заращивания антифазных доменов. В таком случае именно термоциклический отжиг с выдержкой при высокой температуре стал основной причиной меньшего значения линейной плотности антифазных границ на поверхности образца E по сравнению с образцом B. Вторая особенность поверхности образца E подтверждает предположение о том, что процесс заращивания антифазных доменов (АФД) происходил в глубине гетероструктуры. Так как известно, что по мере роста слоев III-V после заращивания АФД холмистая структура поверхности выравнивается.

Две последние особенности поверхности образца E характерны для режима роста на ступенях (Step flow growth). Единственным фактором, который мог бы преобразовать поверхность в образце E таким образом, чтобы вклад режима роста на ступенях стал преобладающим по сравнению с режимом роста 2D-островковым является термоциклический отжиг с выдержкой при высокой температуре. Из литературного обзора известны подходы для модификации поверхности подложки кремния с помощью высокотемпературного отжига в атмосфере водорода [20]. Поэтому такое положительное влияние in-situ отжига при высоких температурах имеет право на существование. Неэффективное заращивание антифазных доменов во время режима роста на ступенях в образце E (Ge/Si/КНИ) (на что указывает незначительное уменьшение площади одной фазы по сравнению с площадью другой фазы, зафиксированное на АСМ-скане 50 на 50 мкм поверхности целой гетероструктуры E (таблица 12)) можно объяснить двумя причинами. Во-первых, это использование параметров роста, отличающихся от благоприятных для аннигиляции антифазных границ, которые использовались во время роста буферных слоев III-V. Во-вторых, это наличие некоторого вклада режима роста 2D-островкового. На последнюю причину указывают волнистые контуры ступеней на АСМ-скане 7 на 7 мкм на рисунке 43 (г).

Положительные изменения поверхности во время термоциклического отжига с выдержкой при высокой температуре: уменьшение плотности антифазных границ, модификация таким образом, что вклад от ступенчатого режима роста становится преобладающим, и послужили в частности выравниванию фронта роста во время роста n+GaAs, которое зафиксировано методом in-situ измерения отражательной способности (рисунок 41), а также в целом уменьшению среднеквадратичной шероховатости поверхности (RMS) гетероструктуры

E (Ge/Si/КНИ) по сравнению с образцом B (Ge/Si/КНИ) (таблица 12). Стоит отметить, что в области поверхности на АСМ-сканах 7 на 7 мкм без антифазных границ значение RMS≈0,3 нм, что меньше, чем RMS поверхности созданной платформы Ge/Si/КНИ (001) в области на АСМ-сканах примерно такой же площади и латерального разрешения, которое составляет ≈0,6 нм.

Таблица 12 — Среднеквадратичная шероховатость поверхности (RMS), рассчитанная по АСМ-сканам и PSI-изображениям, плотность антифазных границ (АФГ) и доля площади антифазных доменов (АФД), оцененная по АСМ-сканам 50 на 50 мкм поверхности образцов A (Ge/Si), B (Ge/Si/КНИ) и E (Ge/Si/КНИ)

Образец	RMS, нм				Плотность АФГ, мкм$^{-1}$ ±0,01	Доля площади АФД ±0,01
	АСМ		PSI			
	7 на 7 мкм	50 на 50 мкм	351 на 264 мкм			
			Номин.	Пред. откл.		
A	6,4	9,1	5,1	±0,2	0,63	0,50
B	4,1	8,5	4,9		0,41	0,50
E	0,8	5,3	4,5		0,18	0,47

Примечания

1 Погрешность значения RMS, рассчитанной по PSI-изображениям определялась как стандартное отклонение по пяти PSI-изображениям поверхности образца.

2 Погрешности плотности АФГ и доли площади АФД обусловлены возможной ошибкой в обработке изображения.

3 Низкое значение RMS поверхности образца E по АСМ-скану 7 на 7 мкм обусловлено низким значением линейной плотности АФГ на данном изображении — 0,05 мкм$^{-1}$.

4.2.2.6 Выводы

1. Островковый рост слоев $A^{III}B^{V}$ на созданной платформе Ge/Si/КНИ (001) завершается в зародышевом слое $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ толщиной (19±5) нм при используемых методом МОС-гидридной эпитаксии параметрах роста: отношение потоков V/III=80, температура роста 690 °C, скорость роста (0,95±0,24) нм/с.

2. После отжига платформы при температуре ≈730 °C в атмосфере водорода с арсином и коалесценции 3D островков $A^{III}B^{V}$ в зародышевом слое $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ рост $A^{III}B^{V}$ осуществляется преимущественно в режиме 2D-островковом.

3. Параметры роста буферных слоев $A^{III}B^{V}$: отношение потоков V/III=80, температура роста 690 °C способствуют аннигиляции основной плотности антифазных границ в пределах их толщины. При этом чем ниже скорость роста буферных слоев $A^{III}B^{V}$, тем за меньшую толщину происходит аннигиляция.

4. Отжиг при температуре ≈725 °C во время паузы после роста буферных слоев $A^{III}B^{V}$ с общим временем ≈30 мин способствует уменьшению плотности антифазных границ, а также модификации поверхности таким образом, что вклад в дальнейший рост от наиболее благоприятного для заращивания антифазных доменов ступенчатого режима роста становится преобладающим над 2D-островковым. Все это приводит к выравниванию фронта роста и, как следствие, к уменьшению среднеквадратичной шероховатости поверхности готовой гетероструктуры.

4.2.3 Система зародышевых слоев $Al_{0,3}Ga_{0,7}As/GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As$

Литературный обзор демонстрирует, что зародышевый слой $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ эффективен в уменьшении плотности антифазных границ как при использовании метода роста молекулярно-пучковой эпитаксии [95], так и при использовании метода роста МОС-гидридной эпитаксии [96] (см. раздел 1.2.1.3). Причины максимально положительного эффекта именно при использовании зародышевого слоя $Al_xGa_{1-x}As$ с долей атомов Al x=0,3 обсуждаются далее (см. раздел 4.2.3.2). Кроме того, применение системы зародышевых слоев $Al_{0,3}Ga_{0,7}As/GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ позволяет максимально уменьшить плотность антифазных границ (АФГ) [96]. Эффективность такой системы в уменьшении плотности АФГ подтверждена нами прямым методом ПЭМ. Например, на рисунках 31 и 35 видно, что АФГ аннигилируют преимущественно вблизи слоев AlGaAs.

Поскольку система зародышевых слоев $Al_{0,3}Ga_{0,7}As/GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ эффективно проявляет себя в уменьшении плотности антифазных границ, то актуальными являются исследования в направлении установления их эффективности в уменьшении плотности прорастающих дислокаций и в подавлении взаимной диффузии атомов на границе с A^{IV}.

Известно, что при эпитаксии III-V на Si использование вставки AlGaAs вблизи гетерограницы с Si совместно с термоциклическим отжигом является целесообразным способом уменьшения плотности прорастающих дислокаций, так как не добавляет значительной для трещинообразования толщины эпитаксиальных слоев [101, 102]. Механизмы такого эффекта описаны в разделе 1.2.2.3. Однако в работах [101, 102] слои III-V выращены непосредственно на кремниевой подложке, то есть рассогласование параметра решеток ≈4 %. В таком случае на гетерогранице с Si образуется высокая плотность прорастающих дислокаций (ППД) ~10^{10} см$^{-2}$. Во время роста III-V на гетероструктуре Ge/Si дислокации будут прорастать из нее, и их плотность будет иметь на порядки меньшее значение от 10^7 до 10^8 см$^{-2}$. Первый механизм уменьшения ППД при использовании вставки AlGaAs увеличивает вероятность аннигиляции прорастающих дислокаций (см. раздел 1.2.2.3), а, как известно вероятность аннигиляции также зависит и от значения начальной плотности прорастающих дислокаций [91]. Кроме того, как считают авторы статьи [101] основной причиной работы обоих механизмов уменьшения ППД является сильная энергия связи атомов Al-As. Во всех статьях, которые мы встречали на эту тему [101, 102], использовались вставки $Al_xGa_{1-x}As$ с долей атомов Al x=0,5. Следовательно, возникает вопрос эффективности вставки $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ с меньшей плотностью связей Al-As при росте III-V на системе Ge/Si (001) (такая система может быть как на подложках Si, так и на подложках класса КНИ) с использованием термоциклического отжига (ТЦО).

Ранее нами с помощью ПЭМ на поперечном срезе гетероструктур III-V/Ge/Si (001) с системой слоев AlAs/GaAs/AlAs, где во время роста III-V не использовался термоциклический отжиг, на подложках КНС (R-срез) (приложение Б) и Si (001) [A7] обнаружены области, где прорастающие дислокации (ПД) запирались между зародышевым слоем AlAs и вставкой AlAs. В данном случае вероятнее всего за изгиб ПД ответственен такой же механизм, который реализуется в случае использования дислокационных фильтров (см. раздел 1.2.2.2). Но более детальные исследования с помощью ПЭМ показали, что эффективность вставки AlAs в уменьшении плотности прорастающих дислокаций (ППД) незначительна (приложение Б). Этот результат объясняется низким значением рассогласования параметра решеток GaAs и AlAs, которое составляет 0,14 %. К примеру, в случае использования дислокационных фильтров (ДФ), которые эффективно проявляют себя в уменьшении ППД, рассогласование параметра решеток твердого раствора ДФ и GaAs в несколько раз больше и составляет от 0,84 % до 0,99 %. Ожидается, что при использовании вставки $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$, параметр решетки, которого ближе к GaAs, эффективность в уменьшении ППД будет еще ниже, что требует подтверждения.

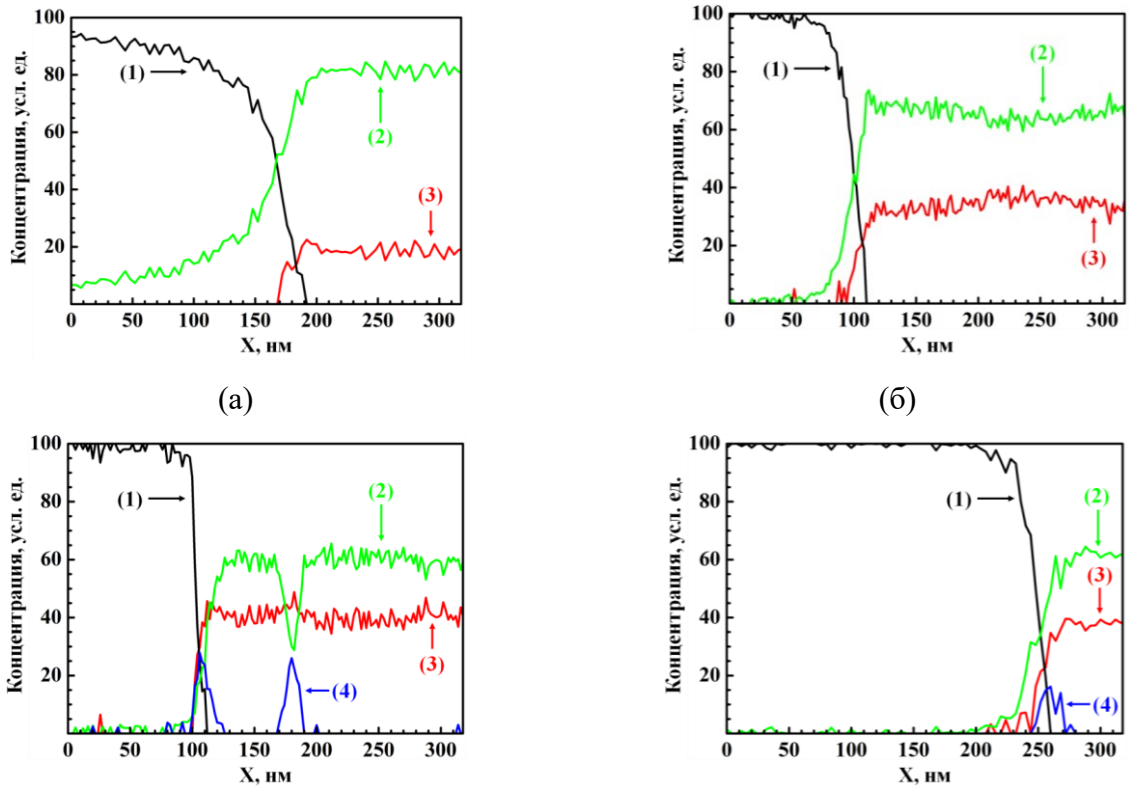
Эффективность подавления взаимной диффузии атомов на гетерогранице с Ge зародышевым слоем AlAs, а следовательно, и твердым раствором AlGaAs, зависит от ориентации подложки и угла отклонения среза (см. раздел 1.3). В данной диссертации впервые представлены результаты исследования методом энергодисперсионной спектроскопии эффективности зародышевого слоя $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ в подавлении взаимной диффузии атомов на гетерогранице с Ge, сформированного на Si (001) с отклонением среза <0,5°. Образцы для исследования методов подавления взаимной диффузии, результаты исследования которых представлены в данном разделе, за исключением образца с зародышевым слоем $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$, предоставлены с.н.с. НИФТИ ННГУ, к.ф.-м.н. Н.В. Байдусем.

4.2.3.1 Обработка результатов

Чувствительность по концентрации метода энергодисперсионной спектроскопии (ЭДС) до 1 ат. %, что для системы полупроводников GaAs/AlGaAs/Ge/Si имеет порядок 10^{20} см$^{-3}$. Безусловно, такой чувствительности недостаточно для полной характеризации диффузионного процесса. Однако зная механизмы диффузии атомов, можно экстраполировать результаты ЭДС для меньших концентраций. Такое решение будет иметь высокую точность при исследовании диффузии атомов Ge, так как известно, что диффузионный профиль атомов Ge в эпитаксиальный слой GaAs является независимым от концентрации [123]. Однако для атомов As, вероятно и для

атомов Ga, наблюдается два механизма диффузии: концентрационно-независимый до 10^{19} см$^{-3}$ и концентрационно-зависимый при концентрации ниже 10^{19} см$^{-3}$ [123]. Поэтому с помощью ЭДС нельзя получить полное описание диффузии атомов Ga и As, тем не менее, можно оценить эффективность различных подходов для подавления взаимной диффузии при сравнении с результатами для контрольного образца без их использования.

В диссертации представлены типичные результаты ЭДС-анализа систем слоев III-V/Ge (001) с углом отклонения среза <0,5° (рисунок 44). На рисунке 44 представлены ЭДС-профили гетерограницы с Ge образцов (а) без использования подходов для подавления взаимной диффузии атомов (б) с зародышевым слоем GaAs толщиной 60 нм, выращенном при пониженной температуре роста 480 °C, (в) с зародышевым слоем AlAs и (г) с зародышевым слоем $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$.



Зависимости распределения концентрации следующих атомов от координаты ЭДС-профиля (X): 1 — Ge; 2 — Ga; 3 — As; 4 — Al.

Рисунок 44 — ЭДС-профили гетерограницы III-V/Ge (001) с углом отклонения среза <0,5° (а) без использования каких-либо подходов для подавления взаимной диффузии атомов; (б) с зародышевым слоем GaAs толщиной 60 нм, выращенном при пониженной температуре роста 480 °C; (в) с зародышевым слоем AlAs; (г) с зародышевым слоем $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$

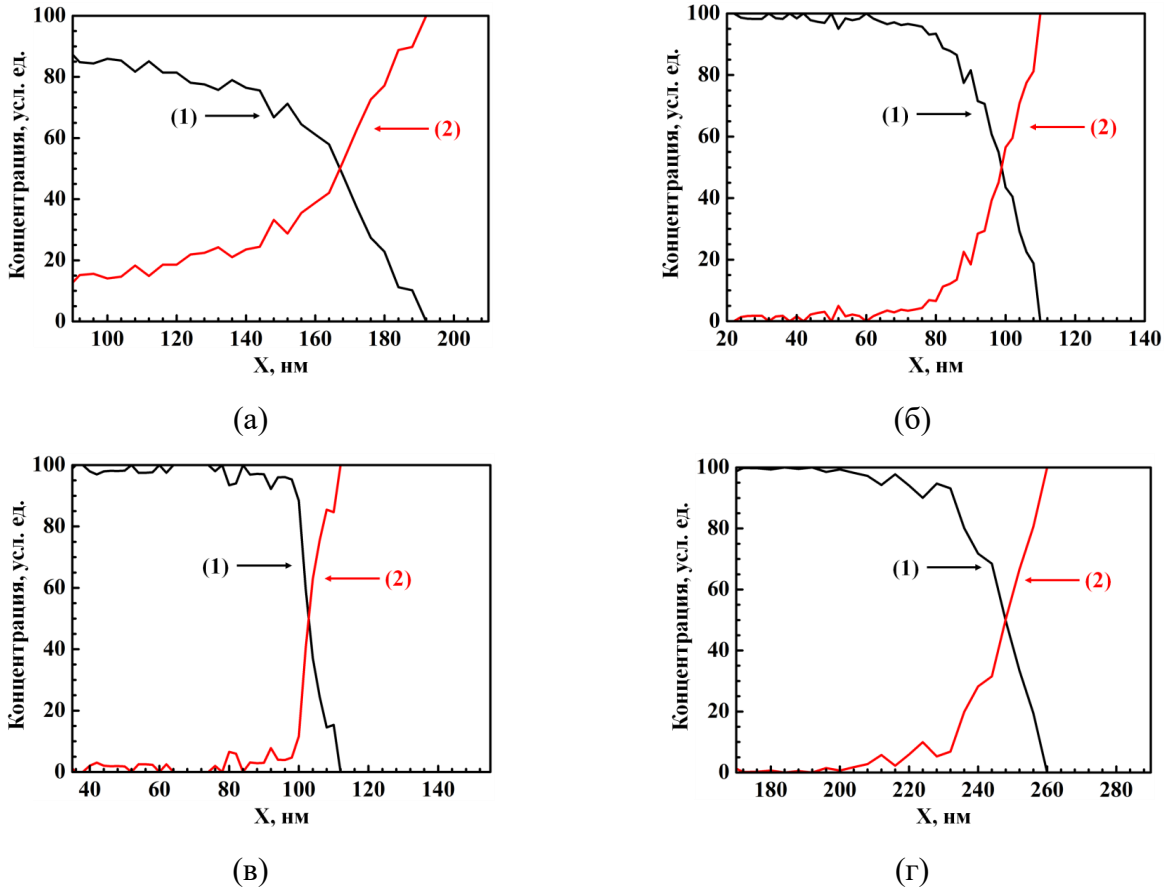
Примечания

1 Погрешность: по оси ординат — 5 усл. ед.; абсцисс — 4 нм.

2 Зависимости представлены в одном масштабе по обеим осям.

Для устранения погрешности измерений, связанной с определением положения гетерограницы, а также из-за получения значений концентраций в условных единицах эффективность подавления взаимной диффузии сравнивалась по ширине гетерограницы на ЭДС-профиле, в котором присутствовали две зависимости: черная зависимость — концентрация атомов Ge от координаты ЭДС-профиля (X), красная зависимость — суммарная концентрация атомов Al, Ga, As от X (рисунок 45). Ширина гетерограницы определялась как расстояние X между точками, соответствующим 5 усл. ед. по оси концентраций (соответствует шуму, измеренному в областях с однородным составом) по обе стороны от точки пересечения двух кривых. Погрешность измерения ширины гетерограницы определялась шагом профилирования по X и равна 4 нм.

По результатам ЭДС-анализа при отсутствии подходов для подавления взаимной диффузии ширина гетерограницы больше 190 нм (рисунок 45 (а)), при использовании зародышевого слоя GaAs толщиной 60 нм, выращенного при пониженной температуре роста 480 °C — (50±4) нм (рисунок 45 (б)), AlAs — (34±4) нм (рисунок 45 (в)) и $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ — (52±4) нм (рисунок 45 (г)).



1 — Зависимости распределения концентрации атомов Ge от координаты ЭДС-профиля (X); 2 — зависимости распределения суммарной концентрации атомов Al, Ga, As от X.

Рисунок 45 — Преобразованные ЭДС-профили гетерограницы III-V/Ge (001) с углом отклонения среза <0,5°, представленные на рисунке 44, (а) без использования каких-либо подходов для подавления взаимной диффузии атомов; (б) с зародышевым слоем GaAs толщиной 60 нм, выращенном при пониженной температуре роста 480 °C; (в) с зародышевым слоем AlAs; (г) с зародышевым слоем $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$

Примечания

1 Погрешность: по оси ординат — 5 усл. ед.; абсцисс — 4 нм.

2 Зависимости (а)–(г) представлены в одном масштабе по обеим осям.

4.2.3.2 Обсуждение результатов

ЭДС-анализ демонстрирует, что два подхода: использование пониженной температуры роста зародышевого слоя GaAs, а также рост зародышевого слоя Al(Ga)As позволяют ослабить взаимную диффузию (рисунок 44), что согласуется с литературными данными [123, 125, 127]. Наилучший эффект достигается при использовании зародышевого слоя AlAs. Подавление

взаимной диффузии в данном случае происходит из-за сильной энергии связи атомов Al-As [126]. Это предположение подтверждается и в наших экспериментах, так как при уменьшении плотности связей Al-As при использовании зародышевого слоя $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ ширина гетерограницы на ЭДС-профиле увеличивается (рисунок 45).

Экстраполируя данные ЭДС-анализа (рисунок 44 (г)), учитывая концентрационно-независимый профиль диффузии атомов Ge [123] и основываясь на результатах исследований, проведенных с помощью метода ВИМС [127], можно сделать вывод, что диффузия атомов Ge в слой GaAs значительно подавлена в пределах зародышевого слоя $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$.

Результаты ЭДС-анализа указывают на то, что использование зародышевого слоя $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ позволяет подавить взаимную диффузию атомов на гетерогранице с Ge не только в случае кристаллографической ориентации (001), отклоненной на 6° в направлении <111>, но и в случае ориентации (001) с углом отклонения среза <0,5°.

Что касается причины максимально положительного эффекта аннигиляции антифазных границ именно при использовании зародышевого слоя $Al_xGa_{1-x}As$ с долей атомов Al x=0,3 при эпитаксии III-V на платформе Ge/Si (001) или Ge/Si/КНИ (001), то нами предполагается, что соотношение деформаций на интерфейсах $Al_xGa_{1-x}As$/Ge и GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ может влиять на отношение скоростей роста разных фаз III-V. В работе [127] продемонстрировано, что в системе GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$/Ge (001) деформация растяжения на интерфейсе $Al_xGa_{1-x}As$/Ge выравнивается с деформацией сжатия на интерфейсе GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ при x близком к 0,3, что приводит значение среднеквадратичной шероховатости поверхности к минимуму. Данный факт указывает на то, что система GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$/Ge имеет минимум поверхностной энергии при x=0,3, так как площадь ее поверхности минимальна. Поскольку системе энергетически выгоднее иметь одну фазу, то она будет стремиться перенаправить плоскости распространения антифазных границ (АФГ) на плоскости с индексами большего порядка, имеющие меньший угол с латеральной плоскостью, чтобы ускорить переход к одной фазе. Поскольку система GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$/Ge имеет минимум поверхностной энергии при x=0,3, то это косвенно подтверждает, что для перенаправления плоскости распространения АФГ на плоскости с индексами большего порядка при x=0,3 требуется меньше энергии. Данный факт ведет к тому, что увеличивается отношение скоростей роста разных фаз и аннигиляция АФГ происходит за меньшую толщину III-V.

В случае роста $Al_xGa_{1-x}As$ непосредственно на поверхности Si [95] рассогласование параметра решеток достаточно велико ≈0,04 и слабо зависит от x. Поэтому в данном случае за аннигиляцию АФГ вероятнее всего ответственен другой механизм.

Что касается запирания прорастающих дислокаций (ПД) вставкой $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ в гетероструктурах с буферным слоем Ge на точно ориентированной подложке (001), то при исследовании образцов B (Ge/Si/КНИ) и E (Ge/Si/КНИ), где применялся термоциклический

отжиг (ТЦО) во время паузы роста III-V, не обнаружено подобных случаев, что указывает на то, что их линейная плотность незначительна и меньше 0,1 мкм$^{-1}$. А тот факт, что в гетероструктурах с буферным слоем Ge (001) и без использования ТЦО во время роста III-V обнаружены области на ПЭМ-изображениях, в которых происходил эффект запирания ПД на вставке AlAs (приложение Б, [А7]), указывает на то, что доли Al x=0,3 недостаточно для изгиба ПД.

4.2.3.3 Выводы

Исследовано влияние системы буферных слоев $Al_{0,3}Ga_{0,7}As/GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ в гетероструктуре III-V/Ge на подложке с кристаллографической ориентацией (001) и отклонением среза <0,5° на различного рода дефекты и взаимную диффузию атомов на гетерогранице с Ge. Зародышевый слой $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ является эффективным в борьбе с взаимной диффузией атомов. Использование вставки $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ даже с применением во время роста термоциклического отжига не играет существенной роли в уменьшении плотности прорастающих дислокаций, однако оказывает положительное влияние на уменьшение плотности антифазных границ.

4.2.4 Выводы

Для формирования буферных слоев $A^{III}B^{V}$ методом МОС-гидридной эпитаксии на созданной платформе Ge/Si/КНИ (001) сформулированы следующие рекомендации.

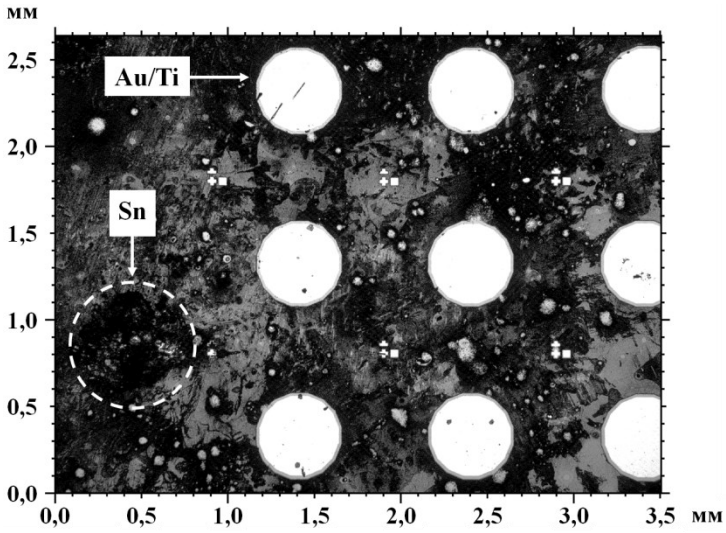
В качестве параметров роста буферных слоев $A^{III}B^{V}$ рекомендуется использовать температуру роста 690 °C, отношение потоков V/III равное 80, низкие скорости роста ≈0,3 нм/с. В качестве зародышевых слоев необходимо использовать систему $Al_{0,3}Ga_{0,7}As/GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ с толщинами слоев AlGaAs и GaAs равными 25 и 50 нм соответственно. После роста буферного слоя GaAs во время проведения термоциклического отжига (ТЦО) необходимо сделать выдержку при высокой температуре 725 °C с общим временем 30 мин. После ТЦО требуется повторить рост буферного слоя GaAs. В случае толщины конечной гетероструктуры $A^{III}B^{V}$ меньше критической толщины для трещинообразования или в случае использования подходов для контролирования образования термических трещин рекомендуется выращивать дислокационные фильтры $In_{0,14}Al_{0,86}As/GaAs$ с толщинами твердого раствора ≈10 нм, но не более 13 нм, а разделительного слоя GaAs >15 нм.

На основе результатов раздела 4.2 выносится на защиту положение № 2 — комплекс технологических операций и режимов роста при формировании буферных слоев $A^{III}B^{V}$ методом МОС-гидридной эпитаксии на созданной платформе Ge/Si/КНИ (001), способствующий уменьшению плотности прорастающих дислокаций, антифазных дефектов, подавлению взаимной диффузии атомов на гетерогранице с Ge, а также выравниванию поверхности.

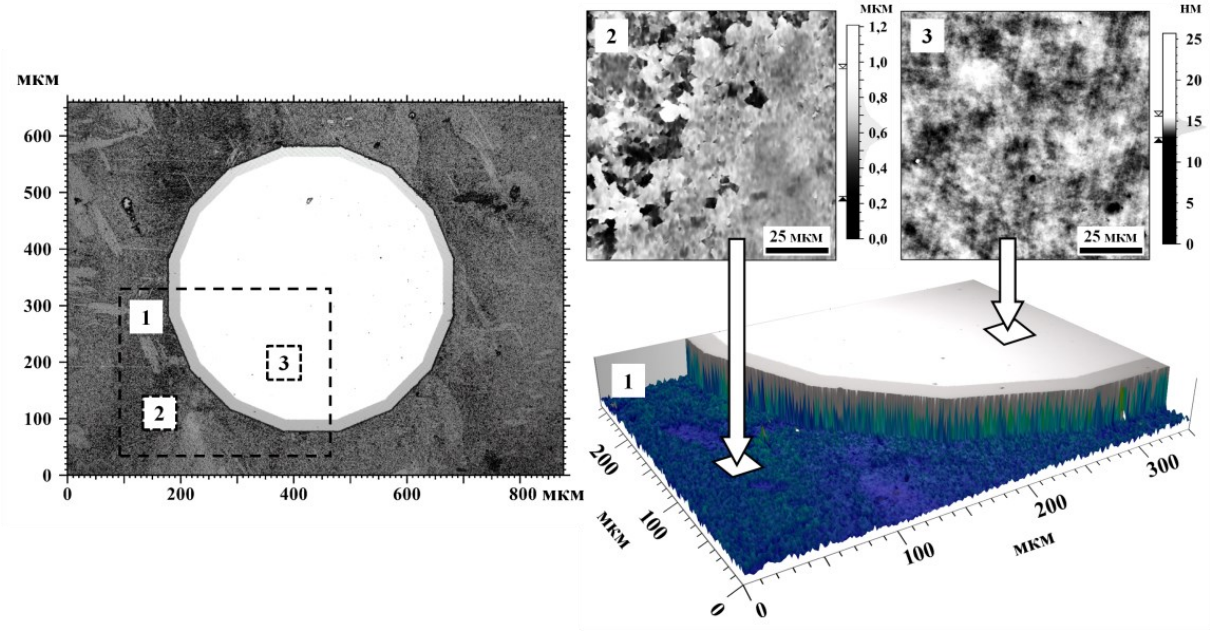
4.3 Исследование светоизлучающих p-i-n диодов

При проведении литературного обзора не найдено работ по созданию светоизлучающих гетероструктур III-V на подложках КНИ (001) методами эпитаксиального осаждения через буферные слои III-V/Ge/Si. Поэтому создание светоизлучающего p-i-n диода на основе гетероструктуры III-V/Ge/Si/КНИ (001) является новизной диссертации.

Формирование светоизлучающих, планарных p-i-n диодов осуществлялось на гетероструктурах D на подложке GaAs (001) и E на созданной платформе Ge/Si/КНИ (001), параметры и режимы роста которых описаны в разделе 4.1. Технология изготовления диодов представлена в разделе 2.2. Их внешний вид и морфология поверхности представлены на рисунках 46, 47.



(а)



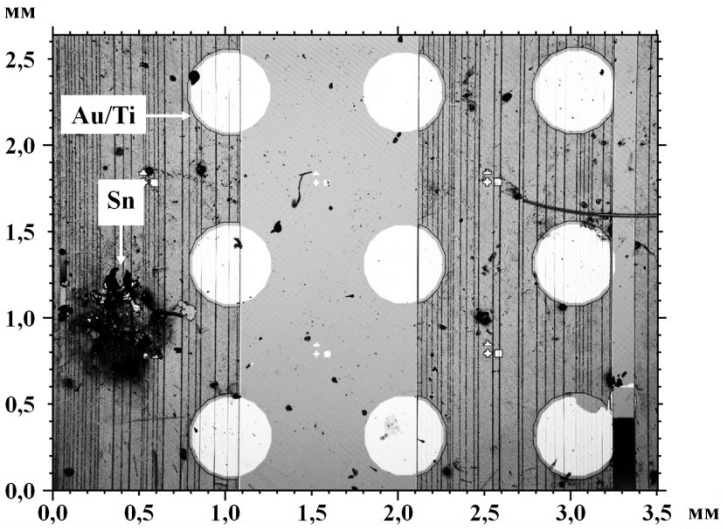
(б)

1 — 3D визуализация VSI-изображения части мезы (перепады высот не соответствуют по масштабу латеральным размерам, высота мезы равна (2,3±0,1) мкм);

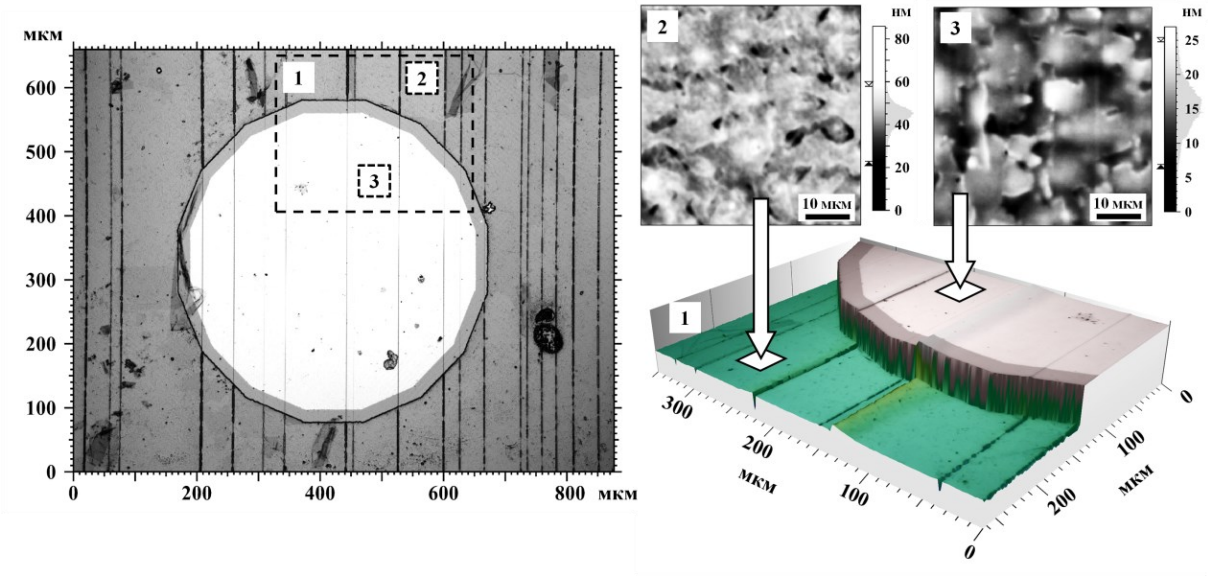
2 — PSI-изображение вытравленной области (RMS=110 нм);

3 — PSI-изображение поверхности n-контакта с нанесенными пленками металлов Au/Ti суммарной толщины 15 нм (RMS=0,5 нм).

Рисунок 46 — Изображения, полученные методом конфокальной микроскопии, (а) поверхности образца D (GaAs) со сформированной меза-структурой и нанесенным Sn методом вжигания; (б) поверхности отдельной мезы



(а)



(б)

1 — 3D визуализация VSI-изображения части мезы (перепады высот не соответствуют по масштабу латеральным размерам, высота мезы равна (2,3±0,1) мкм);

2 — PSI-изображение вытравленной области (RMS=5,3 нм);

3 — PSI-изображение поверхности n-контакта с нанесенными пленками металлов Au/Ti суммарной толщины 15 нм (RMS=3,2 нм).

Рисунок 47 — Изображения, полученные методом конфокальной микроскопии, (а) поверхности образца E (Ge/Si/КНИ) со сформированной меза-структурой и нанесенным Sn методом вжигания; (б) поверхности отдельной мезы

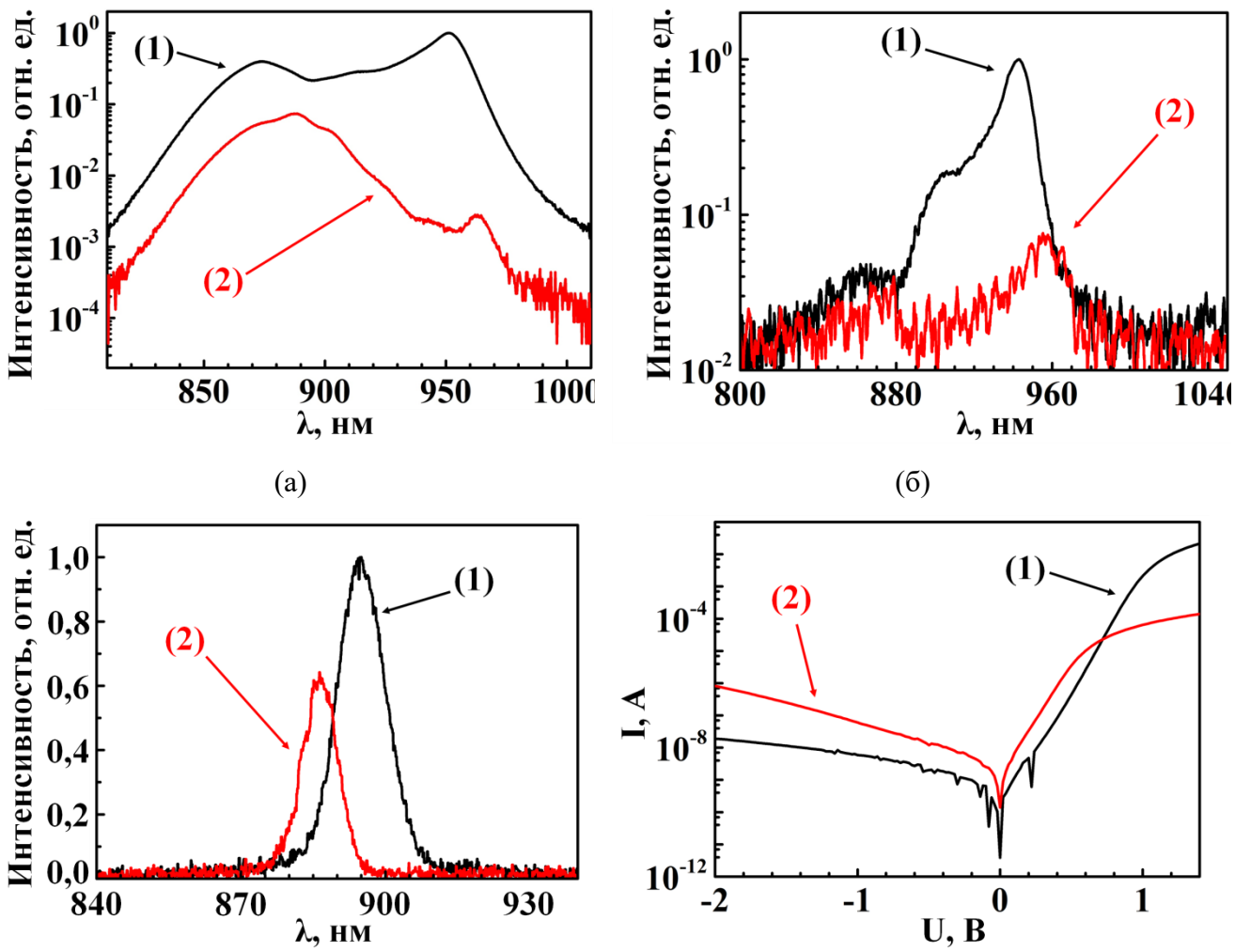
4.3.1 Обработка результатов

Типичные спектры фотолюминесценции гетероструктур D (GaAs) и E (Ge/Si/КНИ) с тремя квантовыми ямами $In_{0,14}Ga_{0,86}As/GaAs$, полученные при комнатной температуре при одинаковых параметрах схемы измерения с использованием светодиода с длиной волны 785 нм и оптической плотностью мощности 700,6 Вт/см^2, представлены на рисунке 48 (а). Средние параметры фотолюминесценции пиков от квантовых ям InGaAs/GaAs и их стандартные отклонения по площади 380 мм^2 представлены в таблице 13.

Таблица 13 — Средние параметры фотолюминесценции (ФЛ) пика от квантовых ям (КЯ) InGaAs/GaAs и их стандартные отклонения по площади 380 мм^2 на спектрах ФЛ, полученных при комнатной температуре от образцов D (GaAs) и E (Ge/Si/КНИ). Интенсивность нормирована на интенсивность максимума пика ФЛ от КЯ в гетероструктуре на подложке GaAs

Образец	λ, нм		Интенсивность, норм. ед.	
	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.
D	951,0	±0,4	1,00	±0,04
E	962,6	±1,1	$2{,}9\cdot10^{-3}$	$\pm0{,}4\cdot10^{-3}$

Спектры электролюминесценции светоизлучающих p-i-n диодов, изготовленных из образцов D (GaAs) и E (Ge/Si/КНИ), при температурах 300 К и 77 К представлены на рисунке 48 (б), (в) соответственно. В случае 77 К параметры схем измерений были одинаковыми: ток — 3 мА, размер щелей — 0,5 мм. При температуре 300 К для образца D значение тока и размер щелей были меньше — 10 мА и 0,5 мм соответственно, чем для образца E — 13 мА и 2 мм соответственно. Вольтамперные характеристики планарных p-i-n диодов, снятые при комнатной температуре, представлены на рисунке 48 (г).



1 — Зависимости для образца D (GaAs); 2 — зависимости для образца E (Ge/Si/КНИ).

Рисунок 48 — (а) Типичные спектры фотолюминесценции (ФЛ) III-V-гетероструктур на подложке GaAs (001) (образец D) и платформе Ge/Si/КНИ (001) (образец E); (б), (в) типичные спектры электролюминесценции, полученные при температурах 300 К и 77 К соответственно; (г) вольтамперные характеристики (ВАХ) от светоизлучающих p-i-n диодов образцов D, E

Примечания

1 Температура при измерении: (а), (б), (г) — 300 К; (в) — 77 К.

2 Параметры схем измерений образцов D и E: (а), (в) — одинаковые; (б) — разные (см. раздел 4.3.1).

3 Интенсивность спектров ФЛ и ЭЛ нормирована на интенсивность максимума пика от квантовых ям в гетероструктуре на подложке GaAs (образец D) на соответствующем спектре.

4 Отрицательные значения токов при обратном смещении на ВАХ представлены по модулю.

4.3.2 Обсуждение результатов

На спектрах фотолюминесценции (ФЛ) при комнатной температуре наблюдался пик от квантовых ям InGaAs/GaAs. Однако интенсивность пика в образце D на подложке GaAs на три порядка больше, чем в образце E на созданной платформе Ge/Si/КНИ. Данный факт объясняется наличием трещин и других дефектов (антифазных границ, дислокаций) в образце E, которые являются центрами рассеяния света и безызлучательной рекомбинации соответственно.

Предполагается, что резкое уменьшение значения отношения сигнал/шум электролюминесценции (ЭЛ) при комнатной температуре от квантовых ям образца E (Ge/Si/КНИ) (рисунок 48 (б)) по сравнению с ФЛ (рисунок 48 (а)) связано со значительным увеличением плотности трещин при раскалывании исходного образца на фрагменты для исследований разрушающими методами и для создания светоизлучающего p-i-n диода. Трещины для ЭЛ более критичны, так как напрямую перекрывают путь току. Установлено, что на созданной нами платформе Ge/Si/КНИ (001) с толщиной слоя Ge ≈1 мкм критическая толщина слоев III-V для образования трещин лежит в диапазоне от 1,9 до 4,7 мкм. Для уточнения этого значения требуется большее количество ростовых экспериментов с варьируемым значением общей толщины слоев III-V.

Что касается светоизлучающего p-i-n диода образца D (GaAs), то на спектре ЭЛ при комнатной температуре можно увидеть плечо у пика от энергетического перехода 1e-1hh квантовых ям InGaAs/GaAs, уширенное в область коротких длин волн. Данное уширение можно объяснить энергетическими переходами 1e-2hh и 1e-1lh.

При температуре 77 К картина на спектрах ЭЛ резко меняется. Так, для светоизлучающих диодов образцов D (GaAs) и E (Ge/Si/КНИ) просматриваются четкие достаточно узкие пики от энергетического перехода 1e-1hh с полной шириной на полувысоте (FWHM) ≈10 нм и одного порядка интенсивности. Уменьшение интенсивности пика от квантовых ям в диоде образца E (Ge/Si/КНИ) на спектре ЭЛ при комнатной температуре по сравнению с интенсивностью пика на спектре ЭЛ при 77 К объясняется температурным тушением люминесценции полупроводников. Данный эффект заключается в том, что вероятность излучательных переходов не зависит от температуры, однако вероятность безызлучательных переходов увеличивается с увеличением температуры [86]. Так как образец E на платформе Ge/Si/КНИ имеет дефекты: прорастающие дислокации, антифазные границы, которые являются центрами безызлучательной рекомбинации, то при повышении температуры измерений электролюминесценции увеличивается вероятность рекомбинации электронно-дырочной пары именно на дефектах без излучения, что в целом уменьшает интенсивность ЭЛ. Отсутствие плеча у пика на спектре ЭЛ

при 77 К диода образца D (GaAs) можно объяснить меньшим более чем в 3 раза током. Смещение максимума пика ЭЛ от энергетического перехода 1e-1hh квантовых ям InGaAs/GaAs у диода образца E (Ge/Si/КНИ) относительно диода образца D (GaAs) объясняется деформациями решетки активной области в образце E.

Вольтамперные характеристики показали хорошие выпрямляющие свойства диодов и достаточно низкие обратные токи: ток при обратном смещении минус 1,4 В для гетероструктуры D на подложке GaAs равный по модулю 10^{-8} А на шесть порядков ниже тока при прямом смещении 1,4 В, а для гетероструктуры E на платформе Ge/Si/КНИ на три порядка меньше и составлял по модулю $1{,}9 \cdot 10^{-7}$ А. Меньшее на два порядка значение тока при прямом смещении 1,4 В в образце E по сравнению с образцом D объясняется дефектностью гетероструктуры E на платформе Ge/Si/КНИ.

4.3.3 Выводы

Впервые продемонстрирована фотолюминесценция при комнатной температуре гетероструктуры $A^{III}B^{V}$ на основе квантовых ям $In_{0,14}Ga_{0,86}As$/GaAs, выращенной методом МОС-гидридной эпитаксии на платформе Ge/Si/КНИ (001). Созданные светоизлучающие p-i-n диоды на основе данной гетероструктуры и на основе контрольного образца на подложке GaAs (001) демонстрируют электролюминесценцию при температуре 77 К одного порядка интенсивности. Вольтамперные характеристики диода на основе гетероструктуры III-V/Ge/Si/КНИ (001), измеренные при комнатной температуре, показали хорошие выпрямляющие свойства диода и достаточно низкие обратные токи: ток при обратном смещении минус 1,4 В на три порядка меньше тока при прямом смещении 1,4 В.

На основе результатов раздела 4.3 выносится на защиту положение № 3 — комплекс отработанных технологических операций и режимов роста при формировании буферных слоев $A^{III}B^{V}$ методом МОС-гидридной эпитаксии на созданной платформе Ge/Si/КНИ (001) обеспечивает получение электролюминесценции светоизлучающего p-i-n диода.

4.4 Выводы к главе 4

Продемонстрировано, что дислокационные фильтры InAlAs/GaAs эффективнее, чем дислокационные фильтры InGaAs/GaAs в уменьшении плотности прорастающих дислокаций. Кроме этого, показано, что эффективность дислокационных фильтров зависит от начальной плотности прорастающих дислокаций — чем выше начальная плотность, тем эффективнее дислокационная фильтрация. Однако стоит учитывать, что использование дислокационных фильтров увеличивает вероятность образования термических трещин в системах $A^{III}B^{V}$/Ge/Si.

Установлены закономерности формирования эпитаксиальных слоев $A^{III}B^{V}$ на созданной платформе Ge/Si/КНИ (001). Островковый рост слоев $A^{III}B^{V}$ на Ge/Si/КНИ (001) завершается в зародышевом слое $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ толщиной (19±5) нм при используемых методом МОС-гидридной эпитаксии параметрах роста: отношение потоков V/III=80, температура роста 690 °C, скорость роста (0,95±0,24) нм/с. После отжига платформы при температуре ≈730 °C в атмосфере водорода с арсином и после коалесценции 3D островков $A^{III}B^{V}$ рост $A^{III}B^{V}$ осуществляется преимущественно в режиме 2D-островковом. Параметры роста зародышевого слоя и других буферных слоев $A^{III}B^{V}$: отношение потоков V/III=80, температура роста 690 °C способствуют аннигиляции основной плотности антифазных границ в пределах их толщины. При этом чем ниже скорость роста буферных слоев $A^{III}B^{V}$, тем за меньшую толщину происходит аннигиляция. Отжиг при температуре ≈725 °C во время паузы после роста буферных слоев $A^{III}B^{V}$ с общим временем ≈30 мин способствует уменьшению плотности антифазных границ, а также модификации поверхности таким образом, что вклад в дальнейший рост от наиболее благоприятного для заращивания антифазных доменов ступенчатого режима роста становится преобладающим над 2D-островковым. Все это приводит к выравниванию фронта роста и, как следствие, к уменьшению среднеквадратичной шероховатости поверхности готовой гетероструктуры.

Исследовано влияние системы буферных слоев $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$/GaAs/$Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ в гетероструктуре $A^{III}B^{V}$/Ge на подложке с кристаллографической ориентацией (001) и отклонением среза <0,5° на различного рода дефекты и взаимную диффузию атомов на гетерогранице с Ge. Зародышевый слой $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ является эффективным в борьбе с взаимной диффузией атомов. Использование вставки $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ даже с применением во время роста термоциклического отжига не играет существенной роли в уменьшении плотности прорастающих дислокаций, однако оказывает положительное влияние на уменьшение плотности антифазных границ.

Впервые продемонстрирована фотолюминесценция при комнатной температуре гетероструктуры $A^{III}B^{V}$ на основе квантовых ям $In_{0,14}Ga_{0,86}As/GaAs$, выращенной методом МОС-гидридной эпитаксии на платформе Ge/Si/КНИ (001). Созданные светоизлучающие p-i-n диоды на основе данной гетероструктуры и на основе контрольного образца на подложке GaAs (001) демонстрируют электролюминесценцию при температуре 77 К одного порядка интенсивности. Вольтамперные характеристики диода на основе гетероструктуры III-V/Ge/Si/КНИ (001), измеренные при комнатной температуре, показали хорошие выпрямляющие свойства диода и достаточно низкие обратные токи: ток при обратном смещении минус 1,4 В на три порядка меньше тока при прямом смещении 1,4 В.

Следовательно, созданная платформа Ge/Si/КНИ (001), удовлетворяющая критериям: плотность прорастающих дислокаций $\sim 10^{7}$ см$^{-2}$, среднеквадратичная шероховатость поверхности <1 нм — и внедренные в процесс МОС-гидридной эпитаксии методы уменьшения плотности дефектов и шероховатости поверхности могут быть использованы для создания светоизлучающих гетероструктур $A^{III}B^{V}$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проанализированы технологические пути преодоления фундаментальных проблем интеграции эпитаксиальных слоев полупроводников $A^{III}B^{V}$ с кремнием при формировании на подложках класса «кремний-на-изоляторе».

Установлено, что платформа Ge/Si/КНИ удовлетворяет требуемым критериям для роста светоизлучающих гетероструктур $A^{III}B^{V}$: плотность прорастающих дислокаций ~10^7 см$^{-2}$, среднеквадратичная шероховатость поверхности <1 нм, если использовать в качестве подложки класса «кремний-на-изоляторе» одноименную подложку типа «кремний-на-изоляторе» ($Si/SiO_2/Si$ (001)), изготовленную по технологии Smart Cut, а в качестве метода роста слоев Ge/Si метод молекулярно-пучковой эпитаксии с применением двухстадийного режима роста Ge, термоциклического отжига в вакууме и оптимизированных температурных режимов. Продемонстрировано, что созданная платформа Ge/Si/КНИ (001) может быть использована для роста слоев $A^{III}B^{V}$ со структурными и с оптическими свойствами, не уступающими слоям $A^{III}B^{V}$, сформированным на платформе Ge/Si (001).

Исследованы и внедрены методы уменьшения плотности дефектов и шероховатости поверхности в выращиваемых гетероструктурах $A^{III}B^{V}$ на созданной платформе Ge/Si/КНИ (001), которые позволили сформировать светоизлучающую гетероструктуру $A^{III}B^{V}$, демонстрирующую фотолюминесценцию при комнатной температуре, а также создать на ее основе p-i-n диод, демонстрирующий электролюминесценцию при температуре 77 К одного порядка интенсивности с интенсивностью электролюминесценции от p-i-n диода, созданного на основе контрольного образца на подложке GaAs (001).

Результаты диссертации указывают на возможность создания светоизлучающей гетероструктуры $A^{III}B^{V}$ методом МОС-гидридной эпитаксии на сформированной платформе Ge/Si/КНИ (001) и служат научным заделом для развития данного направления.

Представляются актуальными исследования модификации поверхности созданной платформы Ge/Si/КНИ (001) с помощью отжига при высокой температуре в атмосфере водорода с целью создания благоприятных начальных условий для полного заращивания антифазных доменов полупроводников $A^{III}B^{V}$. Также необходима дальнейшая оптимизация внедренных в процесс МОС-гидридной эпитаксии гетероструктур $A^{III}B^{V}$ методов уменьшения плотности дефектов и шероховатости поверхности для минимизации толщины буферных слоев и приближения к характеристикам гетероструктур, получаемых на подложках GaAs (001).

Список сокращений и условных обозначений

III-V — соединение полупроводников, состоящее из элементов III и V группы таблицы Менделеева

ИМС — интегральная микросхема

КНИ — в зависимости от контекста со словом «класс» или без него означает целый класс подложек «кремний-на-изоляторе» или конкретный тип «кремний-на-изоляторе» соответственно

АФГ — антифазная граница (APB — antiphase boundary)

ПД — прорастающая дислокация (TD — threading dislocation)

ДН — дислокация несоответствия (MD — misfit dislocation)

КНС — подложка «кремний-на-сапфире», относящаяся к классу подложек «кремний-на-изоляторе»

T — температура

АФД — антифазный домен (APD — antiphase domain)

γ — угол или проекция угла отклонения среза подложки от кристаллографической плоскости {001} в направлении <110>

МПЭ — молекулярно-пучковая эпитаксия

МОС-гидридная эпитаксия (МОСГЭ) — метод газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений

L — средний размер островков III-V

A, B ступени — ступени на поверхности полупроводника III-V, у которых края параллельны и перпендикулярны димерам атомов группы V соответственно

α- и β-фазы — две различные фазы кристалла III-V, имеющие соответственно больше ступеней A и ступеней B на поверхности

ФЛ — фотолюминесценция, метод спектроскопии фотолюминесценции

a — параметр решетки

a_l — параметр решетки материала эпитаксиального слоя

a_s — параметр решетки материала подложки

f — рассогласование параметра решеток двух материалов

h_c — теоретическая (равновесная) критическая толщина

h_c^{exp} — экспериментальная критическая толщина

КЯ — квантовая яма

КТ — квантовая точка

b — модуль вектора Бюргерса дислокации

ν — коэффициент Пуассона

α_1 — угол между вектором Бюргерса и линией дислокации

λ_1 — угол между вектором Бюргерса и лежащим в плоскости границы раздела слоя и подложки перпендикуляром к пересечению плоскости скольжения дислокации и поверхности подложки

β_1 — параметр ядра дислокации

α-ДН — дислокация несоответствия в полупроводнике III-V с атомами III группы в своем ядре

β-ДН — дислокация несоответствия в полупроводнике III-V с атомами V группы в своем ядре

ППД — плотность прорастающих дислокаций (TDD — threading dislocation density)

ЭЛ — электролюминесценция, спектроскопия электролюминесценции

КТР — коэффициент термического расширения

ЭС — эпитаксиальный слой

ТЦО — термоциклический отжиг (TCA — thermal cyclic annealing)

РД — метод рентгеновской дифрактометрии (XRD — X-ray diffraction)

EPD — etch pit density (плотность «ямок» травления от дефектов)

RMS — root mean square (среднеквадратичная шероховатость поверхности)

C α/β — коэффициент дисбаланса скорости роста фаз α и β, который представляет собой отношение скорости роста α-фазы к скорости роста β-фазы

ex-situ — подразумевается после роста

FWHM — full width at half maximum (полная ширина на полувысоте)

HWCVD — hot-wire chemical vapor deposition (газофазное осаждение с разложением моногермана на «горячей проволоке»)

ДФ — дислокационный фильтр (DF — dislocation filter)

s_0 — толщина разделительного слоя в ДФ, при которой остаточные напряжения спадают до нуля

LT — low temperature (низкая температура)

LT-GaAs — слой GaAs, выращенный при пониженной температуре

D_c — коэффициент диффузии

D_0 — коэффициент, зависящий от структуры кристалла и механизма диффузии

E_a — энергия активации

k_B — коэффициент Больцмана

ВИМС — метод вторично-ионной масс-спектрометрии, вторично-ионный масс-спектрометр

ГФЭ — газофазная эпитаксия

in-situ — подразумевается во время роста

HT — high temperature (высокая температура)

HT-Ge — слой Ge, выращенный при высокой температуре

n, p — концентрация носителей заряда электронов, дырок соответственно

p+GaAs, n+GaAs — сильнолегированные слои GaAs p- и n-типа соответственно

Фронт роста — поверхность растущего слоя

r — отражательная способность

C — кривизна поверхности

r_∞ — центральное значение осцилляций r

АСМ — метод атомно-силовой микроскопии, атомно-силовой микроскоп

PSI — phase-shifting interferometry (интерференционная микроскопия с фазовым сдвигом)

АСМ-скан — скан, полученный методом АСМ

ПО — программное обеспечение

Плотность АФГ — линейная плотность АФГ, которая рассчитывается как длина АФГ, деленная на площадь изображения

PSI-изображение — изображение, полученное методом PSI

VSI — vertical scanning interferometry (метод интерференционной микроскопии с вертикальным сканированием)

ПЭМ — метод просвечивающей электронной микроскопии, просвечивающий электронный микроскоп

СПЭМ — метод сканирующей просвечивающей электронной микроскопии

(С)ПЭМ-изображение — изображение, полученное методом (С)ПЭМ

ВРПЭМ-изображение — ПЭМ-изображение высокого разрешения

МГФ — метод анализа геометрической фазы

Линейная ППД — линейная плотность прорастающих дислокаций, представляющая собой отношение числа прорастающих дислокаций на поперечном срезе определенной длины к этой длине

ОМ — оптическая микроскопия, оптический микроскоп

ОМ-изображение — изображение, полученное с помощью ОМ

ЭДС — метод энергодисперсионной спектроскопии (EDS — energy-dispersive X-ray spectroscopy)

ECV — electrochemical capacitance-voltage profiling (метод электрохимического CV профилирования)

ВАХ — вольтамперная характеристика

N — общее количество 90° ДН и пары несвязанных ДН 60°

L_1 — общая длина участков ВРПЭМ-изображений, в которых проведена расшифровка ДН

d_1, d_2 — межплоскостные расстояния $(\bar{1}10)$ Si и Ge соответственно

L_2 — длина сшитых друг с другом СПЭМ-изображений

ЛС — линия сглаживания после сшифки СПЭМ-изображений

α_2 — угол между кристаллографическими направлениями [001] слоя Si и подложки Si в гетероструктуре КНИ

ε — относительная деформация

ε_{Si} — деформация в кристаллографическом направлении [001] слоя Si относительно подложки Si в гетероструктуре КНИ

s — толщина скрытого слоя SiO_2 в КНИ

ЛТ — линия трещины на поперечном срезе

φ — угол вращения нормали поверхности держателя образца в дифрактометре

ω — угол между падающим рентгеновским лучом и поверхностью образца

ω_0 — ноль функции $\cos(\varphi-\eta)$

δ — угол между нормалью к поверхности держателя образца в дифрактометре и кристаллографическим направлением [001] исследуемого материала

η — азимут кристаллографического направления [001], исследуемого в дифрактометре материала

2θ — угол между падающим на образец и дифрагированным от него рентгеновским лучом

g — вектор отражения

ε_{zz} — относительная деформация в направлении перпендикулярном гетерогранице

ε_{xx} — относительная деформация в латеральном направлении, то есть лежащем в плоскости гетерограницы

Q_x, Q_z — координаты обратного пространства

λ — длина волны излучения

Perpendicular MM — рассогласование межплоскостных расстояний слоя и подложки в кристаллографическом направлении [001]

Bulk MM — рассогласование параметра решеток слоя и подложки при релаксации слоя 100%

Parallel MM — рассогласование межплоскостных расстояний слоя и подложки в кристаллографическом направлении типа <110>

$\varepsilon^*_{zz}(\varepsilon_{xx})$ — зависимость нормальной деформации (ε^*_{zz}) от латеральной деформации (ε_{xx}) в кубической решетке

$R_{[hkl]}$ — релаксация решетки эпитаксиального слоя в кристаллографическом направлении [hkl]

E_{max} — максимум пика на спектре фотолюминесценции

χ — эффективность дислокационного фильтра (ДФ), представляющая собой отношение линейной плотности прорастающих дислокаций, дошедших до ДФ, к линейной ППД, дошедших до поверхности гетероструктуры

ЭДС-профиль (EDS-profile) — профиль на поперечном срезе, вдоль которого проводилась энергодисперсионная спектроскопия

КД — коэффициент диссипации (dissipation factor)

p_l — слоевая концентрация носителей заряда дырок

μ_H — холловская подвижность носителей заряда

μ — подвижность носителей заряда

[C] — концентрация атомов углерода в решетке GaAs

R — процент ошибки в усл. ед., значение которого характеризует несоответствие смоделированного (2θ-ω)-скана с экспериментальным.

ФП — Фурье-преобразование

СР — сверхрешетка

F_{hkl} — структурная амплитуда

N_{at} — число базисных атомов

f_{at} — атомный рассеивающий фактор

x_j, y_j, z_j — координаты j-го базисного атома в элементарной ячейке в долях от размера соответствующих векторов решетки **a**, **b**, **c**.

γ^*, угол разориентации подложки — угол отклонения плоскости среза от кристаллографической плоскости подложки

D_t — период сверхрешетки

φ^* — угол поворота образца в своей плоскости, отсчитываемый от направления отклонения среза

η^* — угол поворота проекции направления отклонения среза на плоскость (001) против часовой стрелки от кристаллографического направления [110]

d (III-V) — толщина слоя III-V

l — ширина гетерограницы

Δd — погрешность измерения толщины d

Δd_1 — сумма полуширин гетерограниц слоя

Δd_2 — размер пикселя на изображении, умноженный на коэффициент 1,96/3, что соответствует приборной погрешности для доверительной вероятности 0,95

D_b — ширина террас на поверхности полупроводника в кристаллографическом направлении <110>

κ — коэффициент, зависящий от высоты ступени: для одноатомных ступеней κ=4, для двухатомных ступеней κ=2.

Благодарности

Выражаю признательность научной группе НИФТИ ННГУ в.н.с., д.ф.-м.н. В. Г. Шенгурова, а именно н.с., к.ф.-м.н. С. А. Денисову и м.н.с. В. Ю. Чалкову, а также с.н.с. ИФМ РАН, к.ф.-м.н. Д. В. Юрасову за проведение роста слоя Ge методами HWCVD и МПЭ соответственно, с.н.с. НИФТИ ННГУ, к.ф.-м.н. Н. В. Байдусю и м.н.с. НИФТИ ННГУ А. В. Рыкову за проведение роста слоев III-V методом МОС-гидридной эпитаксии на системе AIX 200RF, отделу твердотельной электроники и оптоэлектроники НИФТИ ННГУ за создание светоизлучающих p-i-n диодов, а именно с.н.с., к.ф.-м.н. А. В. Здоровейщеву за напыление металлического контакта, м.н.с., к.ф.-м.н. М. В. Ведю за вжигание металлического контакта, инженеру 2 категории О. В. Мухиной за проведение фотолитографии, ведущему инженеру Н. А. Горбуновой за травление и м.н.с. В. Е Котоминой за снятие фоторезиста.

Выражаю благодарность за измерения методом атомно-силовой микроскопии с.н.с. НОЦ ННГУ, к.ф.-м.н. Р. Н Крюкову, методом спектроскопии фотолюминесценции м.н.с. НИФТИ ННГУ А. В. Рыкову, методом спектроскопии электролюминесценции, а также за получение вольтамперных характеристик м.н.с. НИФТИ ННГУ, к.ф.-м.н. М. В. Ведю, за измерения эффекта Холла лаборанту НИФТИ ННГУ Д. А. Здоровейщеву и методом вторично-ионной масс-спектрометрии с.н.с. ИФМ РАН, к.ф.-м.н. М. Н. Дроздову.

Выражаю благодарность руководству компании ООО МеЛСиТек за предоставление возможности проведение как ростовых экспериментов методом МОС-гидридной эпитаксии, так и измерений различными методами. Выражаю отдельную признательность начальнику участка роста полупроводниковых структур компании ООО МеЛСиТек Э. А. Коблову за обучение методу МОС-гидридной эпитаксии и методам измерения гетероструктур III-V, н.с. ИФМ РАН, к.ф.-м.н. П. А. Юнину за консультирование по вопросам, связанным с методом рентгеновской дифрактометрии и инженеру НИФТИ ННГУ, к.ф.-м.н. А. А. Боброву, инженеру НИФТИ ННГУ, к.ф.-м.н. Н. В. Малехоновой, аспиранту ННГУ Ю. В. Усову за обучение препарированию поперечного среза образцов для исследования методом ПЭМ и работе на просвечивающем электронном микроскопе.

Выражаю благодарность за участие в обсуждении результатов научному руководителю, зав. каф. ФПЭН ННГУ, д.ф.-м.н., профессору Д. А. Павлову, а также А. В. Рыкову, Н. В. Байдусю, Д. В. Юрасову, С. А. Денисову, Э. А. Коблову, П. А. Юнину, М. В. Ведю.

Список публикаций по теме диссертации

Статьи в журналах из списка WOS/Scopus, рекомендованных ВАК РФ

A1. Sushkov, A. A. Comparison of III–V Heterostructures Grown on Ge/Si, Ge/SOI, and GaAs / A. A. Sushkov, D. A. Pavlov, A. I. Andrianov, V. G. Shengurov, S. A. Denisov, V. Yu. Chalkov, R. N. Kriukov, N. V. Baidus, D. V. Yurasov, A. V. Rykov // Semiconductors. — 2022. — V. 56. — N. 2. — P. 122.

A2. Sushkov, A. A. Growth of a Ge Layer on a Si/SiO_2/Si(100) Structure by the Hot Wire Chemical Vapor Deposition / A. A. Sushkov, D. A. Pavlov, S. A. Denisov, V. Yu. Chalkov, R. N. Kryukov, E. A. Pitirimova // Semiconductors. — 2020. — V. 54. — N. 10. — P. 1332.

A3. Sushkov, A. A. Studies of the Cross Section and Photoluminescence of a GaAs Layer Grown on a Si/Al_2O_3 Substrate / A. A. Sushkov, D. A. Pavlov, V. G. Shengurov, S. A. Denisov, V. Yu. Chalkov, N. V. Baidus, A. V. Rykov, R. N. Kryukov // Semiconductors. — 2019. — V. 53. — N. 9. — P. 1242.

A4. Baidus, N. V. MOCVD Growth of InGaAs/GaAs/AlGaAs Laser Structures with Quantum Wells on Ge/Si Substrates / N. V. Baidus, V. Ya Aleshkin, A. A. Dubinov, K. E. Kudryavtsev, S. M. Nekorkin, A. V. Novikov, D. A. Pavlov, A. V. Rykov, A. A. Sushkov, M. Shaleev, P. A. Yunin, D. A. Yurasov, Z. F. Krasilnik // Crystals. — 2018. — V. 8. — N. 8. — P. 311.

A5. Kryzhanovskaya, N.V. Electrically pumped InGaAs/GaAs quantum well microdisk lasers directly grown on Si(100) with Ge/GaAs buffer / N. V. Kryzhanovskaya, E. I Moiseev, Yu. S. Polubavkina, M. V. Maximov, M. M. Kulagina, S. I. Troshkov, Yu. M. Zadiranov, A. A. Lipovskii, N. V. Baidusy, A. A. Dubinov, Z. F. Krasilynik, A. V. Novikov, D. A. Pavlov, A. V. Rykov, A. A. Sushkov, D. V. Yurasov, A. E. Zhukov // Opt. Express. — 2017. — V. 25. — N. 14. — P. 16754.

A6. Baidus, N. V. Peculiarities of growing InGaAs/GaAs/AlGaAs laser structures by MOCVD on Ge/Si substrates / N. V. Baidus, V. Ya. Aleshkin, A. A. Dubinov, K. E. Kudryavtsev, S. M. Nekorkin, A. V. Novikov, D. A. Pavlov, A. V. Rykov, A. A. Sushkov, M. V. Shaleev, P. A. Yunin, D. V. Yurasov, A. N. Yablonskiy, Z. F. Krasilnik // Semiconductors. — 2017. — V. 51. — N. 11. — P. 1527.

A7. Aleshkin, V. Ya. Monolithically integrated InGaAs/GaAs/AlGaAs quantum well laser grown by MOCVD on exact Ge/Si(001) substrate / V. Ya. Aleshkin, N. V. Baidus, A. A. Dubinov, A. G. Fefelov, Z. F. Krasilnik, K. E. Kudryavtsev, S. M. Nekorkin, A. V. Novikov, D. A. Pavlov, I. V. Samartsev, E. V. Skorokhodov, M. V. Shaleev, A. A. Sushkov, A. N. Yablonskiy, P. A. Yunin, D. V. Yurasov // Appl. Phys. Lett. — 2016. — V. 109. — N. 6. — P. 061111.

Тезисы докладов конференций

А8. Сушков, А. А. Разработка технологии интеграции полупроводников III-V с подложками кремний-на-изоляторе / А. А. Сушков, Д. А. Павлов, В. Г. Шенгуров, С. А. Денисов, В. Ю. Чалков, Н. В. Байдусь, Д. В. Юрасов, А. В. Рыков // Сборник трудов XXIX Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых по фундаментальным наукам «Ломоносов—2022». Секция «Физика». Подсекция «Твердотельная наноэлектроника». 13 апреля 2022, Москва. — С. 392.

А9. Сушков, А. А. Метод эпитаксии Ge для интеграции соединений III-V с подложками кремний на изоляторе / А. А. Сушков, А. И. Андрианов // Сборник материалов XVIII Российской научной студенческой конференции «Физика твердого тела». 28–31 марта 2022, Томск. — С. 78.

А10. Сушков, А. А. Диагностика A3B5 гетероструктур на Ge/Si, Ge/SOI / А. А. Сушков, Д. А. Павлов, А. И. Андрианов, В. Г. Шенгуров, С. А. Денисов, В. Ю. Чалков, Р. Н. Крюков, Н. В. Байдусь, А. В. Рыков, Д. В. Юрасов, А. В. Новиков // Сборник трудов XXV Международного симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника». 9–12 марта 2021, Нижний Новгород. — Т. 2. — С. 864.

А11. Сушков, А. А. Эпитаксия Ge/Si слоев на $Si/SiO_2/Si$ (100) / А. А. Сушков, Д. А. Павлов, С. А. Денисов, В. Ю. Чалков // Сборник трудов Шестого междисциплинарного научного форума с международным участием «Новые материалы и перспективные технологии». 23–27 ноября 2020, Москва. — Т. 1. — С. 771.

А12. Сушков, А. А. Структурные свойства слоя Ge, выращенного на гетероструктуре Si/SiO2/Si(100) методом «горячей проволоки» / А. А. Сушков, Д. А. Павлов, В. Г. Шенгруов, С. А. Денисов, В. Ю. Чалков // Сборник трудов XXIV Международного симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника». 10–13 марта 2020, Нижний Новгород. — Т. 2. — С. 749.

А13. Сушков, А. А. Формирование и структурные исследования Ge/Si слоев на Si/SiO2/Si (100) / А. А. Сушков, Д. А. Павлов, В. Г. Шенгуров, С. А. Денисов, В. Ю. Чалков, М. Н. Минеев, А. Г. Гагарин // Материалы 18-ой Междунар. науч. конф.-школе нано-, микро-, оптоэлектроники и волоконной оптики: физические свойства и применение. 15–18 сентября 2020, Саранск. — С. 59.

А14. Павлов, Д. А. Методика формирования однородных по толщине структур SixGe1-x на больших подложках / Д. А. Павлов, Н. О. Кривулин, Е. С. Кочугова, А. А. Сушков // Сборник трудов XXIV Международного симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника». 10–13 марта 2020, Нижний Новгород. — Т. 2. — С. 693.

А15. Сушков, А. А. Исследование поперечного среза буферных слоев, используемых для создания светоизлучающих структур на основе полупроводников A3B5 на радиационно-стойких подложках / А. А. Сушков, Д. А. Павлов, В. Г. Шенгуров, С. А. Денисов, В. Ю. Чалков,

Н. В. Байдусь, А. В. Рыков, Р. Н. Крюков // Тезисы докладов Конференции с международным участием «Электронно-лучевые технологии». 30 сентября – 3 октября 2019, Черноголовка. — С. 52.

A16. Sushkov, A. A. Structural and optical research of a GaAs layer grown on a Si/Al_2O_3 substrate / A. A. Sushkov, D. A. Pavlov, V. G. Shengurov, S. A. Denisov, V. Yu. Chalkov, N. V. Baidus, A. V. Rykov, R. N. Kryukov // Book of abstracts. International conference mechanisms and non-linear problems of nucleation and growth of crystals and thin films. 1–5 июля 2019, Saint Petersburg. — P. 164.

A17. Сушков, А. А. Применение буферных слоев для роста монокристаллического слоя арсенида галлия на радиационно-стойких подложках / А. А. Сушков, Д. А. Павлов, В. Г. Шенгуров, С. А. Денисов, В. Ю. Чалков, Н. В. Байдусь, А. В. Рыков, Р. Н. Крюков // Сборник трудов Пятого междисциплинарного научного форума с международным участием «Новые материалы и перспективные технологии». 30 октября – 1 ноября 2019, Москва. — Т. 1. — С. 243.

A18. Сушков, А. А. Структурные и оптические свойства слоя GaAs, выращенного на подложке Si/Al_2O_3 / А. А. Сушков, Д. А. Павлов, В. Г. Шенгуров, С. А. Денисов, В. Ю. Чалков, Н. В. Байдусь, А. В. Рыков // Сборник трудов XXIII Международного симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника». 11–14 марта 2019, Нижний Новгород. — Т. 2. — С. 835.

A19. Шенгуров, А. А. Эпитаксиальные подложки GaAs/Ge/Si / В. Г. Шенгуров, Ю. Н. Бузынин, А. Н. Бузынин, Н. В. Байдусь, С. А. Денисов, С. А. Чалков, А. А. Сушков, Д. А. Павлов, М. Н. Дроздов, А. В. Нежданов, П. А. Юнин, В. Н. Трушин // Сборник трудов XXI Международного симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника». 13–16 марта 2017, Нижний Новгород. — Т. 2. — С. 770.

A20. Алешкин, В. Я. Эпитаксиальные подложки GaAs/Ge/Si / В. Я. Алешкин, Н. В. Байдусь, А. А. Дубинов, А. Г. Фефелов, З. Ф. Красильник, К. Е. Кудрявцев, С. М. Некоркин, А. В. Новиков, Д. А. Павлов, И. В. Самарцев, Е. В. Скороходов, М. В. Шалеев, А. А. Сушков, А. Н. Яблонский, П. А. Юнин, Д. В. Юрасов // Сборник трудов XXI Международного симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника». 13–16 марта 2017, Нижний Новгород. — Т. 2. — С. 491.

A21. Байдусь, Н. В. Особенности выращивания лазерных структур InGaAs/GaAs/AlGaAs на подложках Ge/Si методом МОС-гидридной эпитаксии / Н. В. Байдусь, В. Я. Алешкин, А. А. Дубинов, З. Ф. Красильник, С. М. Некоркин, А. В. Новиков, Д. А. Павлов, А. В. Рыков, А. А. Сушков, М. В. Шалеев, П. А. Юнин, Д. В. Юрасов, А. Н. Яблонский // Сборник трудов XXI Международного симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника». 13–16 марта 2017, Нижний Новгород. — Т. 2. — С. 523.

A22. Сушков, А. А. Формирование и исследование структурных свойств Ge/Si слоев на подложке $Si/SiO_2/Si$ (100) / А. А. Сушков, Д. А. Павлов, С. А. Денисов, В. Ю. Чалков // Сборник

трудов VII Всероссийской конференции по наноматериалам «НАНО 2020». 18–22 мая 2020, Москва. — С. 147.

А23. Сушков, А. А. Рост Ge/Si-слоев на структуре $Si/SiO_2/Si$ (100) / А. А. Сушков, Д. А. Павлов, С. А. Денисов, В. Ю. Чалков // Физика твердого тела: сборник материалов XVII Российской научной студенческой конференции. 18 мая 2020, Томск. — С. 162.

А24. Сушков, А. А. Исследование поперечного среза гетероструктур $Ge/Si/SiO_2/Si(100)$ / А. А. Сушков, Д. А. Павлов, В. Г. Шенгуров, С. А. Денисов, В. Ю. Чалков, М. Н. Минеев, А. Г. Гагарин // Сборник трудов XXVIII Российской конференции по электронной микроскопии «Современные методы электронной, зондовой микроскопии и комплементарных методов исследованиях наноструктур и наноматериалов». 7–10 сентября 2020, Черноголовка. — Т. 3. — С. 24.

А25. Сушков, А. А. Формирование слоя Ge на $Si/SiO_2/Si$ (100) методом «горячей проволоки» / А. А. Сушков, Д. А. Павлов, С. А. Денисов, В. Ю. Чалков // Материалы 23-ей Всероссийской молодежной научной конференции «Актуальные проблемы физической и функциональной электроники». 20–22 октября 2020, Ульяновск. — С. 218.

А26. Сушков, А. А. Исследование оптических и структурных свойств слоя GaAs, выращенного на буферных слоях и подложке Si/Al_2O_3 / А. А. Сушков, Д. А. Павлов, В. Г. Шенгуров, С. А. Денисов, В. Ю. Чалков, Н. В. Байдусь, А. В. Рыков, Р.Н. Крюков // Материалы XXIV Нижегородской сессии молодых ученых (технические, естественные, математические науки). 21–23 мая 2019, Нижний Новгород. — Т. 2. — С. 111.

А27. Сушков, А. А. Диагностика слоев полупроводников группы A^3B^5, выращенных на $Ge/Si/Al_2O_3$ / А. А. Сушков // Тезисы докладов 26-ой Всероссийской межвузовской научно-технической конференции студентов и аспирантов «Микроэлектроника и информатика — 2019». 18–19 апреля 2019, Зеленоград. — С. 36.

А28. Сушков, А. А. Светоизлучающие структуры на основе полупроводников группы A3B5 на радиационно-стойких подложках: исследование поперечного среза / А. А. Сушков, Д. А. Павлов, В. Г. Шенгуров, С. А. Денисов, В. Ю. Чалков, Н. В. Байдусь, А. В. Рыков, Р. Н. Крюков // Материалы 22-ой Всероссийской молодежной научной школы-семинара «Актуальные проблемы физической и функциональной электроники». 22–24 октября 2019, Ульяновск. — С. 150.

А29. Сушков, А. А. Исследования буферных слоев, применяемых для роста светоизлучающей структуры на основе полупроводников A_3B_5 на подложках КНИ / А. А. Сушков, Д. А. Павлов, В. Г. Шенгуров, С. А. Денисов, В. Ю. Чалков, Н. В. Байдусь, А. В. Рыков, Р.Н. Крюков // Сборник трудов XIV Всероссийской конференции молодых ученых

«Наноэлектроника, нанофотоника и нелинейная физика». 17–19 сентября 2019, Саратов. — С. 250.

А30. Сушков, А. А. Исследование поперечного среза гексагональных включений Ge в структуре Ge/Si(001) / А. А. Сушков, Д. А. Павлов, Н. О. Кривулин, Р. И. Муртазин, Е. С. Кочугова, К. Р. Мухаматчин // Сборник тезисов LIII Школы ПИЯФ по физике конденсированного состояния. 11–16 марта 2019, Санкт-Петербург. — С. 201.

А31. Сушков, А. А. Эффективное подавление ростовых дефектов и взаимной диффузии атомов Ge, As, Ga на гетерогранице GaAs/Ge / А. А. Сушков, Н. В. Байдусь, В. Я. Алешкин, А. В. Новиков, Д. В. Юрасов, В. Г. Шенгуров, С. А. Денисов, Д. А. Павлов // Тезисы докладов 24-й Всероссийской межвузовской научно-технической конференции студентов и аспирантов «Микроэлектроника и информатика — 2017». 19–20 апреля 2017, Зеленоград. — С. 49.

А32. Сушков, А. А. Исследование поперечного среза структуры GaAs/AlAs/GaAs/AlAs/ГКНС(Ge/Si/Al_2O_3) / А. А. Сушков, В. Г. Шенгуров, С. А. Денисов, Н. В. Байдусь, Д. А. Павлов // Сборник докладов VI Всероссийского фестиваля науки. 6 октября 2016, Нижний Новгород. — Т. 1. — С. 73.

А33. Сушков, А. А. Гетеронаноструктуры Ge/Si и GaAs/Ge: исследование поперечного среза / А. А. Сушков, В. Г. Шенгуров, С. А. Денисов, В. Ю. Чалков, Д. А. Павлов // Сборник материалов XV Российской научной студенческой конференции «Физика твердого тела». 18–20 мая 2016, Томск. — С. 223.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Han, Y. Recent advances in light sources on silicon / Y. Han, H. Park, J. Bowers, K. M. Lau // Adv. Opt. Photonics. — 2022. — V. 14. — N. 3. — P. 404–454.

2. Helkey, R. High-Performance Photonic Integrated Circuits on Silicon / R. Helkey, A. A. M. Saleh, J. Buckwalter, J. E. Bowers // IEEE J Sel Top Quantum Electron. — 2019. — V. 25. — N. 5. — P. 1–15.

3. Low energy electronic systems [Электронный ресурс]. — 2014. — Режим доступа: http://www.circuit-innovation.org/researchers/.

4. Miller, D. A. B. Device Requirements for Optical Interconnects to CMOS Silicon Chips / D. A. B. Miller // Proc IEEE Inst Electr Electron Eng. —2009. — V. 97. — N. 7. — P. 1166–1185.

5. Zhang, H. Energy efficiency in communications / H. Zhang, A. Gladisch, M. Pickavet, Z. Tao, W. Mohr // IEEE Commun Mag. — 2010. — V. 48. — N. 11. — P. 48–49.

6. Rickman, A. The commercialization of silicon photonics / A. Rickman // Nature Photon. — 2014. — V. 8. — P. 579–582.

7. Komljenovic, T. Photonic Integrated Circuits Using Heterogeneous Integration on Silicon / T. Komljenovic, D. Huang, P. Pintus, M. A. Tran, M. L. Davenport, J. E. Bowers // Proc IEEE Inst Electr Electron Eng. — 2018. — V. 106. — N. 12. — P. 2246–2257.

8. Cao, V. Recent Progress of Quantum Dot Lasers Monolithically Integrated on Si Platform / V. Cao, J.-S. Park, M. Tang, T. Zhou, A. Seeds, S. Chen, H. Liu // Front. Phys. — 2022. — V. 10. — P. 1–16.

9. Sun, C. Single-chip microprocessor that communicates directly using light / C. Sun, M. T. Wade, Y. Lee, J. S. Orcutt, L. Alloatti, M. S. Georgas, A. S Waterman, J. M. Shainline, R. R. Avizienis, S. Lin, B. R. Moss, R. Kumar, F. Pavanello, A. H. Atabaki, H. M. Cook, A. J. Ou, J. C. Leu, Y.-H. Chen, K. Asanović, R. J. Ram, M. A. Popović, V. M. Stojanović // Nature. — 2015. — V. 528. — P. 534–538.

10. Komljenovic, T. Heterogeneous Silicon Photonic Integrated Circuits / T. Komljenovic, M. Davenport, J. Hulme, A. Y. Liu, C. T. Santis, A. Spott, S. Srinivasan, E. J. Stanton, C. Zhang, J. E. Bowers // J. Light. Technol. — 2016. — V. 34. — N. 1. — P. 20–35.

11. Creazzo, T. Integrated tunable CMOS laser / T. Creazzo, E. Marchena, S. B. Krasulick, P. K. L. Yu, D. V. Orden, J. Y. Spann, C. C. Blivin, L. He, H. Cai, J. M. Dallesasse, R. J. Stone, A. Mizrahil // Opt. Express. — 2013. — V. 21. — N. 23. — P. 28048–28053.

12. Han, J. H. Functionalized Bonding Materials and Interfaces for Heterogeneously Layer-Stacked Applications / J.-H. Han, W. J. Choi, J. D. Song, S. Kim, H.-J. Kim // J Korean Phys Soc. — 2019. — V. 74. — N. 2. — P. 82–87.

13. Shang, C. Electrically pumped quantum-dot lasers grown on 300 mm patterned Si photonic wafers / C. Shang, K. Feng, E. T. Hughes, A. Clark, M. Debnath, R. Koscica, G. Leake, J. Herman, D. Harame, P. Ludewig, Y. Wan, J. E. Bowers // Light Sci Appl. — 2022. — V. 11. — N. 299. — P. 1–8.

14. Shu, H. Microcomb-driven silicon photonic systems / H. Shu, L. Chang, Y. Tao, B. Shen, W. Xie, M. Jin, A. Netherton, Z. Tao, X. Zhang, R. Chen, B. Bai, J. Qin, S. Yu, X. Wang, J. E. Bowers // Nature. — 2022. — V. 605. — P. 457–463.

15. Liu, A. Y. Photonic Integration With Epitaxial III–V on Silicon / A. Y. Liu, J. Bowers // IEEE J Sel Top Quantum Electron. — 2018. — V. 24. — N. 6. — P. 6000412.

16. Shang, C. High-temperature reliable quantum-dot lasers on Si with misfit and threading dislocation filters / C. Shang, E. Hughes, Y. Wan, M. Dumont, R. Koscica, J. Selvidge, R. Herrick, A. C. Gossard, K. Mukherjee, J. E. Bowers // Optica. — 2021. — V. 8. — N. 5. — P. 749–754.

17. Park, J.-S. Heteroepitaxial Growth of III-V Semiconductors on Silicon / J.-S. Park, M. Tang, S. Chen, H. Liu // Crystals. — 2020. — V.10 — N. 12. — P. 1163.

18. Németh, I. Heteroepitaxy of GaP on Si: Correlation of morphology, anti-phase-domain structure and MOVPE growth conditions / I. Németh, B. Kunert, W. Stolz, K. Volz // J. Cryst. Growth. — 2008. — V. 310. — P. 1595–1601.

19. Shang, C. A Pathway to Thin GaAs Virtual Substrate on On-Axis Si (001) with Ultralow Threading Dislocation Density / C. Shang, J. Selvidge, E. Hughes, J. C. Norman, A. A. Taylor, A. C. Gossard, K. Mukherjee, J. E. Bowers // Phys. Status Solidi A. — 2020. — V. 218. — N. 3. — P. 2000402.

20. Martin, M. Toward the III–V/Si co-integration by controlling the biatomic steps on hydrogenated Si(001) / M. Martin, D. Caliste, R. Cipro, R. Alcotte, J. Moeyaert, S. David, F. Bassani, T. Cerba, Y. Bogumilowicz, E. Sanchez, Z. Ye, X. Y. Bao, J. B. Pin, T. Baron, P. Pochet // Appl. Phys. Lett. — 2016. — V. 109. — N. 25. — P. 253103.

21. Alcotte, R. Epitaxial growth of antiphase boundary free GaAs layer on 300 mm Si(001) substrate by metalorganic chemical vapour deposition with high mobility / R. Alcotte, M. Martin, J. Moeyaert, R. Cipro, S. David, F. Bassani, F. Ducroquet, Y. Bogumilowicz, E. Sanchez, Z. Ye, X.Y. Bao, J.B. Pin, T. Baron // APL Mater. — 2016. — V. 4. — N. 4. — P. 046101.

22. Tang, M. Optimizations of Defect Filter Layers for 1.3-μm InAs/GaAs Quantum-Dot Lasers Monolithically Grown on Si substrates / M. Tang, S. Chen, J. Wu, Q. Jiang, K. Kennedy,

P. Jurczak, M. Liao, R. Beanland, A. Seeds, H. Liu // IEEE J Sel Top Quantum Electron. — 2016. — V. 22. — N. 6. — P. 50–56.

23. Wei, W.-Q. Monolithic integration of embedded III-V lasers on SOI / W.-Q. Wei, A. He, B. Yang, Z.-H. Wang, J.-Z. Huang, D. Han, M. Ming, X. Guo, Y. Su, J.-J. Zhang, T. Wang // Light Sci. Appl. — 2023. — V. 12. — N.84. — P. 1–11.

24. Wan, Y. 1.3 μm submilliamp threshold quantum dot micro-lasers on Si / Y. Wan, J. Norman, Q. Li, M. J. Kennedy, D. Liang, C. Zhang, D. Huang, Z. Zhang, A. Y. Liu, A. Torres, D. Jung, A. C. Gossard, E. L. Hu, K. M. Lau, J. E. Bowers // Optica. — 2017. — V. 4. — N. 8. — P. 940–944.

25. Selvidge, J. Defect filtering for thermal expansion induced dislocations in III–V lasers on silicon / J. Selvidge, J. Norman, E. T. Hughes, C. Shang, D. Jung, A. A. Taylor, M. J. Kennedy, R. Herrick, J. E. Bowers, K. Mukherjee // Appl. Phys. Lett. — 2020. — V. 117. — P. 122101.

26. Selvidge, J. Reduced dislocation growth leads to long lifetime InAs quantum dot lasers on silicon at high temperatures / J. Selvidge, E. T. Hughes, J. C. Norman, C. Shang, M. J. Kennedy, M. Dumont, A. M. Netherton, Z. Zhang, R. W. Herrick, J. E. Bowers, K. Mukherjee // Appl. Phys. Lett. — 2021. — V. 118. —P. 192101.

27. Chand, N. Diffusion of As and Ge during growth of GaAs on Ge substrate by molecular beam epitaxy: Its effect on the device electrical characteristics / N. Chand, J. Klem, T. Henderson, H. Morkoc // J. Appl. Phys. —1986. — V. 59. — P. 3601–3604.

28. Zhang, B. 1310 nm InAs quantum-dot microdisk lasers on SOI by hybrid epitaxy / B. Zhang, W.-Q. Wei, J.-H. Wang, J.-Y. Zhang, H. Cong, Q. Feng, T. Wang, J.-J. Zhang // Opt. Express. — 2019. — V. 27. — N. 14. — P. 19348–19358.

29. Han, Y. Bufferless 1.5 μm III-V lasers grown on Si-photonics 220 nm silicon-on-insulator platforms / Y. Han, Z. Yan, W. K. Ng, Y. Xue, K. S. Wong, K. M. Lau // Optica. — 2020. — V. 7 — N. 2. — P. 148–153.

30. Wei, W.-Q. Phosphorus-free 1.5 μm InAs quantum-dot microdisk lasers on metamorphic InGaAs/SOI platform / W.-Q. Wei, J.-Y. Zhang, J.-H. Wang, H. Cong, J.-J. Guo, Z.-H. Wang, H.-X. Xu, T. Wang, J.-J. Zhang // Opt. Lett. — 2020. —V. 45. — N. 7. — P. 2042–2045.

31. Wei, W.-Q. InAs/GaAs quantum dot narrow ridge lasers epitaxially grown on SOI substrates for silicon photonic integration / W.-Q. Wei, Q. Feng, J.-J. Guo, M.-C. Guo, J.-H. Wang, Z.-H. Wang, T. Wang, J.-J. Zhang // Opt. Express. — 2020. — V. 28. — N. 18. — P. 26555–26563.

32. Huang, J.-Z. P-doped 1300 nm InAs/GaAs quantum dot lasers directly grown on an SOI substrate / J.-Z. Huang, W.-Q. Wei, J.-J. Chen, Z.-H. Wang, T. Wang, J.-J. Zhang // Opt. Lett. — 2021. — V. 46. — N. 21. — P. 5525–5528.

33. Volkov, P. V. Features of SOI substrates heating in MBE growth process obtained by low-coherence tandem interferometry / P. V. Volkov, A.V. Goryunov, D.N. Lobanov, A. Yu. Lukyanov, A.V. Novikov, A.D. Tertyshnik, M.V. Shaleev, D.V. Yurasov // J. Cryst. Growth. — 2016. — V. 448. — P. 89–92.

34. Celler, G. K. Frontiers of silicon-on-insulator / G. K. Celler, S. Cristoloveanu // J. Appl. Phys. — 2003. — V. 93. — N. 9. — P. 4955–4978.

35. Асеев, А. Л. Перспективы применения структур кремний-на-изоляторе в микро-, наноэлектронике и микросистемной технике / А. Л. Асеев, В .П. Попов, В. П. Володин, В. Н. Марютин // Микросистемная техника. — 2002. — № 9. — С. 23–29.

36. Юдинцев, В. Радиационно стойкие интегральные схемы. Надежность в космосе и на земле / В. Юдинцев // Электроника: наука, технология, бизнес. — 2007. —№ 3. — С. 72–77.

37. Vlasov, A. Y. Losses in single-mode silicon-on-insulator strip waveguides and bends / A. Y. Vlasov, J. S. McNab // Optics Express. — 2004. — V. 12. — N. 8. — P. 1622–1631.

38. Donghwan, A. Efficient evanescent wave coupling conditions for waveguide-integrated thin-film Si/Ge photodetectors on silicon-on-insulator/germanium-on-insulator substrates / A. Donghwan, K. Lionel, M. Jurgen // J. Appl. Phys. — 2011. — V. 110. — P. 083115.

39. Volz, K. GaP-nucleation on exact Si (0 0 1) substrates for III/V device integration / K. Volz, A. Beyer, W. Witte, J. Ohlmann, I. Nemeth, B. Kunert, W. Stolz // Journal of Crystal Growth. — 2011. — V. 315. — N. 1. — P. 37–47.

40. Lucci, I. Universal description of III-V/Si epitaxial growth processes / I. Lucci, S. Charbonnier, L. Pedesseau, M. Vallet, L. Cerutti, J.-B. Rodriguez, E. Tournié, R. Bernard, A. Létoublon, N. Bertru, A. Le Corre, S. Rennesson, F. Semond, G. Patriarche, L. Largeau, P. Turban, A. Ponchet, C. Cornet // Physical review materials. — 2018. — V. 2. — N. 6. — P. 060401(R).

41. Bolkhovityanov, Yu. B. GaAs epitaxy on Si substrates: modern status of research and engineering / Yu. B. Bolkhovityanov, O. P. Pchelyakov // Physics-Uspekhi. — 2008. — V. 51. — N. 5. — P. 437–456.

42. Faucher, J. Initiation strategies for simultaneous control of antiphase domains and stacking faults in GaAs solar cells on Ge / J. Faucher, T. Masuda, M.L. Lee // Journal of Vacuum Science & Technology B. — 2016. — V. 34. —N. 4 — P. 041203.

43. Cornet, C. Zinc-blende group III-V/group IV epitaxy: Importance of the miscut / C. Cornet, S. Charbonnier, I. Lucci, L. Chen, A. Létoublon, A. Alvarez, K. Tavernier, T. Rohel, R. Bernard, J. B. Rodriguez, L. Cerutti, E. Tournié, Y. Léger, M. Bahri, G. Patriarche, L. Largeau, A. Ponchet, P. Turban, N. Bertru // Physical review materials. — 2020. — V. 4. — P. 053401.

44. Ponchet, A. Interface energy analysis of III–V islands on Si (001) in the Volmer-Weber growth mode / A. Ponchet, G. Patriarche, J. B. Rodriguez, L. Cerutti, E. Tournié // Appl. Phys. Lett. — 2018. — V. 113. — P. 191601.

45. Ernst, F. Formation of planar defects in the epitaxial growth of GaP on Si substrate by metal organic chemicalvapor deposition / F. Ernst, P. Pirouz // J. Appl. Phys. — 1988. — V. 64. — P. 4526–4530.

46. Petroff, P. M. Nucleation and growth of GaAs on Ge and the structure of antiphase boundaries / P. M. Petroff // Journal of Vacuum Science & Technology. — 1986. — V. 4. — N. 4 — P. 874–877.

47. Zhang, S. B. Structure and formation energy of steps on the GaAs(001)-2×4 surface / S. B. Zhang, A. Zunger // Materials Science and Engineering. — 1995. — V. B30. — P. 127–136.

48. Shitara, T. As/Ga ratio dependence of Ga adatom incorporation kinetics at steps on vicinal GaAs(001) surfaces / T. Shitara, J. Zhang, J. H. Neave, B. A. Joyce // Journal of Crystal Growth. — 1993. — V. 127. — P. 494–498.

49. Shitara, T. Ga adatom incorporation kinetics at steps on vicinal GaAs (001) surfaces during growth of GaAs by molecular beam epitaxy / T. Shitara, J. Zhang, J. H. Neave, B. A. Joyce // Journal of Applied Physics — 1992. — V. 71. — P. 4299–4304.

50. Ohta, K. Anisotropic surface migration of Ga atoms on GaAs (001) / K. Ohta, T. Kojima, T. Nakagawa // Journal of Crystal Growth. — 1989. — V. 95. — P. 71–74.

51. Horikoshi, Y. Migration-enhanced epitaxy of GaAs and AlGaAs / Y. Horikoshi, M. Kawashima, H. Yamaguchi // Jpn. J. Appl. Phys. — 1988. — V. 27. — N. 2. — P. 169–179.

52. Joyce, B. A Elementary processes in the MBE growth of GaAs / B. A. Joyce, T. Shitara, A. Yoshinay, D. D. Vvedcnsky, J. H. Neavc, J. Zhang // Applied Surface Science. — 1992. — V. 60–61. — P. 200–209.

53. Piedra-Lorenzana, J. A Estimation of Ga adatom diffusion length for GaP growth by molecular beam epitaxy / J. A. Piedra-Lorenzana, K. Yamane, K. Shiota, J. Fujimoto, Sh. Tanaka, H. Sekiguchi, H. Okada, A. Wakahara // Journal of Crystal Growth. — 2019. — V. 512. — P. 37–40.

54. Georgakilas, A. Generation and annihilation of antiphase domain boundaries in GaAs on Si grown by molecular beam epitaxy / A. Georgakilas, J. Stoemenos, K. Tsagaraki, P. Panayotatos, A. Christou, Ph. Komninou, N. Flevaris // J. Mater. Res. — 1993. — V. 8. — N. 8. —P. 1908–1921.

55. Rasmussen, D. R. Rigid-Body Translation and Bonding across {110} Antiphase Boundaries in GaAs / D. R. Rasmussen, S. McKernan, C. B. Carter // Phys. Rev. Lett. — 1991. — V. 66. — N. 20. — P. 2629–2633.

56. Bolkhovityanov, Yu. B. Silicon-germanium epilayers: physical fundamentals of growing strained and fully relaxed heterostructures / Yu. B. Bolkhovityanov, O. P. Pchelyakov, S. I. Chikichev // Physics-Uspekhi. — 2001. — V. 44. — N. 7. — P. 655–680.

57. Fitzgerald, E. A. Dislocations in strained-layer epitaxy: theory, experiment, and applications / E. A. Fitzgerald // Materials Science Reports. — 1991. — V. 7. — P. 87–142.

58. Vdovin, V. I. Misfit Dislocations in Epitaxial Heterostructures: Mechanisms of Generation and Multiplication / V. I. Vdovin // Phys. stat. sol. (a). — 1999. — V. 171. — P. 239–250.

59. Perovac, D. D. Heterogeneous nucleation sources in molecular beam epitaxy-grown Ge_xSi_{1-x} strained layer superlattices / D. D. Perovac, G. C. Weatherly, J. M. Baribeau, D. C. Houghton // Thin Solid Films. — 1989. — V. 183. — P. 141–156.

60. Hirth, J. P. Theory of Dislocations / J. P. Hirth, J. Lothe. — 2nd ed. — New York : Wiley, 1982.

61. Kvam, E. P. Variation of dislocation morphology with strain in Ge_xSi_{1-x} epilayers on (100)Si / E. P. Kvam, D. M. Maher, C. J. Humphreys // J. Mater. Res. — 1990. — V. 5. — N. 9. — P. 1900–1907.

62. Bolkhovityanova, Yu. B. Forming Dislocation Pairs in the Ge/GeSi/Si(001) Heterostructure / Yu. B. Bolkhovityanova, A. K. Gutakovskiia, A. S. Deryabina, L. V. Sokolov // Physics of the Solid State. — 2019. — V. 61. — N. 2. — P. 145–148.

63. Hornstra, J. Dislocations in the diamond lattice / J. Hornstra // J. Phys. Chem. Solids. — 1958. — V. 5. — P. 129–141.

64. Oktyabrsky, S. Misfit dislocations in low-temperature grown Ge/Si heterostructures / S. Oktyabrsky, H. Wu, R. D. Vispute, J. Narayan // Philosophical Magazine A. — 1995. — V. 71. — N. 3. — P. 537–551.

65. Marzegalli, A. Unexpected Dominance of Vertical Dislocations in High-Misfit Ge/Si(001) Films and Their Elimination by Deep Substrate Patterning / A. Marzegalli, F. Isa, H. Groiss, E. Müller, C. V. Falub, A. G. Taboada, P. Niedermann, G. Isella, F. Schäffler, F. Montalenti, Hans von Känel, L. Miglio // Advanced Materials. — 2013. — V. 25. — P. 4408–4412.

66. Harada, S. Vertical dislocations in Ge films selectively grown in submicron Si windows of patterned substrates / S. Harada, J. Kikkawa, Y. Nakamura, G. Wang, M. Caymax, A. Sakai // Thin Solid Films. — 2012.— V. 520. — N. 8. — P. 3245–3248.

67. Selvidge, J. Supplementary Material — Defect filtering for thermal expansion induced dislocations in III–V lasers on silicon [Электронный ресурс] / J. Selvidge, J. Norman, E. T. Hughes, C. Shang, D. Jung, A. A. Taylor, M. J. Kennedy, R. Herrick, J. E. Bowers, K. Mukherjee // Appl. Phys. Lett. — 2020. — V. 117. — P. 122101. — Режим доступа:

https://pubs.aip.org/aip/apl/article/117/12/122101/311752/Defect-filtering-for-thermal-expansion-induced.

68. Yonenaga, I. Mechanical property and dislocation dynamics of GaAsP alloy semiconductor / I. Yonenaga, K. Sumino, G. Izawa, H. Watanabe, J. Matsui // J. Mater. Res. — 1989. — V. 4. — N. 2. — P. 361–365.

69. Yonenaga, I. Mechanical strength of GeSi alloy / I. Yonenaga, K. Sumino // J. Appl. Phys. — 1996. — V. 80. — N. 6. — P. 3244–3247.

70. Matthews, J. W. Defects in epitaxial multilayers. Misfit dislocations / J. W. Matthews, A. E. Blakeslee // Journal of Crystal Growth. — 1974. — V. 27. — P. 118–125.

71. Matragrano, M. J. Anisotropic strain relaxation of GaInP epitaxial layers in compression and tension / M. J. Matragrano, D. G. Ast, J. R. Shealy, V. Krishnamoorthy // J. Appl. Phys. — 1996. — V. 79. — P. 8371–8378.

72. Suzuki, H. Real-time observation of anisotropic strain relaxation by three-dimensional reciprocal space mapping during InGaAs/GaAs (001) growth / H. Suzuki, T. Sasaki, A. Sai, Y. Ohshita, I. Kamiya, M. Yamaguchi, M. Takahasi, and S. Fujikawa // Applied Physics Letters. — 2010. — V. 97. — P. 041906.

73. Olsen, J. A. X-ray reciprocal-space mapping of strain relaxation and tilting in linearly graded InAlAs buffers / J. A. Olsen, E. L. Hu, S. R. Lee, I. J. Fritz, A. J. Howard, B. E. Hammons, J. Y. Tsao // Journal of Applied Physics. — 1996. — V. 79. — P. 3578–3584.

74. Chauveau, J. M. Indium content measurements in metamorphic high electron mobility transistor structures by combination of x-ray reciprocal space mapping and transmission electron microscopy / J. M. Chauveau, Y. Androussi, A. Lefebvre, J. Di. Persio, Y. Cordier // Journal of Applied Physics. — 2003. — V. 93. — N. 7. — P. 4219–4225.

75. Dang, S. Threading dislocation density effect on the electrical and optical properties of InGaN light-emitting diodes / S. Dang, Ch. Li, M. Lu, H. Guo, Z. He // Optik. — 2018. — V. 155. — P. 26–30.

76. Lee, S. W. Origin of forward leakage current in GaN-based light-emitting devices / S. W. Lee, D. C. Oh, H. Goto, J. S. Ha, H. J. Lee, T. Hanada, M. W. Cho, T. Yao, S. K. Hong, H. Y. Lee, S. R. Cho, J. W. Choi, J. H. Choi, J. H. Jang, J. E. Shin, J. S. Lee // Applied Physics Letters. — 2006. — V. 89. — P. 132117.

77. Andre, C. L. Impact of dislocation densities on n+/p and p+/n junction GaAs diodes and solar cells on SiGe virtual substrates / C. L. Andre, D. M. Wilt, A. J. Pitera, M. L. Lee, E. A. Fitzgerald, S. A. Ringel // Applied Physics Letters. — 2005. — V. 98. — P. 014502.

78. Roedel, R. J. The Effect of Dislocations in $Ga_{1-x}Al_xAs$:Si Light-Emitting Diodes / R. J. Roedel, A. R. Van Neida, R. Caruso, L. R. Dawson // J. Electrochem. — 1979. — V. 126. — N. 4. — P. 637–641.

79. Liu, Z. Origin of defect tolerance in InAs/GaAs quantum dot lasers grown on silicon / Z. Liu, C. Hantschmann, M. Tang, Y. Lu, J. Park, M. Liao, S. Pan, A. Sanchez, R. Beanland, M. Martin, T. Baron, S. Chen, A. Seeds, R. Penty, I. White, H. Liu. // Journal of Lightwave Technology. — 2020. — V. 38. — N. 2. — P. 240–248.

80. Liu, A. Y. Quantum dot lasers for silicon photonics / A. Y. Liu, S. Srinivasan, J. Norman, A. C. Gossard, J. E. Bowers // Photonics Research. — 2015. — V. 3. — N. 5. — P. B1–B9.

81. Jung, D. Impact of threading dislocation density on the lifetime of InAs quantum dot lasers on Si / D. Jung, R. Herrick, J. Norman, K. Turnlund, C. Jan, K. Feng, A. C. Gossard, J. E. Bowers // Appl. Phys. Lett. — 2018. — V. 112. — N. 15 — P. 153507.

82. Murray, R. T. Crack formation in III-V epilayers grown under tensile strain on InP(001) substrates / R. T. Murray, C. J. Kiely, M. Hopkinson // Philosophical Magazine A. — 1996. — V.74. — N. 2. — P. 383–393.

83. Murray, R. T. General characteristics of crack arrays in epilayers grown under tensile strain / R. T. Murray, C. J. Kiely, M. Hopkinson // Semicond. Sci. Technol. — 2000. — V.74. — N. 2. — P. 325–330.

84. Oh, S. Control of Crack Formation for the Fabrication of Crack-Free and Self-Isolated High-Efficiency Gallium Arsenide Photovoltaic Cells on Silicon Substrate / S. Oh, D. H. Jun, K. W. Shin, I. H. Choi, S. H. Jung, J. H. Choi, W. Park, Y. Park, E. Yoon // IEEE Journal of Photovoltaics. — 2016. — V. 6. — N. 4. — P. 1031–1035.

85. Yet, T. Thin film cracking and the roles of substrate and interface / T. Yet, Z. Sijo, A. G. Evans // J. Solid Structures. — 1992. — V. 29. — N. 21. — P. 2639–2648.

86. Шалимова, К.В. Физика полупроводников / К.В. Шалимова. — Санкт-Петербург : Лань, 2010. — 392 с.

87. Ackaert, A. Crack formation and thermal stress relaxation of GaAs on Si growth by metalorganic vapor phase epitaxy / A. Ackaert, L. Buydens, D. Lootens, P. Van Daele, P. Demeester // Applied Physics Letters. — 1989. — V. 55. — P. 2187–2189.

88. Yang, V. K. Crack formation in GaAs heteroepitaxial films on Si and SiGe virtual substrates / V. K. Yang, M. Groenert, C. W. Leitz, A. J. Pitera, M. T. Currie, E. A. Fitzgerald // Journal of Applied Physics. — 2003. — V. 93. — N. 7. — P. 3859–3865.

89. Hayafuji, N. Crack propagation and mechanical fracture in GaAs-on-Si / N. Hayafuji, H. Kizuki, M. Miyashita, K. Kadoiwa, T. Nishimura, N. Ogasawara, H. Kumabe, T. Muratani, A. Tada // Japanese Journal of Applied Physics. — 1991. — V. 30. — N. 3. — P. 459–463.

90. Yonenaga, I. Behaviour of dislocations in GaAs revealed by etch pit technique and X-ray topography / I. Yonenaga, K. Sumino // Journal of Crystal Growth. — 1993. — V. 126. — P. 19–29.

91. Wang, B. Effectiveness of InGaAs/GaAs superlattice dislocation filter layers epitaxially grown on 200 mm Si wafers with and without Ge buffers / B. Wang, G. J. Syaranamual, K. H. Lee, S. Bao, Y. Wang, K. E. K. Lee, E. A. Fitzgerald, S. J. Pennycook, S. Gradecak, J. Michel // Semiconductor Science and Technology. — 2020. — V. 35. — N. 9. — P. 095036.

92. Li, K. Inversion Boundary Annihilation in GaAs Monolithically Grown on On-Axis Silicon (001) / K. Li, J. Yang, Y. Lu, M. Tang, P. Jurczak, Z. Liu, X. Yu, J.-S. Park, H. Deng, H. Jia, M. Dang, A. M. Sanchez, R. Beanland, W. Li, X. Han, J.-Ch. Zhang, H. Wang, F. Liu, S. Chen, A. Seeds, P. Smowton and H. Liu // Adv. Optical Mater. — 2020. — V. 8. — N. 22. — P. 2000970.

93. Lin, A. C. Antiphase domain annihilation during growth of GaP on Si by molecular beam epitaxy / A.C. Lin, M.M. Fejer, J.S. Harris // Journal of Crystal Growth. — 2013. — V. 363. — P. 258–263.

94. Barrett, C. S. C. Dissolution of antiphase domain boundaries in GaAs on Si(001) via post-growth annealing / C.S.C. Barrett, A. Atassi, E.L. Kennon, Z. Weinrich, K. Haynes, X.-Y. Bao, P. Martin, K.S. Jones // J Mater Sci. — 2019. — V. 54. — P. 7028–7034.

95. Kwoen, J. Elimination of anti-phase boundaries in a GaAs layer directly-grown on an on-axis Si(001) substrate by optimizing an AlGaAs nucleation layer / J. Kwoen, J. Lee, K. Watanabe, Y. Arakawa // Japanese J. of App. Phys. — 2019. — V. 58. — P. SBBE07.

96. Rykov, A. V. Effect of the AlGaAs Seed Layer Composition on Antiphase Domains Formation in (Al)GaAs Structures Grown by Vapor-Phase Epitaxy on Ge/Si(100) Substrates / A. V. Rykov, R. N. Kryukov, I. V. Samartsev, P. A. Yunin, V. G. Shengurov, A. V. Zaitsev, N. V. Baidus' // Technical Physics Letters. — 2021. — V. 47. — N. 5. — P. 413–416.

97. Bringans, R. D. Atomic-steprearrangement on Si(100) by interaction with arsenic and the implication for GaAs-on-Si epitaxy / R. D. Bringans, D. K. Biegelsen, and L. E. Swartz // Physical review B. — 1991. — V. 44. — N. 7. — P. 3054–3063.

98. Yamaguchi, M. Thermal annealing effects of defect reduction in GaAs on Si substrates / M. Yamaguchi, M. Tachikawa, Y. Itoh, M. Sugo, S. Kondo // Journal of Applied Physics. — 1990. — V. 68. — P. 4518–4522.

99. Hayafuji, N. Effect of Employing Positions of Thermal Cyclic Annealing and Strained-Layer Superlattice on Defect Reduction in GaAs-on-Si / N. Hayafuji, M. Miyashuta, T. Nishimura, K. Kadoiwa, H. Kumabe and T. Murotani // Jpn. J. Appl. Phys. — 1990. — V. 29. — N. 11. — P. 2371–2375.

100. Yang, J. All-MBE grown InAs/GaAs quantum dot lasers with thin Ge buffer layer on Si substrates / J. Yang, Z. Liu, P. Jurczak, M. Tang, K. Li, Sh. Pan, A. Sanchez, R. Beanland, J. Zhang, H.

Wang, F. Liu, Zh. Li, S. Shutts, P. Smowton, S. Chen, A. Seeds and H. Liu // J. Phys. D: Appl. Phys. — 2021. — V. 54. — P. 035103.

101. Jin-Phillipp, N. Y. Transmission electron microscopy study on defect reduction in GaAs on Si heteroepitaxial layers grown by metalorganic vapor phase epitaxy / N. Y. Jin-Phillipp, F. Phillipp, T. Marschner, W. Stolz, E. O. Gobel // Journal of Crystal Growth. — 1996. — V. 158. — P. 28–36.

102. Marschner, T. Improvements in the heteroepitaxial growth of GaAs on Si by MOVPE / T. Marschner, W. Stolz, E.O. Gobel, F. Phillipp, M. Miiller, J. Lorberth // Malertals Science and Engineering. — 1993. — V. B21. — P. 266–269.

103. Wang, B. Control wafer bow of InGaP on 200 mm Si by strain engineering / B. Wang, S. Bao, R. I. Made, K. H. Lee, C. Wang, K. E. Kian Lee, E. A. Fitzgerald, J. Michel // Semiconductor Science and Technology. — 2017. — V. 32. — N. 12. — P. 125013.

104. Wan, Y. 1.3 μm Quantum Dot-Distributed Feedback Lasers Directly Grown on (001) Si / Y. Wan, J. C. Norman, Y. Tong, M. J. Kennedy, W. He, J. Selvidge, C. Shang, M. Dumont, A. Malik, H. K. Tsang, A. C. Gossard, J. E. Bowers // Laser Photonics Rev. — 2020. — V. 14. — N. 7. — P. 2000037.

105. Wan, Y. Tunable quantum dot lasers grown directly on silicon / Y. Wan, S. Zhang, J. C. Norman, M. J. Kennedy, W. He, S. Liu, C. Xiang, C. Shang, J.-J. He, A. C. Gossard, J. E. Bowers // Optica. — 2019. — V. 6. — N. 11. — P. 1394–1400.

106. Liu, S. High-channel-count 20 GHz passively mode-locked quantum dot laser directly grown on Si with 4.1 Tbit/s transmission capacity / S. Liu, X. Wu, D. Jung, J. C. Norman, M. J. Kennedy, H. K. Tsang, A. C. Gossard, J. E. Bowers // Optica. — 2019. — V. 6. — N. 2. — P. 128–134.

107. Zhou. T. Ultra-low threshold InAs/GaAs quantum dot microdisk lasers on planar on-axis Si (001) substrates / T. Zhou, M. Tang, G. Xiang, X. Fang, X. Liu, B. Xiang, S. Hark, M. Martin, M.-L. Touraton, T. Baron, Y. Lu, S. Chen, H. Liu, Z. Zhang // Optica. — 2019. — V. 6. — N. 4. — P. 430–435.

108. Li, K. O-band InAs/GaAs quantum dot laser monolithically integrated on exact (001) Si substrate / K. Li, Z. Liu, M. Tang, M. Liao, D. Kim, H. Deng, A. M. Sanchez, R. Beanland, M. Martin, T. Baron, S. Chen, J. Wu, A. Seeds, H. Liu // J. Cryst. Growth. — 2019. — V. 511. — P. 56–60.

109. Chen, S. Electrically pumped continuous-wave 1.3 μm InAs/GaAs quantum dot lasers monolithically grown on on-axis Si (001) substrates / S. Chen, M. Liao, M. Tang, J. Wu, M. Martin, T. Baron, A. Seeds, H. Liu // Opt Express. — 2017. —V. 25. — N. 5. — P. 4632–4639.

110. Yang, J. Thin Ge buffer layer on Silicon for Integration of III-V on Silicon / J. Yang, P. Jurczak, F. Cui, K. Li, M. Tang, L. Billiald, R. Beanland, A. M. Sanchez, H. Liu // J. Cryst. Growth. — 2019. — V. 514. — P. 109–113.

111. Cheng, Z. Theoretical analysis of an on-chip integration of a III–V laser with a Ge photodetector using Si waveguides on patterned SOI substrates / Z. Cheng, J. Wang, Z. Yang, Y. Zhang, W. Wang, H. Yin, Y. Huang, X. Ren // Laser Physics Letters. — 2019. — V. 16. — N. 4. — P. 045003.

112. Li, X. 75 GHz germanium waveguide photodetector with 64 Gbps data rates utilizing an inductive-gain-peaking technique / X. Li, Y. Zhu, Z. Liu, L. Peng, X. Liu, C. Niu, J. Zheng, Y. Zuo, B. Cheng // J. Semicond. — 2023. — V. 44. — N. 1. — P. 012301.

113. Radosavljevic, S. Mid-infrared Vernier racetrack resonator tunable filter implemented on a germanium on SOI waveguide platform [Invited] / S. Radosavljevic, N. T. Beneitez, A. Katumba, M. Muneeb, M. Vanslembrouck, B. Kuyken, G. Roelkens // Opt. Mater. — 2018. — V. 8. —N. 4. — P. 824–835.

114. Denisov, S. A. High-quality Ge epilayers grown on a Si substrate in one step process via hot wire chemical vapor deposition / S. A. Denisov, S. A. Matveev, V. Yu. Chalkov, V. G. Shengurov // J. Phys.: Conf. Ser. — 2016. — V. 690. — P. 012014.

115. Yurasov, D. V. Impact of Growth and Annealing Conditions on the Parameters of Ge/Si(001) Relaxed Layers Grown by Molecular Beam Epitaxy / D. V. Yurasov, A. I. Bobrov, V. M. Daniltsev, A. V. Novikov, D. A. Pavlov, E. V. Skorokhodov, M. V. Shaleev and P. A. Yunin // Semiconductors. — 2015. — V. 49. — N. 11. — P. 1415–1420.

116. Jung, D. Low threading dislocation density GaAs growth on on-axis GaP/Si (001) / D. Jung, P. G. Callahan, B. Shin, K. Mukherjee, A. C. Gossard and J. E. Bowers // Journal of Applied Physics. — 2017. — V. 122. — P. 225703.

117. Sugo, M. Residual strains in heteroepitaxial IIIV semiconductor films on Si(100) substrates / M. Sugo, N. Uchida, A. Yamamoto, T. Nishioka, M. Yamaguchi // Journal of Applied Physics. — 1989. — V. 65. — P. 591–595.

118. Мармалюк, А. А. Разработка процесса МОС-гидридной эпитаксии квантоворазмерных гетероструктур на основе полупроводников $A^{III}B^{V}$ для приборов оптоэлектроники и ик-техники : дис. … д-ра тех. наук : 05.27.06 / Мармалюк Александр Анатольевич. — М., 2006. — 423 с.

119. Tang, M. 1.3-μm InAs/GaAs quantum-dot lasers monolithically grown on Si substrates using InAlAs/GaAs dislocation filter layers / M. Tang, S. Chen, J. Wu, Q. Jiang, V. G. Dorogan, M. Benamara, Y. I. Mazur, G.J. Salamo // Optics Express. — 2014. — V. 22. — N. 10. — P. 11528–11535.

120. Tang, M. Optimisation of the dislocation filter layers in 1.3-μm InAs/GaAs quantum-dot lasers monolithically grown on Si substrates / M. Tang, J. Wu, S. Chen, Q. Jiang, A. J. Seeds, H. Liu, V. G. Dorogan, M. Benamara, Y. Mazur, G. Salamo // IET Optoelectronics. — 2015. — V. 9. — N. 2. — P. 61–64.

121. Yang, J. High-Performance $In_{0.5}Ga_{0.5}As$/GaAs Quantum-Dot Lasers on Silicon With Multiple-Layer Quantum-Dot Dislocation Filters / J. Yang, P. Bhattacharya, Z. Mi // IEEE Transactions on electron divaces. — 2007. — V. 54. — N. 11. — P. 2849–2855.

122. Yamaguchi, M. Analysis of strainedlayer superlattice effects on dislocation density reduction in GaAs on Si substrates / M. Yamaguchi, T. Nishioka, M. Sugo // Applied Physics Letters. — 1989. — V. 54. — N. 1. — P. 24–26.

123. Knuuttila, L. Low Temperature Growth GaAs on Ge / L. Knuuttila, A. Lankinen, J. Likonen, H. Lipsanen, X. Lu, P. Mcnally, J. Riikonen, T. Tuomi // Japanese Journal of Applied Physics. — 2005. — V. 44. — N. 11. — P. 7777–7784.

124. Kawai, T. Ge segregation and its suppression in GaAs epilayers grown on Ge(111) substrate / T. Kawai, H. Yonezu, H. Yoshida, K. Pak // Applied Physics Letters. — 1992. — V. 61. — P. 1216–1218.

125. Chia, C. K. Effects of AlAs interfacial layer on material and optical properties of GaAs⁄Ge(100) epitaxy / C. K. Chia, J. R. Dong, D. Z. Chi, A. Sridhara, A. S. W. Wong, M. Suryana, G. K. Dalapati, S. J. Chua, S. J. Lee // Applied Physics Letters. — 2008. — V. 92. — P. 141905.

126. Kraut, E. A. Heats of solution and substitution in semiconductors / E. A. Kraut, W. A. Harrison // Journal of Vacuum Science & Technology. — 1984. — V. 2. — N. 3. — P. 409–414.

127. Chia, C. K. Role of $Al_xGa_{1-x}As$ buffer layer in heterogeneous integration of GaAs/Ge / C. K. Chia, G. K. Dalapati, Y. Chai, S. L. Lu, W. He, J. R. Dong, D. H. L. Seng, H. K. Hui, A. S. W. Wong, A. J. Y. Lau, Y. B. Cheng, D. Z. Chi, Z. Zhu, Y. C. Yeo, Z. Xu, S. F. Yoon // Journal of Applied Physics. — 2011. — V. 109. — P. 066106.

128. Iuchi, T. Radiation thermometry of silicon wafers based on emissivity-invariant condition / T. Iuchi, T. Seo // Applied Optics. — 2011. — V. 50. — N. 3. — P. 323–328.

129. Хвесюк, В. И. Теплопроводность наноструктур / В. И. Хвесюк, А. С. Скрябин // Теплофизика высоких температур. — 2017. — Т. 55. — В. 3. — С. 447–471.

130. Griffin, A. J. J. Effect of thickness on the transverse thermal conductivity of thin dielectric films / A. J. J. Griffi, F. R. Brotzen, P. J. Loos // J. Appl. Phys. — 1994. — V. 75. — N. 8. — P. 3761–3764.

131. Asheghi, M. Temperature-Dependent Thermal Conductivity of Single-Crystal Silicon Layers in SOI Substrates / M. Asheghi, M. N. Touzelbaev, K. E. Goodson, Y. K. Leung, S. S. Wong // J. Heat Transfer. — 1998. — V. 120. — N. 1. — P. 30–36.

132. Baidus, N. V. On the Application of Strain-Compensating GaAsP Layers for the Growth of InGaAs/GaAs Quantum-Well Laser Heterostructures Emitting at Wavelengths above 1100 nm on Artificial Ge/Si Substrates / N. V. Baidus, V. Ya. Aleshkin, A. A. Dubinov, Z.F. Krasilnik,

K. E. Kudryavtsev, S. M. Nekorkin, A. V. Novikov, A.V. Rykov, D. G. Reunov, M. V. Shaleev, P.A. Yunin, D. V. Yurasov // Semiconductors. — 2018. — V. 52. — N. 12. — P. 1547–1550.

133. Ультратонкие слои кремния на сапфире : учебно-методическое пособие для студентов, специализирующихся по направлению «Электроника и наноэлектроника» / Н. О. Кривулин. — Нижний Новгород : Нижегородский госуниверситет, 2011. — 40 с.

134. Bruel, M. Silicon on insulator material technology / M. Bruel // Electronics Letters. — 1995. — V. 31. — N. 14. — P. 1201–1202.

135. Пат. 2585900 Российская Федерация, МПК H01L 21/203. Способ выращивания кремний-германиевой гетероструктуры / С. А. Денисов, В. Ю. Чалков, В. Г. Шенгуров ; заявитель и патентообладатель ННГУ. — № 2015108219 ; заявл. 10.03.2015 ; опубл. 10.06.2016, Бюл. № 16.

136. Шенгуров, В. Г. Тонкие монокристаллические слои Ge на 2-дюймовых подложках Si / В. Г. Шенгуров, С. А. Денисов, В. Ю. Чалков, Ю. Н. Бузынин, М. Н. Дроздов, А. Н. Бузынин, П. А. Юнин // Письма в ЖТФ. — 2015. — Т. 41 — В. 1. — С. 71–78.

137. Rudkevich, E. Hydrogen Induced Si Surface Segregation on Ge-Covered Si(001) / E. Rudkevich, Feng Liu, D. E. Savage, T. F. Kuech, L. McCaughan, M. G. Lagally // J. Phys. Rev. L. — 1998. — V. 81. — N. 16. — P. 3467–3470.

138. Matveev, S. A. Low temperature growth of the epitaxial Ge layers on Si(100) by Hot Wire Chemical Vapor Deposition / S. A. Matveev, S. A. Denisov, D. V. Guseinov, V. N. Trushin, A. V. Nezhdanov, D. O. Filatov, V. G. Shengurov // Journal of Physics: Conference Series. — 2014. — V. 541. — P. 012026.

139. Метод молекулярно пучковой эпитаксии и его применение для формирования SiGe наноструктур : практикум для студентов специальности «Радиофизика и электроника» / Д. Н. Лобанов, А. В. Новиков, З. Ф. Красильник. — Нижний Новгород : Нижегородский госуниверситет, 2010. — 37 с.

140. Volkov, P. V. Novel technique for monitoring of MOVPE processes / P. V. Volkov, A. V. Goryunov, V. M. Daniltsev, A. Yu. Luk'yanov, D. A. Pryakhin, A. D. Tertyshnik, O. I. Khrykin, V. I. Shashkin // Journal of Crystal Growth. — 2008. — V. 310. — P. 4724–4726.

141. Volkov, P. V. Optical Monitoring of Technological Parameters during Molecular-Beam Epitaxy / P. V. Volkov, A. V. Goryunov, A. Yu. Luk'yanova, A. D. Tertyshnik, A. V. Novikov, D. V. Yurasov, N. A. Baidakova, N. N. Mikhailov, V. G. Remesnik, V. D. Kuzmin // Semiconductors. — 2012. — V. 46. — N. 12. — P. 1471–1475.

142. Кулешов, В. Ф. Спектроскопия и дифракция электронов при исследовании поверхности твердых тел / В. Ф. Кулешов, Ю. А. Кухаренко, С. А. Фридрихов; отв. ред. Н. Г. Рамбиди. — М.: Наука, 1985. — 288 с.

143. Технология Кремний-На-Изоляторе [Электронный ресурс] // Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана. — 2015. — Режим доступа: https://studfile.net.

144. Коблов, Э.А. Люминесцентные свойства сверхрешеток AlGaAs/GaAs : дис. … магистр : 210100 / Коблов Эдуард Алексеевич. — Нижний Новгород, 2014. — 68 с.

145. Hui, L. Mass transport analysis of a showerhead MOCVD reactor / L. Hui // Journal of Semiconductors. — 2011. — V. 32. — N. 3. — P. 033006.

146. Choi, S. Growth and characterization of III-nitride materials for high efficiency optoelectronic devices by metalorganic chemical vapor deposition : dis. … PhD in the School of Materials Science and Engineering / Choi Suk. — Georgia Tech., 2012. — 138 p.

147. Krost, A. Simultaneous measurement of wafer curvature and true temperature during metalorganic growth of group-III nitrides on silicon and sapphire / A. Krost, F. Schulze, A. Dadgar, G. Strassburger, K. Haberland, T. Zettler // Phys. Stat. Sol. (b). — 2005. — V. 242. — N. 13. — P. 2570–2574.

148. Breiland, W. G. A virtual interface method for extracting growth rates and high temperature optical constants from thin semiconductor films using in situ normal incidence reflectance / W. G. Breiland, K. P. Killeen // J. Appl. Phys. – 1995. – V. 78. – P. 6726–6736.

149. Малехонова, Н. В. Профилирование состава гетеронаноструктур методами Z-контраста и рентгеновской энергодисперсионной спектроскопии : дис. … канд. физ.-мат. наук : 01.04.07 / Малехонова Наталья Викторовна. — Нижний Новгород, 2016. — 118 с.

150. Hytch, M. J. Quantitative measurement of displacement and strain fields from HREM micrographs / M. J. Hytch, E. Snoeck, R. Kilaas // Ultramicroscopy. — 1998. — V. 74. — P. 131–146.

151. GPA Phase Manual 4.12 [Электронный ресурс] / HREM Research Inc. // GPA for DigitalMicrograph. — 2021. — Режим доступа: https://www.hremresearch.com/gpa/.

152. Williams, D. B. Transmission Electron Microscopy / D. B. Williams, C. B. Carter. — N.Y.: Springer, 2009. — 779 p.

153. Weyher, J. Selective etching and photoetching of {100} gallium arsenide in CrO_3-HF aqueous solutions / J. Weyher, J. V. D. Van // Journal of Crystal Growth. — 1983. — V. 63. — P. 285–291.

154. Павлов, Д. А. Изучение основ гетероэпитаксиального роста при молекулярно-лучевой эпитаксии : практикум / Д. А. Павлов, С. М. Планкина. — Нижний Новгород : Нижегородский госуниверситет, 2013. — 25 с.

155. Rykov, A. V. GaAs diode structures with n+-p junction on Ge/Si templates / A. V Rykov, S. A Denisov, V. G. Shengurov, N. V. Baidus, Y. N. Buzynin // Journal of Physics: Conference Series. — 2020. — V. 1482. — P. 012034.

156. Rykov, A. V. Structural investigation of light-emitting A3B5 structures grown on Ge/Si(100) substrate / A. V. Rykov, M. V. Dorokhin, P. S. Vergeles, V. A. Kovalskiy, E. B. Yakimov, M. V. Ved', N. V. Baidus, A. V. Zdoroveyshchev, V. G. Shengurov, S. A. Denisov // J. Phys.: Conf. Ser. — 2018. — V. 1124. — P. 022037.

157. Souriau, L. Characterization of Threading Dislocations in Thin Germanium Layers by Defect Etching: Toward Chromium and HF-Free Solution / L. Souriau, T. Atanasov, V. Terziev, A. Moussa, M. Caymax, R. Loo, M. Meuris, W. Vandervorst // Journal of The Electrochemical Society. — 2008. — V. 155. — N. 9. — P. 677–681.

158. Бобров, А. И. Исследование полей упругих деформаций и напряжений в массивах вертикально упорядоченных Ge(Si)-наноостровков : дис. … канд. физ.-мат. наук : 01.04.07 / Бобров Александр Игоревич. — Нижний Новгород, 2015. — 145 с.

159. Dasilva, Y. A. R. Structural defects in cubic semiconductors characterized by aberration-corrected scanning transmission electron microscopy / Y. A. R. Dasilva, R. Kozak, R. Erni, M. D. Rossell // Ultramicroscopy. — 2017. — V. 176. — P. 11–22.

160. Narayan, J. Formation of misfit dislocations in thin film heterostructures / J. Narayan, S. Oktyabrsky // Journal of Applied Physics. — 2002. — V. 92. — N. 12. — P. 7122–7127.

161. Bolkhovityanov, Y. B. Mechanism of induced nucleation of misfit dislocations in the Ge-on-Si(001) system and its role in the formation of the core structure of edge misfit dislocations / Y. B. Bolkhovityanov, A. S. Deryabin, A. K. Gutakovskii, L. V. Sokolov // Acta Materialia. — 2013. — V. 61. — N. 2. — P. 617–621.

162. Gillard, V.T. Role of dislocation blocking in limiting strain relaxation in heteroepitaxial films / V.T. Gillard, W.D. Nix, L.B. Freund // Journal of Applied Physics. — 1994. — V. 76. — P. 7280–7287.

163. Wortman, J. J. Young's Modulus, Shear Modulus, and Poisson's Ratio in Silicon and Germanium / J. J. Wortman, R. A. Evans // Journal of Applied Physics. — 1965. — V. 36 — P. 153–156.

164. Nikolskaya, A. A. Light-emitting 9R-Si phase formed by Kr+ ion implantation into SiO_2/Si substrate / A. A. Nikolskaya, D. S. Korolev, A. N. Mikhaylov, A. I. Belov, A. A. Sushkov, N. O. Krivulin, K. R. Muhamatchin, A. A. Elizarova, M. O. Marychev, A. A. Konakov, D. I. Tetelbaum, D. A. Pavlov // Appl. Phys. Lett. — 2018. — V. 113. — P. 182103.

165. Kuan, T. S. Electron microscope studies of a Ge–GaAs superlattice grown by molecular beam epitaxy / T. S. Kuan, C. A. Chang // Journal of Applied Physics. — 1983. — V. 54. — P. 4408–4413.

166. Yurasov, D. V. Influence of Annealing on the Properties of Ge:Sb/Si(001) Layers with an Antimony Concentration Above Its Equilibrium Solubility in Germanium / D. V. Yurasov,

N. A. Baidakova, M. N. Drozdov, E. E. Morozova, M. A. Kalinnikov, A. V. Novikov // Semiconductors. — 2019. — V. 53. — N. 7. – P. 882–886.

167. Lee, N. Y. Determination of conduction band tail and Fermi energy of heavily Si-doped GaAs by room-temperature photoluminescence / N. Y. Lee, K. J. Lee, C. Lee, J. E. Kim, H. Y. Park, D. H. Kwak, H. C. Lee, H. Lim // Journal of Applied Physics. — 1995. — V. 78, — N. 5. — P. 3367–3370.

168. Бир, Г. Л. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках / Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус. — Москва : Наука, 1972. — 584 с.

169. Rykov, A. V. Structural and optical characteristics of GaAs films grown on Si/Ge substrates / A. V. Rykov, M. V. Dorokhin, P. S. Vergeles, N. V. Baidus, V. A. Kovalskiy, E. B. Yakimov, O. A. Soltanovich // Journal of Physics: Conf. Series. — 2018. — V. 993. — P. 012014.

170. Tateno, K. Carbon doping and etching effects of CBr_4 during metalorganic chemical vapor deposition of GaAs and AlAs / K. Tateno, Y. Kohama, C. Amano // Journal of Crystal Growth. — 1997. — V. 172. — P. 5–12.

171. Gerald, B. S. Organometallic Vapor-Phase Epitaxy: Theory and Practice / B.S. Gerald. — 2nd ed. — Academic Press, 1989. — P. 599.

172. Houghton, D. C. Design criteria for structurally stable, highly strained multiple quantum well devices / D. C. Houghton, M. Davies, M. Dion // Applied Physics Letters. — 1965. — V. 64. — P. 505–507.

173. Fitzgerald, E. A. Properties of Lattice-Matched and Strained Indium Gallium Arsenide / E. A. Fitzgerald; edited by P. Bhattacharya. — London : INSPEC : the Institution of Electrical Engineers, 1993. — 340 p.

174. Brice, J. C. Properties of Gallium Arsenide / J. C. Brice; edited by M. R. Brozel, G. E. Stillman. — London : INSPEC : the Institution of Electrical Engineers. — 1996. — 1010 p.

175. Hoke, W. E. Simultaneous determination of Poisson ratio, bulk lattice constant, and composition of ternary compounds: $In_{0.3}Ga_{0.7}As$, $In_{0.3}Al_{0.7}As$, $In_{0.7}Ga_{0.3}P$, and $In_{0.7}Al_{0.3}P$ / W. E. Hoke, T. D. Kennedy, A. Torabi // Applied Physics Letters. — 2001. — V. 79. — N. 25. — P. 4160–4162.

176. Höfler, G. E. Effect of annealing temperature on the hole concentration and lattice relaxation of carbondoped GaAs and AlxGa1−xAs / G. E. Höfler, H. J. Höfler, N. Holonyak Jr., K. C. Hsieh // Journal of Applied Physics. — 1992. — V.72. — N. 11. — P. 5318–5324.

177. Wiley, J. D. Semiconductor and Semimetals / J. D. Wiley; edited by R. K. Willardson, A. C. Beer. — NY : Academic Press, 1975. — V. 10. — P. 91–174.

178. Rode, D. L. Semiconductor and Semimetals / D. L. Rode; edited by R. K. Willardson, A. C. Beer. — NY : Academic Press, 1975. — V. 10. — P. 1–89.

179. Pearson, W. B. Crystal Chemistry and Physics of Metals and Alloys / W. B. Pearson. — NY : Wiley, 1972. — 806 p.

180. Khazanova, S. V. Tunnel-Coupled InGaAs/GaAs Quantum Wells: Structure, Composition, and Energy Spectrum / S. V. Khazanova, N. V. Baidus, B. N. Zvonkov, D. A. Pavlov, N. V. Malekhonova, V. E. Degtyarev, D. S. Smotrin, I. A. Bobrov // Semiconductors. — 2012. — V. 46. — N. 12. — P. 1476–1480.

181. Павлов, Д. А. Эпитаксиальный рост гексагональных политипов кремния на сапфире / Д. А. Павлов, А. В. Пирогов, Н. О. Кривулин, А. И. Бобров // Физика и техника полупроводников. — 2015. — Т. 49. — В. 1. — С. 98–101.

182. Cerva, H. High-resolution electron microscopy of diamond hexagonal silicon in low pressure chemical vapor deposited polycrystalline silicon / H. Cerva // J. Mater. Res. — 1991. — V. 6. — N. 11. — P. 2324–2336.

183. Ravila, P. X-ray diffraction analysis of superlattices grown on misoriented substrates / P. Ravila, V. M. Airaksinen, H. Lipsanen, T. Tuomi // Journal of Crystal Growth. — 1991. — V. 114. — P. 569–572.

184. Дроздов, Ю. Н. Прямое сравнение периодов сверхрешеток, измеренных методом рентгеновской дифрактометрии и оптической интерферометрии / Ю. Н. Дроздов, М. Н. Дроздов, А. В. Новиков, П. А. Юнин, Д. В. Юрасов // Известия РАН. Серия физическая. — 2011. — Т. 75. — № 1. — С. 45–48.

185. Speriosu, V. S. Xray rocking curve analysis of superlattices / V. S. Speriosu, T. Vreeland // Journal of Applied Physics. — 1984. — V. 56. — P. 1591–1600.

186. Hagedorn, S. High-quality AlN grown on a thermally decomposed sapphire surface / S. Hagedorn, A. Knauer, F. Brunner, A. Mogilatenko, U. Zeimer, M. Weyers // Journal of Crystal Growth. — 2017. — V. 479. — P. 16–21.

Приложение А
(рекомендуемое)
Определение параметров светоизлучающей гетероструктуры

Так как режимы роста светоизлучающих гетероструктур в образцах D (GaAs) и E (Ge/Si/КНИ) поддерживались одинаковыми, то предполагается, что параметры квантовых ям и барьеров, а также концентрации носителей заряда в слоях GaAs данных образцов одинаковы. Параметры квантовых ям и барьеров, а также концентрации носителей заряда слоев p+ и n+GaAs определялись по образцу D (GaAs), так как данная гетероструктура заведомо имеет более высокое кристаллическое качество по сравнению с образцом E (Ge/Si/КНИ), что увеличивает достоверность результатов.

Для характеристики качества квантовых ям в гетероструктуре на подложке GaAs и составления рекомендаций по его улучшению проводился комплекс исследований: морфологии и кривизны поверхности, оптических, структурных и электрофизических свойств, а также распределения температуры роста светоизлучающей гетероструктуры по поверхности. После обработки всех данных проведено сравнение экспериментальных результатов с теоретическими расчетами и сформулированы рекомендации для дальнейших исследований.

А.1 Электрофизические свойства слоев p+ и n+GaAs

Методом электрохимического CV профилирования (ECV) измерен профиль концентрации носителей заряда по глубине в образце D на подложке GaAs (рисунок А.1). Стоит отметить, что скорость травления в методе ECV не была специально откалибрована, поэтому значения глубины, представленные на соответствующих зависимостях, не являются точными. Для определения толщин слоев использовался метод СПЭМ. Результаты расчета толщин представлены в разделе 4.1.2. Поскольку подложка GaAs является полуизолирующей, то схема измерений в методе ECV была такова, что оба контакта были к верхнему слою p+GaAs. В такой схеме наличие p-n перехода может исказить результаты исследования слоев, находящихся ниже p-n перехода, то есть слоев n-типа. Для получения более достоверных результатов исследования слоев n-типа верхние над ними слои были удалены методом плазмохимического травления и проведено второе измерение методом ECV (вставка на рисунке А.1). Таким образом, влияние p-n перехода было исключено.

Для определения того, что полученные результаты являются достоверными, в программном обеспечении, прилагаемом к установке ECVPro, для каждой точки автоматически рассчитывается коэффициент диссипации (КД, dissipation factor). Значение КД<0,4 указывает на достоверные результаты. Измерения методом ECV образцов разного типа (n-GaAs, p-GaAs) в нескольких точках по поверхности, а также серии одинаковых образцов одного типа позволили сделать вывод, что в случае КД<0,4 относительная погрешность метода ECV не превышает 4 %. Для образцов с верхним слоем GaAs, у которого значение $p>10^{19}$ см$^{-3}$ (слой p+GaAs), не удалось подобрать схему измерений, чтобы получить значение КД<0,4. При этом для серии из 10 образцов, в которых слой p+GaAs выращен при таких же параметрах роста как и в образцах D (GaAs) и E (Ge/Si/КНИ) относительная погрешность получается равной 6 %. Чтобы проверить достоверность полученных значений p в слое p+GaAs методом ECV использовался метод измерения эффекта Холла.

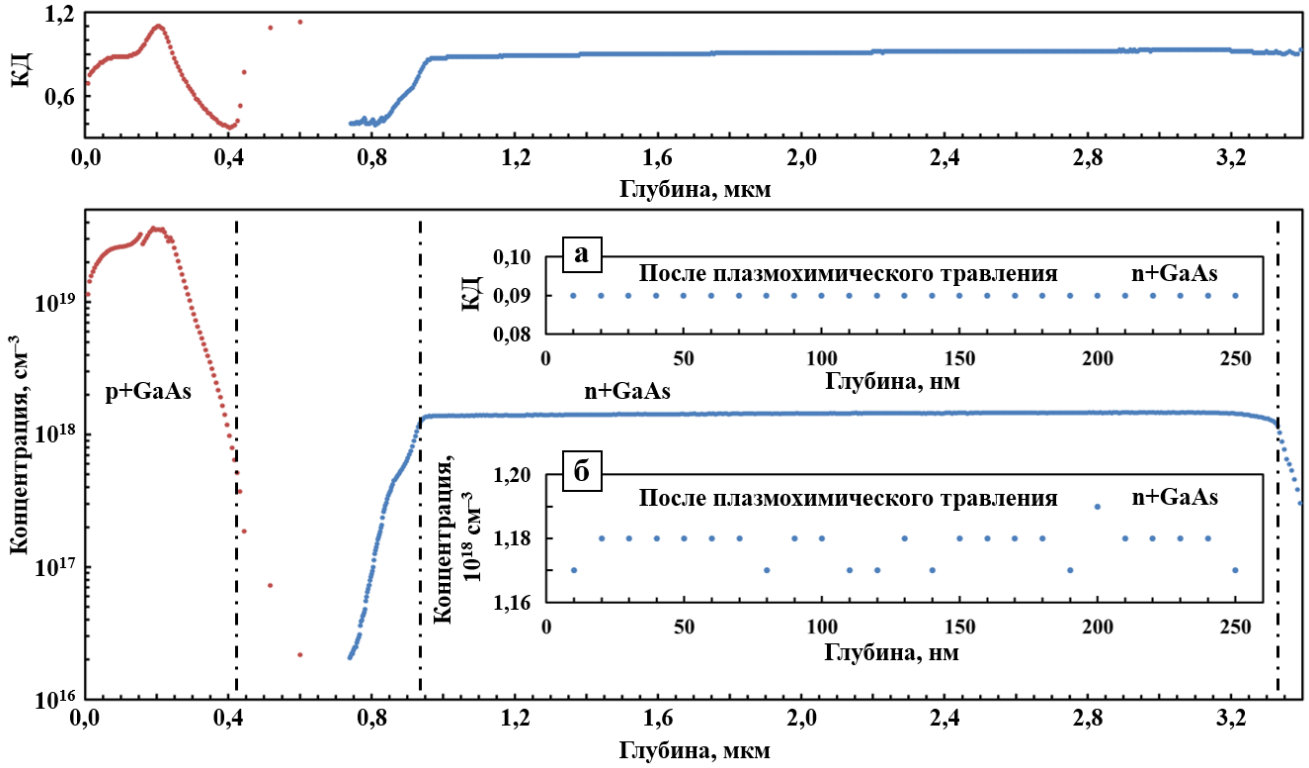


Рисунок А.1 — Профиль распределения концентрации носителей заряда по глубине, полученный методом электрохимического CV профилирования, светоизлучающей гетероструктуры D (GaAs) снизу и коэффициент диссипации (КД, dissipation factor) для него сверху; на вставках (а) профиль распределения концентрации носителей заряда по глубине слоя n+GaAs после удаления вышележащих слоев с помощью плазмохимического травления и (б) КД для него

Примечание — Штрих-пунктирной линией разграничены области слоев p+GaAs и n+GaAs, соответствующие области подписаны.

По сравнению со слоем n+GaAs слой p+GaAs имеет неоднородное распределение концентрации носителей заряда по глубине (рисунок А.1). Если идти по данной зависимости с глубины к поверхности, то можно выделить в слое p+GaAs несколько областей (рисунок А.2 (в)). Повышение концентрации носителей заряда дырок (p) в области I обусловлено понижением температуры роста [170]. Наличие области II с максимальным значением p связано с инерционностью нагревательного элемента реактора, влияние которой заметно на зависимости температуры роста слоя p+GaAs от времени — участок II (рисунок А.2 (д)). В областях III и IV температура роста имеет постоянное от времени значение равное уставке (рисунок А.2 (д)). Отличие области IV от III заключается в резком спаде значения p (рисунок А.2 (в)).

Учитывая, что резкий спад в приповерхностной области концентрации носителей заряда наблюдался нами методом электрохимического CV профилирования и ранее только в образцах с верхним слоем GaAs, легированного C (GaAs:C) до степени 10^{19} см$^{-3}$, а в образцах с верхним слоем GaAs:C с $p<10^{18}$ см$^{-3}$ или GaAs легированного Si резкого спада концентрации носителей заряда не наблюдалось, то данный эффект не связан с изгибом энергетических зон.

Отсутствие спада концентрации атомов C в приповерхностной области, а также наличие атомов водорода в слое p+GaAs на профиле, полученном методом вторично-ионной масс-спектрометрии (рисунок А.2 (е)), указывают на то, что в приповерхностной области уменьшение значения p связано с пассивацией акцепторов C атомами H во время роста [176].

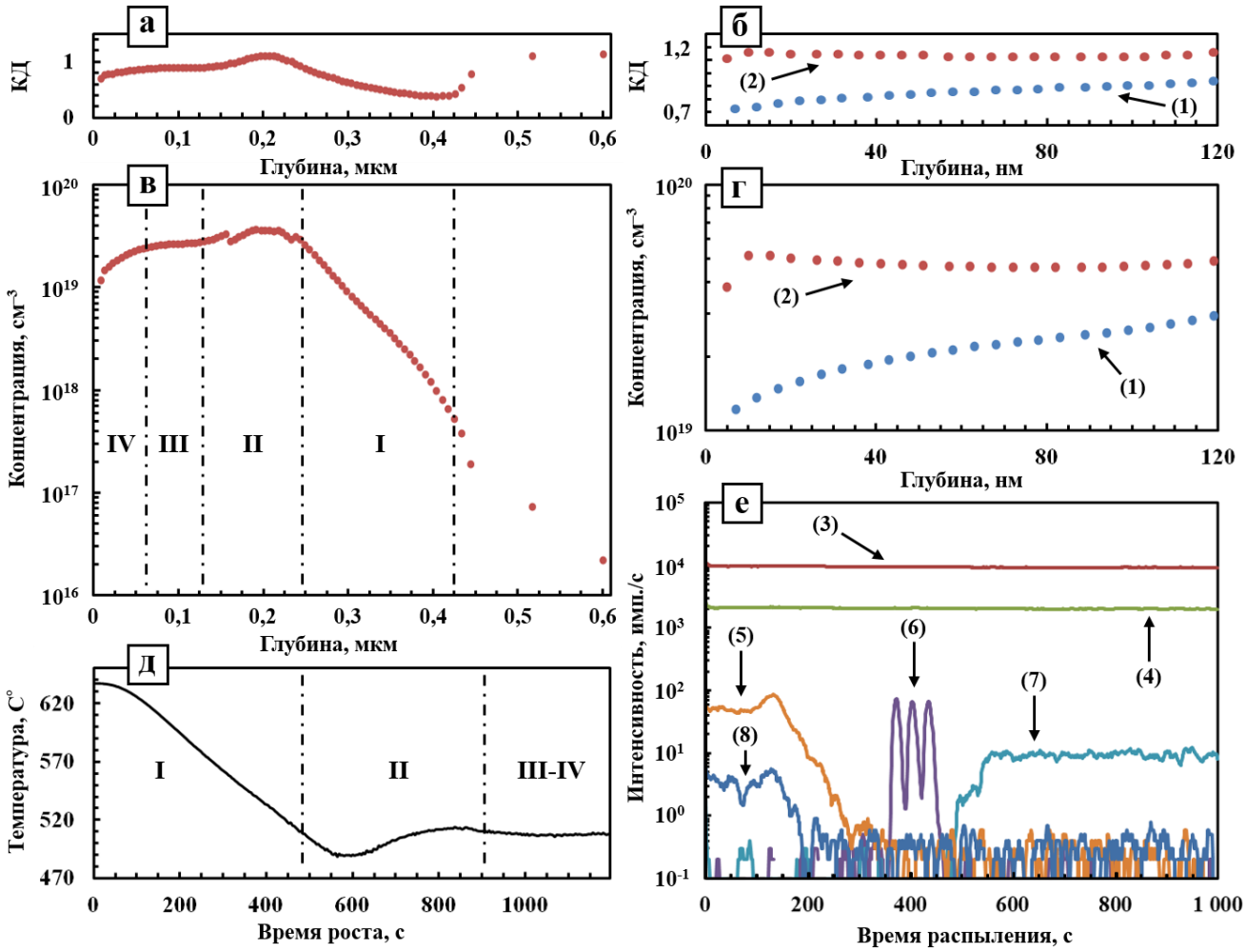
В работе [176] установлено, что отжиг при температуре, значение которой лежит в диапазоне от 500 до 550 °C в атмосфере азота без использования потока AsH_3 эффективен для увеличения значения p в случае пассивации акцепторов C атомами H. Для исследования возможности увеличения значения p с помощью постростового отжига в атмосфере азота проведен дополнительный эксперимент. На подложке GaAs (001) выращен слой p+GaAs с применением таких же режимов роста, которые использовались в образцах D (GaAs) и E (Ge/Si/КНИ), за исключением двух отличий. Во-первых, уменьшение температуры роста и ее стабилизация до значения 510 °C происходили во время паузы до роста слоя p+GaAs, а во-вторых, время роста слоя p+GaAs уменьшено. После роста образец разделен на фрагменты, один из которых подвергался отжигу в атмосфере азота без подачи AsH_3 при температуре 535 °C в течении 10 мин. Для двух фрагментов проводились измерения слоя p+GaAs методом электрохимического CV профилирования, результаты которых представлены на рисунке А.2 (б), (г). Наблюдаемые отличия в значениях p для образцов до и после отжига превышают относительную погрешность равную 6 %. В связи с этим можно достоверно сказать, что проведенный отжиг позволяет увеличить значение p, а также выровнять его распределение по глубине в верхнем слое p+GaAs (рисунок А.2 (г)). В образце после отжига в атмосфере азота значение p увеличилось в среднем до значения $(4{,}71\pm0{,}11)\cdot10^{19}$ см$^{-3}$. Стоит отметить, что в

данном образце слой p+GaAs выращен при постоянной температуре 510 °C. Первая точка на зависимости для образца после отжига на рисунке А.2 (г), значение p которой ниже, чем для других, не может быть однозначно интерпретирована на основе имеющихся результатов. Данный эксперимент подтвердил предположение о причине спада значения p в приповерхностной области p+GaAs, которая заключается в пассивации акцепторов C атомами H во время роста GaAs. Однако прежде чем внедрять такую технологическую операцию необходимо быть уверенным, что вероятно возникающая деградация приповерхностной области GaAs при использовании температуры отжига 535 °C без потока AsH_3 не будет существенно влиять на эффективность работы полупроводникового прибора. Так как таких исследований нами не проводилось, то для создания светоизлучающих p-i-n диодов образцы не подвергались постростовому отжигу в атмосфере азота.

Методом измерения эффекта Холла по схеме Ван-дер-Пау при комнатной температуре от целой гетероструктуры D (GaAs) получены положительный коэффициент Холла и следующие значения слоевой концентрации и холловской подвижности: p_l=1,7·10^{15} см$^{-2}$, μ_H=54 см^2/(В·с). Положительный коэффициент Холла и низкие значения холловской подвижности (μ_H=54 см^2/(В·с)) указывают на то, что во время измерений эффекта Холла ток мог протекать по слоям p-типа со средней по глубине слоя концентрацией носителей заряда при комнатной температуре, лежащей в диапазоне от 10^{19} до 10^{20} см$^{-3}$ [166]. По этим данным и результатам измерений методами электрохимического CV профилирования (ECV) и СПЭМ следует, что в измерениях эффекта Холла мог принимать участие слой p-GaAs с толщиной примерно 700 нм. Учитывая слоевую концентрацию носителей заряда, полученную методом измерения эффекта Холла, значение объемной концентрации носителей заряда для слоя толщиной 700 нм получается равной 2,43·10^{19} см$^{-3}$. Среднее значение p по глубине 700 нм слоя p-GaAs из данных, полученных методом ECV, составляет 1,84·10^{19} см$^{-3}$.

Оценка области зависимости, полученной методом ECV, которая соответствует толщине слоя p-GaAs 700 нм, проводилась следующим образом. По данным ECV толщина слоя p+GaAs ≈425 нм, а по данным СПЭМ ≈500 нм. Следовательно, калибровочный коэффициент для значений толщины слоев p-GaAs на зависимости, полученной методом ECV, равен 1,18.

Исходя из того, что относительная погрешность метода ECV для таких концентраций составляет 6 %, а метода измерения эффекта Холла 20 %, то можно сделать вывод, что полученные данные методами ECV и эффекта Холла не противоречат друг другу. Следовательно, количественные данные ECV для слоя p+GaAs можно считать достоверными.



1 — Зависимости для слоя p+GaAs до отжига в атмосфере азота; 2 — зависимости для слоя p+GaAs после отжига; зависимости распределения концентрации следующих атомов по глубине: 3 — Ga; 4 — As; 5 — C; 6 — In; 7 — Si; 8 — H.

Рисунок А.2 — Исследование неравномерного распределения концентрации носителей заряда по глубине слоя p+GaAs образца D (GaAs): (в) профиль распределения концентрации носителей заряда по глубине слоев p-GaAs образца D; (г) профили распределения концентрации носителей заряда по глубине слоя p+GaAs до (1 — синие точки) и после (2 — красные точки) отжига в атмосфере азота без подачи AsH_3 при температуре 535 °C, выращенного при тех же режимах роста, что и слой p+GaAs в образце D, но при постоянной температуре роста и меньшем времени роста; (а), (б) зависимости значений коэффициента диссипации (КД, dissipation factor) для профилей (в) и (г) соответственно; (д) среднее значение по поверхности подложки температуры роста от времени роста слоя p+GaAs образца D; (е) качественный профиль распределения концентрации атомов Ga, As, In, Si, C, H в образце D по глубине, полученный методом ВИМС

Примечание — Отсутствие спада сигнала от Ga в местах детектирования сигнала от In, а также разные значения интенсивности сигнала от In для разных квантовых ям являются следствиями особенностей метода ВИМС и используемой высокой скорости распыления.

Результаты второго измерения методом электрохимического CV профилирования образца D (GaAs) после плазмохимического травления верхних над n+GaAs слоев представлены на вставках рисунка А.1. Коэффициент диссипации получился равным 0,09, что говорит о достоверности результатов. Согласно этим данным концентрация носителей заряда электронов в слое n+GaAs равна $1{,}18\cdot10^{18}$ см$^{-3}$ с относительной погрешностью меньше 4 %. Учитывая, что для роста методом МОС-гидридной эпитаксии использовались сверхвысокочистые вещества и типичные параметры роста для получения высокого качества слоя GaAs (см. раздел 2.1.3), то степень компенсации можно принять равной 1. В таком случае при комнатной температуре концентрации электронов $(1{,}18\pm0{,}05)\cdot10^{18}$ см$^{-3}$ соответствует подвижность носителей заряда $\mu\approx(3215\pm110)$ см^2/(В·с) [178].

Таким образом, для образца D (GaAs) (предположительно и для образца E (Ge/Si/КНИ)) распределение концентрации носителей заряда дырок по глубине слоя p+GaAs не однородное, меняется от $5{,}15\cdot10^{17}$ см$^{-3}$ до $3{,}62\cdot10^{19}$ см$^{-3}$ с относительной погрешностью 6 % со средним по глубине значением $p=1{,}93\cdot10^{19}$ см$^{-3}$ (рисунок А.2), распределение концентрации носителей заряда электронов по глубине слоя n+GaAs однородное со значением $n=(1{,}18\pm0{,}05)\cdot10^{18}$ см$^{-3}$. Установлено, что резкое уменьшение значения p в приповерхностной области p+GaAs связано с пассивацией акцепторов C атомами H во время роста. Для выравнивания распределения концентрации носителей заряда дырок и увеличения значения p до $(4{,}71\pm0{,}31)\cdot10^{19}$ см$^{-3}$ в области слоя p+GaAs, выращенного при постоянной температуре уставки 510 °C, можно использовать постростовой отжиг в атмосфере азота без подачи AsH_3 при температуре 535 °C в течении 10 мин. Однако не было проведено исследований влияния вероятно возникающей деградации приповерхностной области GaAs при таком постростовом отжиге на эффективность работы полупроводникового прибора.

А.2 Параметры квантовых ям и слоя p+GaAs

Обнаружен градиент параметров фотолюминесценции образца D на подложке GaAs в направлении, которое соответствует направлению градиента температуры роста, зафиксированного во время роста с помощью пирометра Argus (рисунок А.3). Возможно, градиент температуры на поверхности подложки появился из-за неравномерного искривления подложки во время ее нагрева. Наличие искривления подложки подтверждается измерениями профиля поверхности образца D (GaAs) с использованием метода конфокальной микроскопии (рисунок А.4), которое позволило установить, что поверхность гетероструктуры на подложке

GaAs после остывания имеет малое значение кривизны с резко изогнутыми краями относительно основной площади и отличающимся искривлением поверхности в разных направлениях. Среднеквадратичная шероховатость поверхности, рассчитанная в программном обеспечении Gwyddion по АСМ-скану 7 на 7 мкм составляет 0,2 нм, что указывает на высокое качество поверхности.

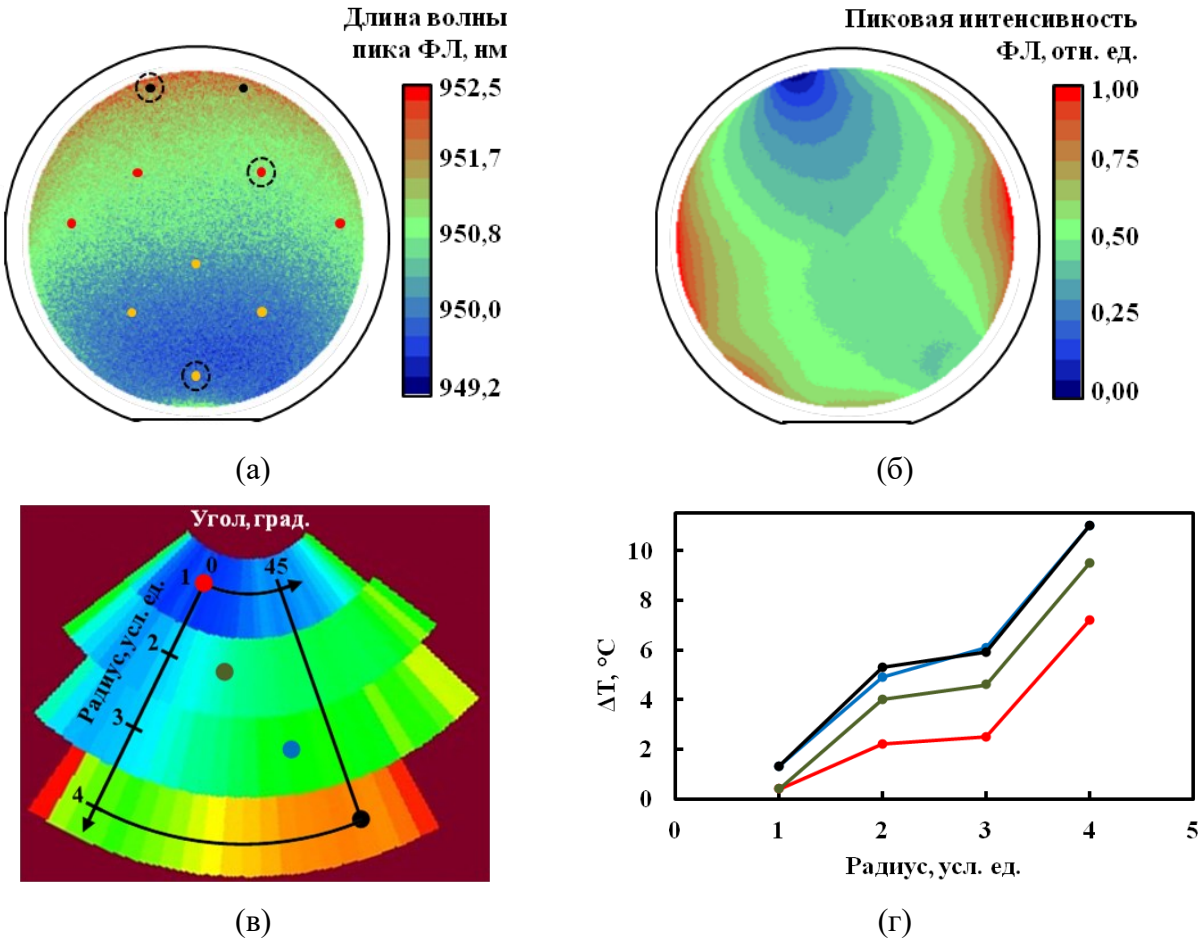


Рисунок А.3 — Карты (а) длины волны, (б) интенсивности пика фотолюминесценции (ФЛ) от квантовых ям InGaAs/GaAs образца D на подложке GaAs, (в) распределение температуры поверхности гетероструктуры D во время роста слоев III-V, (г) радиальные профили распределения температуры, проходящие через точки соответствующего цвета на карте (в)

Примечания

1 Области исследования ФЛ имеют диаметр 44,8 мм; выделенный круг на рисунках (а) и (б) с базовым и дополнительным срезами имеет диаметр два дюйма (50,8 мм).

2 Точками на карте (а) обозначены исследуемые методом рентгеновской дифрактометрии области: черные точки расположены в зоне 1, красные в зоне 2, оранжевые в зоне 3; пунктиром обведены области, в которых полученные кривые (2θ-ω) использовались для моделирования.

3 Карта интенсивности (б) нормирована на максимальное значение.

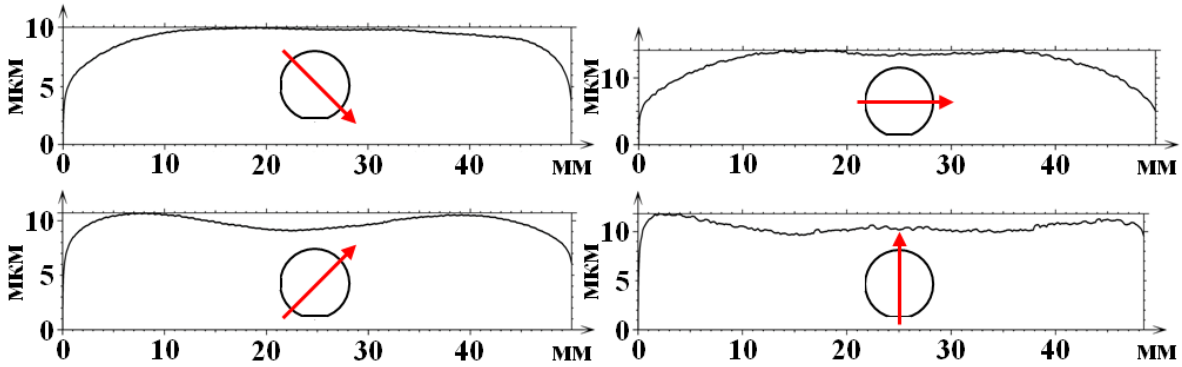


Рисунок А.4 — Профили поверхности гетероструктуры D на подложке GaAs

Примечание — на кругах отмечены базовый и дополнительный срезы подложки; красными стрелками указано направление проведения измерений для соответствующего профиля.

Методом рентгеновской дифрактометрии сняты (2θ-ω)-сканы в направлении перпендикулярном к направлению отклонения среза подложки вблизи отражения (004) GaAs в нескольких областях по поверхности гетероструктуры D (GaAs), указанных на рисунке А.3 (а). Все (2θ-ω)-сканы можно разбить на три группы. Характерные (2θ-ω)-сканы для каждой группы представлены на одном рисунке А.5. Важно отметить, что 3 группы точек совпадают с характерными тремя зонами на карте длин волн пика фотолюминесценции от квантовых ям (рисунок А.3 (а)), что указывает на связь структурных и оптических свойств.

На (2θ-ω)-сканах кроме пика от подложки, сателлитов и осцилляций от квантовых ям наблюдаются пик примерно на 175″ по углу 2θ от пика подложки GaAs, а также два плеча: слева и справа от пика подложки, распространяющиеся примерно до минус 150″ и плюс 600″ соответственно. Данные особенности (2θ-ω)-сканов связаны с наличием слоев p-GaAs с концентрацией атомов углерода в решетке GaAs [C]>10^{18} см$^{-3}$ [176]. Известно, что ковалентный радиус атома C меньше, чем ковалентный радиус атомов Ga и As, которые он может замещать в решетке GaAs [179]. Благодаря меньшему значению ковалентного радиуса встроенные в узлы атомы C стягивают кристаллическую решетку GaAs, уменьшая при этом ее параметр. Для того чтобы достоверно определить параметры квантовых ям и барьеров с помощью рентгеновской дифрактометрии необходимо учесть слои p-GaAs с [C]>10^{18} см$^{-3}$ при моделировании (2θ-ω)-сканов. При этом необязательно использовать точную модель, описывающую влияние слоев p-GaAs на (2θ-ω)-скан (подтверждено далее), так как метод рентгеновской дифрактометрии сильно чувствителен к атомам In в квантовых ямах (КЯ) InGaAs и области влияния КЯ и слоев p-GaAs с [C]>10^{18} см$^{-3}$ на (2θ-ω)-скан разделяются. Главное, чтобы модель, описывающая влияние слоев p-GaAs на (2θ-ω)-скан, повторяла экспериментальные данные в соответствующей области (2θ-ω)-скана. При этом параметры квантовых ям и барьеров будут достоверно определены при условии, что смоделированный (2θ-ω)-скан достаточно точно повторяет экспериментальный.

Согласно экспериментальным данным, полученным в работе [176], и тот факт, что бóльшую часть времени рост слоя p+GaAs осуществлялся при температуре <600 °C (15 % от общего времени роста слоя p+GaAs температура была в диапазоне от 600 °C до 638 °C), мы предполагаем, что атомы C преимущественно замещали атомы Ga и As в узлах решетки GaAs, а не встраивались в междоузлия. Так как ковалентные радиусы атомов Ga и As достаточно близки друг к другу (1,26 и 1,21 Å соответственно) [179], то метод рентгеновской дифрактометрии не будет чувствителен к тому какой атом Ga или As замещает атом C. Исходя из вышеперечисленных соображений в качестве слоев p-GaAs с $[C]>10^{18}$ см$^{-3}$ в модели, описывающей влияние слоев p-GaAs на (2θ-ω)-скан, использован твердый раствор $GaAs_{1-y}C_y$, где y — доля атомов C.

Для определения параметров квантовых ям InGaAs и их барьеров GaAs проведено моделирование (2θ-ω)-сканов по методике, описанной в приложении Г. В качестве экспериментальных (2θ-ω)-сканов использовались характерные для каждой из зон (2θ-ω)-сканы. Параметры квантовых ям (КЯ), барьеров и их возможные диапазоны значений устанавливались по методике, описанной в приложении Г. Для того чтобы оценить возможную ошибку при определении параметров КЯ, использовались три возможные модели, описывающие влияние слоев p-GaAs на (2θ-ω)-скан. Первая модель соответствует только результатам электрохимического CV профилирования (см. раздел А.1), вторая — только результатам вторично-ионной масс-спектрометрии (ВИМС) (см. раздел А.1), третья — результатам ВИМС, но при этом учитывающая, что лишь в слое p+GaAs параметр [C] достигает значения 10^{18} см$^{-3}$, при котором метод рентгеновской дифрактометрии начинает чувствовать деформацию решетки GaAs [176]. При этом последняя модель считается наиболее вероятной, так как известно, что при $[C]<10^{18}$ см$^{-3}$ значения [C]=p [176], а p лишь в слое p+GaAs достигает значения 10^{18} см$^{-3}$ согласно результатам электрохимического CV профилирования (ECV) (рисунок А.1).

В качестве начальных значений толщины слоев $GaAs_{1-y}C_y$ использовались результаты, полученные методом ECV и СПЭМ. В качестве начальных значений доли атомов C — значения, которые позволяют получить в программном обеспечении AMASS на моделированной кривой (2θ-ω) пики, расположенные на экспериментальном (2θ-ω)-скане. Диапазоны значений толщин слоев $GaAs_{1-y}C_y$ выбирались так, чтобы суммарная толщина была в районе той, которая получена методом СПЭМ. Диапазоны значений состава слоев $GaAs_{1-y}C_y$ выбирались таким образом, чтобы соблюдался качественный вид профиля, соответствующий выбранной модели.

После оценки изгиба поверхности образца в области исследования по пику подложки в программном обеспечении AMASS, поиск оптимальных параметров моделированной кривой для максимального соответствия с экспериментальной кривой проводился итерационным методом. Сначала оптимизировался узкий участок моделированной кривой вблизи пика от подложки, на

который сильное влияние оказывают слои $GaAs_{1-y}C_y$ (рисунок А.5 (б)). При этом в качестве переменных использовались лишь параметры, связанные с этими слоями (толщина слоев $GaAs_{1-y}C_y$ и доля y). Далее оптимизировалась вся кривая и в качестве переменных использовались параметры активной области: толщины квантовых ям InGaAs и барьеров GaAs, а также доля In. Процесс повторялся до тех пор, пока значение процента ошибки (R), формула для расчета которого представлена в приложении Г, не примет минимально возможное для данной модели значение.

Для сопоставления значений [C] и p на зависимостях распределения доли C по глубине (рисунок А.6) представлены значения в обратных кубических сантиметрах, которые рассчитывались по формуле (А.1):

$$[C] \approx 2{,}22 \cdot 10^{22} \cdot y, \qquad (A.1)$$

где [C] — концентрация атомов C в $GaAs_{1-y}C_y$, $см^{-3}$;

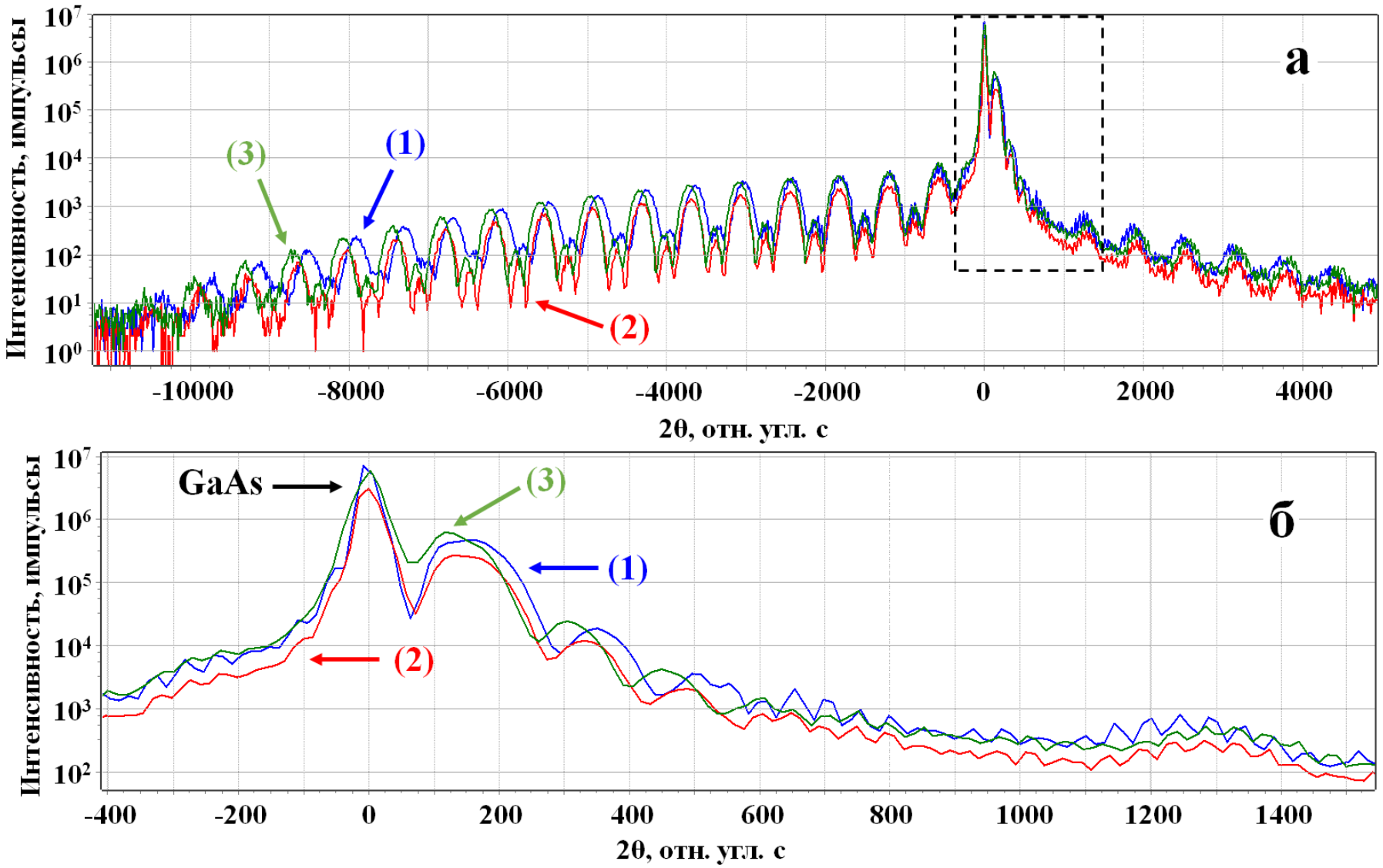
y — доля атомов C в $GaAs_{1-y}C_y$.

Вывод данной формулы следующий. Плотность атомов в решетке GaAs равна отношению числа атомов в решетке на долю элементарной ячейки, которое равно 8, к объему элементарной ячейки — $1{,}8 \cdot 10^{-22}$ $см^3$, то есть $4{,}44 \cdot 10^{22}$ $см^{-3}$, из которых 50 % составляют атомы As и 50 % — атомы Ga. Считая для простоты, что атомы C замещают только атомы As (возможность использования такого приближения описана выше), не учитывая изменения параметра решетки, получаем формулу (А.1).

Результаты моделирования представлены на рисунках А.6–А.8. Не зависимо от выбранной модели распределения [C] по глубине значение доли In в решетке InGaAs с точностью до двух значащих цифр после запятой совпадает и равна 0,14 для всех трех зон, толщины квантовых ям InGaAs и барьеров GaAs в нанометрах с точностью до одного знака после запятой совпадают в пределах доверительных интервалов. Данные результаты подтверждают предположение о том, что нет необходимости использовать точную модель, описывающую влияние слоев p-GaAs на (2θ-ω)-скан, для определения параметров слоев активной области светоизлучающей гетероструктуры с указанными точностями.

При использовании третьей модели наиболее приближенной к реальной получается, что наиболее вероятные значения с доверительными интервалами доли In в квантовых ямах (КЯ) InGaAs — 0,140 (0,138–0,143), толщины КЯ и барьеров — 6,81 нм (6,58–7,16) нм и 53,95 нм (53,32–54.77) нм соответственно.

Примечание — В скобках указаны доверительные интервалы к соответствующим значениям.



Зависимости для следующих зон, выделенных на рисунке А.3 (а): 1 —1 зона; 2 — 2 зона; 3 — 3 зона.

Рисунок А.5 — Характерные (2θ-ω)-сканы трех зон: (а) полный диапазон углов 2θ, (б) диапазон углов 2θ, выделенных пунктирной рамкой на рисунке (а), на который сильное влияние оказывает слой p+GaAs

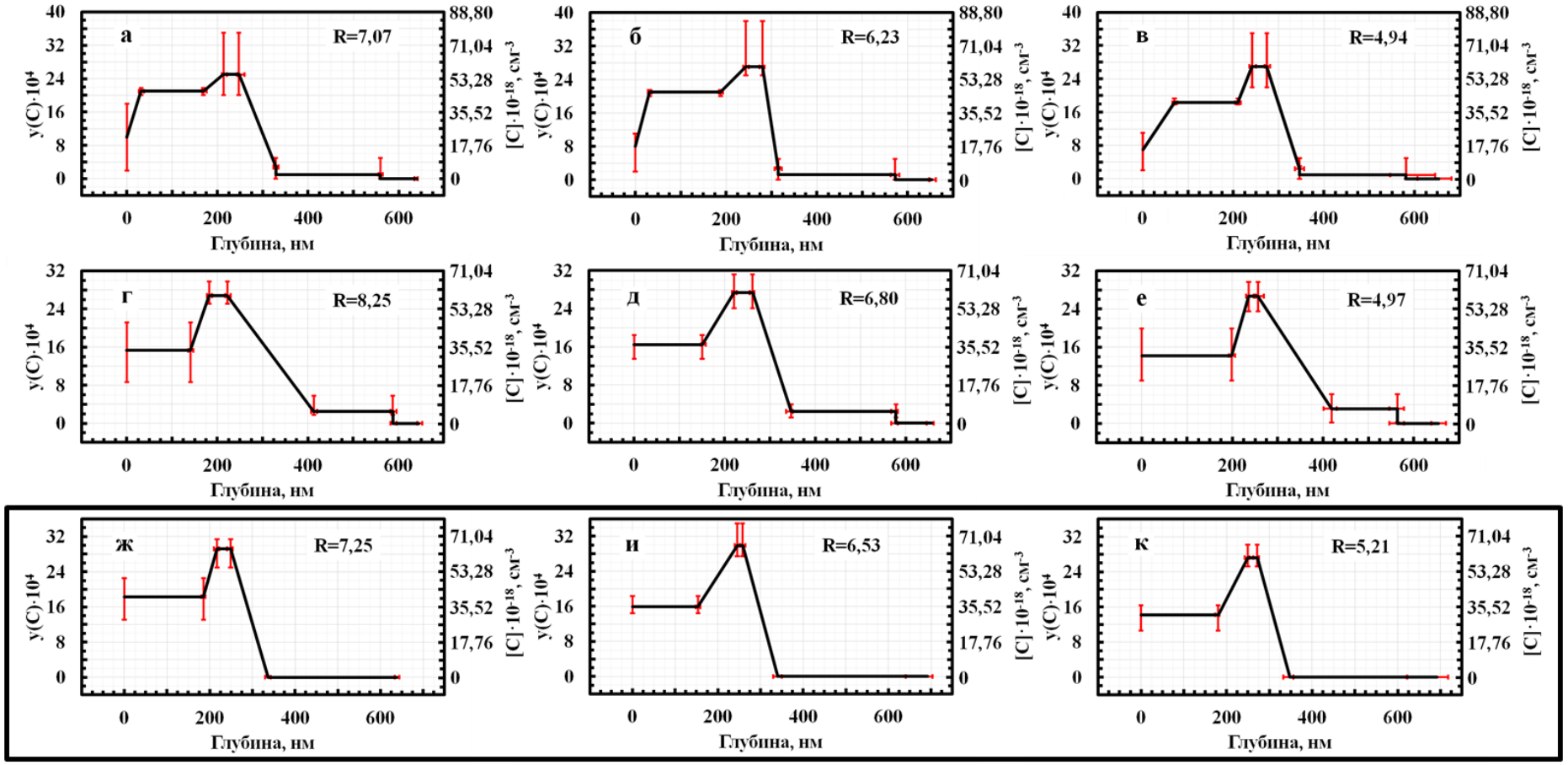


Рисунок А.6 — Профили концентрации атомов С в узлах решетки слоев p-GaAs, определенные в результате моделирования (2θ-ω)-сканов

Примечания

1 R — процент ошибки в усл. ед., значение которого характеризует несоответствие смоделированного (2θ-ω)-скана с экспериментальным.

2 Номер строки, в которой расположена зависимость, определяет номер модели, описывающей влияние слоев p-GaAs на (2θ-ω)-скан; номер столбца — номер зоны образца на рисунке А.3 (а), в которой получен экспериментальный (2θ-ω)-скан.

3 Рамкой выделена модель, которая считается наиболее приближенной к реальной.

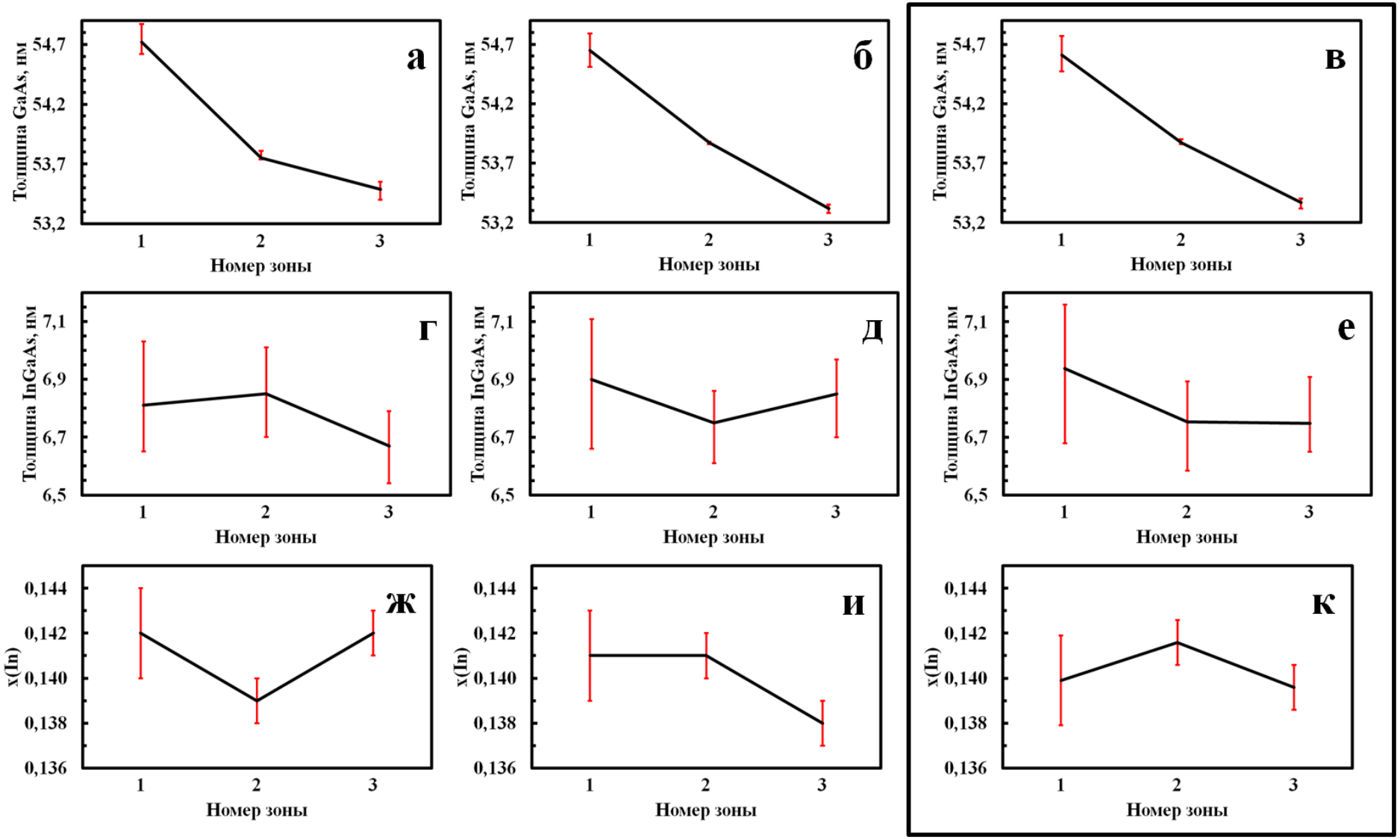
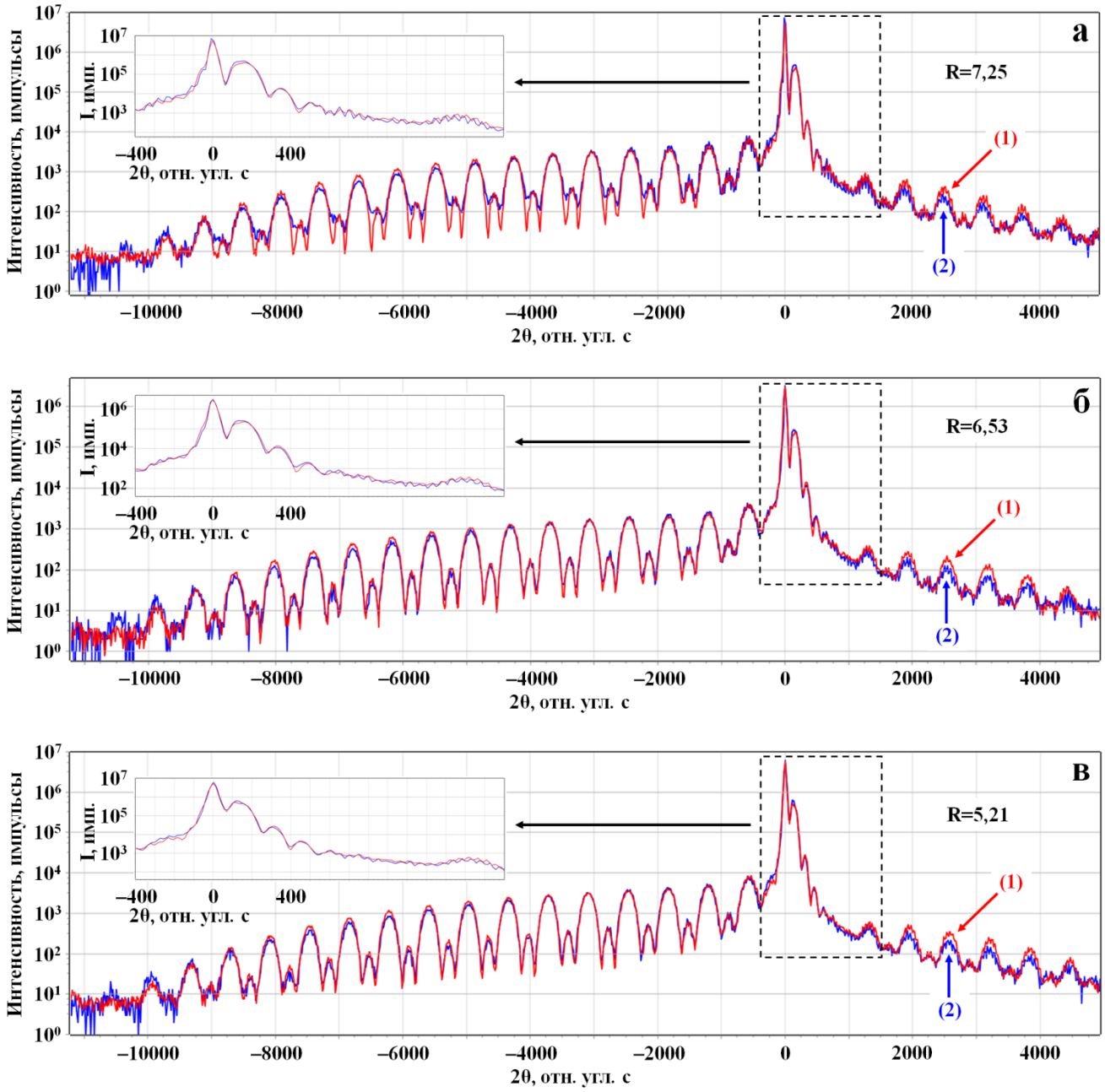


Рисунок А.7 — Параметры квантовых ям InGaAs и барьеров GaAs в образце D (GaAs), определенные в результате моделирования (2θ-ω)-сканов

Примечание — Номер столбца определяет номер модели; рамкой выделена модель, которая считается наиболее приближенной к реальной.



1 — Моделированный (2θ-ω)-скан; 2 — (2θ-ω)-скан, полученный в ходе эксперимента вблизи отражения (004) GaAs в направлении перпендикулярном к направлению отклонения среза подложки.

Рисунок А.8 — Результаты моделирования (2θ-ω)-скана для трех зон, отмеченных на рисунке А.3 (а): (а) 1 зона, (б) 2 зона, (в) 3 зона

Примечание — R — процент ошибки в усл. ед., значение которого характеризует несоответствие смоделированного (2θ-ω)-скана с экспериментальным.

Для более детального анализа результатов использовалась наиболее вероятная третья модель, результаты которой выделены рамкой на рисунках А.6, А.7. В данной модели не наблюдается характерной зависимости доли In от номера зоны (рисунок А.7 (к)). Так как

присутствует увеличение температуры от 1 к 3 зоне на 10 °C, которое связано с не равномерным искривлением подложки во время ее нагрева, то данный факт противоречит прямой зависимости доли встраиваемых атомов In в решетку от температуры роста. Это противоречие указывает на то, что кроме температурных изменений по поверхности присутствуют изменения других технологических параметров не менее влиятельных на эффективность встраивания In, среди которых может быть поток вещества. Он может распределяться неравномерно по поверхности подложки, например, из-за небольшого загрязнения некоторых технологических отверстий, через которые вещество попадает в реактор вертикального типа. В таком случае по результатам рентгеновской дифрактометрии (рисунок А.7 (к)) в первой зоне был повышенный поток вещества относительно других зон, который скомпенсировал эффект от более низких температур по сравнению с другими зонами. Косвенным подтверждением повышенного потока вещества в первой зоне может служить бóльшее значение толщины слоя GaAs в этой зоне (рисунки А.7 (в)).

Стоит отметить, что осцилляции от спектра квантовых ям на (2θ-ω)-сканах от зоны 1 менее резкие, чем от зон 2, 3 (рисунок А.8). Данный факт может быть вызван изменением значения локального изгиба образца или ухудшением структурных свойств. Изгиб учитывался в модели, что указывает на то, что структурные свойства квантовых ям (КЯ) в зоне 1 хуже, чем в зонах 2, 3, что подтверждается значительно меньшей интенсивностью фотолюминесценции от КЯ в зоне 1 (рисунок А.3 (б)). Влияние этого явления на оптические свойства будет обсуждаться в следующем разделе.

А.3 Характеристика квантовых ям

Расчет в программном обеспечении «QWproject» энергетических переходов 1e-1hh, 1e-2hh и 1e-1lh полностью напряженной квантовой ямы InGaAs/GaAs с параметрами характерными для трех зон по поверхности гетероструктуры D (GaAs) дает значения, представленные в таблице А.1 и на рисунке А.9. Из рисунка А.9 видно, что доверительные интервалы длины волны каждого энергетического перехода перекрываются для разных зон поверхности образца, как и параметры квантовых ям, полученные методом рентгеновской дифрактометрии (рисунок А.7 (е), (к)). Поэтому нельзя подтвердить или опровергнуть предположение о том, что ключевую роль в изменении длины волны излучения фотолюминесценции по поверхности образца D (GaAs) на (1,5±0,5) нм играет изменение параметров квантовых ям.

В предыдущем разделе обнаружено, что структурные свойства квантовых ям (КЯ) в зоне 1 хуже, чем в зонах 2, 3. Ухудшение структурных свойств КЯ на прямую связано с релаксацией

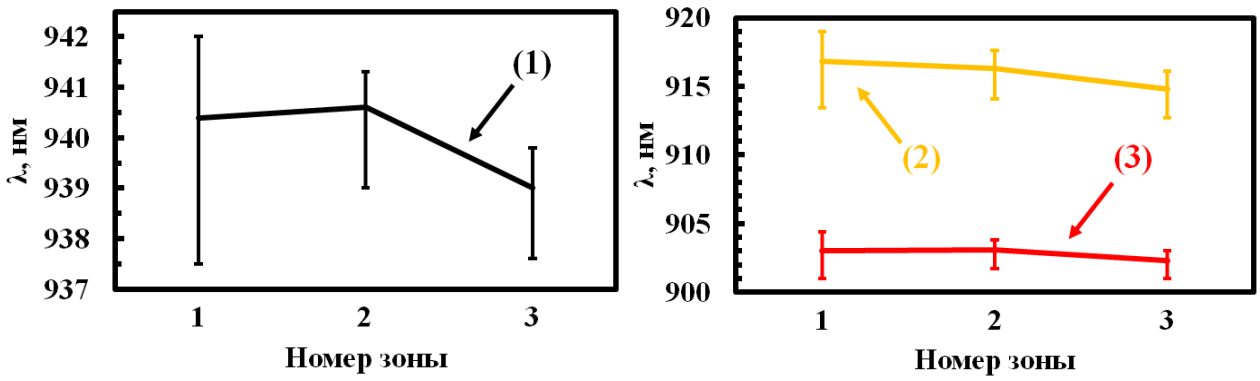
напряженной решетки КЯ. Расчет в ПО «QWproject» демонстрирует, что при полной релаксации КЯ InGaAs/GaAs длина волны энергетических переходов увеличивается, то есть частичная релаксация могла бы привести к увеличению длины волны излучения на спектре фотолюминесценции (ФЛ) от зоны 1 на ≈1 и ≈2 нм по сравнению с зонами 2 и 3 соответственно.

Средние параметры ФЛ пика от энергетического перехода 1e-1hh квантовых ям (КЯ) InGaAs/GaAs и их стандартные отклонения по площади образца с отступом от края 3 мм: λ=(950,7±0,6) нм, FWHM=(13,3±0,3) нм. Наиболее вероятные значения энергетического перехода 1e-1hh, рассчитанные в программном обеспечении «QWproject» с использованием данных, полученных методом рентгеновской дифрактометрии примерно на 11 нм меньше (или 2 мэВ больше), чем средние значения по площади образца в эксперименте по спектроскопии ФЛ. Смещению длины волны энергетического перехода могли способствовать несколько причин:

— неоднородность толщины КЯ [180],

— вариация доли In по толщине КЯ из-за сегрегации In,

— частичная релаксация КЯ.



(а) (б)

Зависимости для разных зон значений длин волн энергетических переходов:

1 — 1e-1hh; 2 — 1e-2hh; 3 — 1e-1lh.

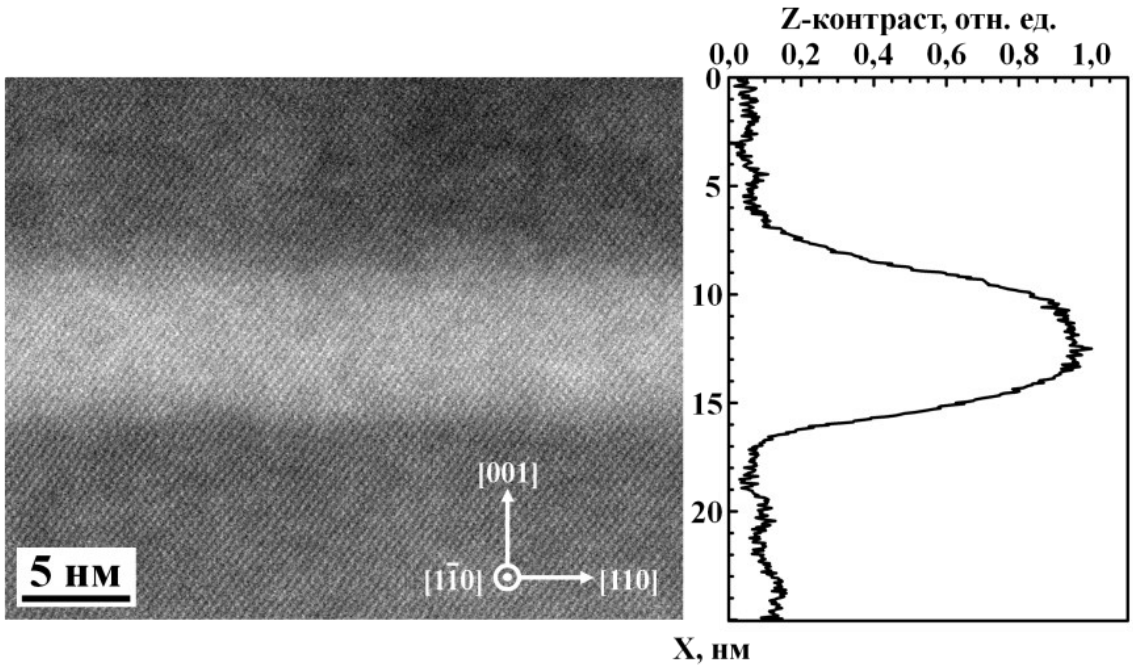
Рисунок А.9 — Рассчитанные в программном обеспечении «QWproject» значения длины волны энергетических переходов для трех характерных зон поверхности гетероструктуры D (GaAs) по параметрам квантовых ям, полученным методом рентгеновской дифрактометрии при использовании наиболее вероятной модели № 3

Для того чтобы понять истинную причину различий теоретических (рассчитанных по параметрам квантовых ям (КЯ), полученных методом рентгеновской дифрактометрии) и экспериментальных (наблюдаемых методом спектроскопии фотолюминесценции) значений, проведены электронно-микроскопические исследования поперечного среза активной области с КЯ. Для образца D (GaAs) была выбрана зона № 3 на поверхности. Типичные изображения

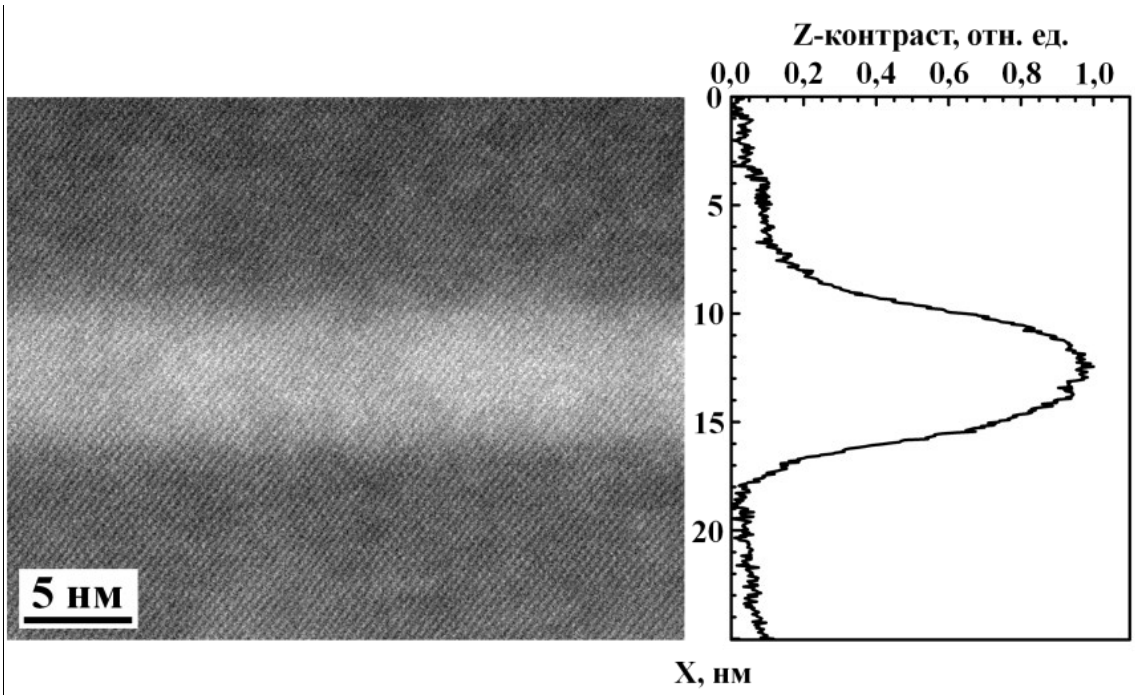
поперечного среза, полученные методом СПЭМ в режиме темного поля (HAADF) для квантовых ям образцов D (GaAs) и E (Ge/Si/КНИ) представлены на рисунке А.10. Более светлая область соответствует слою InGaAs. Стоит отметить, что HAADF СПЭМ-изображения идентичны для каждой из КЯ обоих образцов. Результаты расчетов толщины КЯ и ширины каждой из гетерограниц образцов D и E, выполненных по методике, описанной в приложении Д, представлены в таблицах А.2 и А.3 соответственно.

Таблица А.1 — Рассчитанные в программном обеспечении «QWproject» значения длины волны и энергии энергетических переходов 1h-1hh, 1h-2hh, 1h-1lh для трех характерных зон поверхности гетероструктуры D (GaAs) по параметрам квантовых ям, полученным методом рентгеновской дифрактометрии при использовании наиболее вероятной модели № 3

Зона	1e-1hh				1e-2hh				1e-1lh			
	λ_1, нм		E_1, эВ		λ_2, нм		E_2, эВ		λ_3, нм		E_3, эВ	
	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.
№ 1	940,4	937,5–942,0	1,318	1,316–1,322	916,8	913,4–919,0	1,352	1,349–1,357	903,0	901,0–904,4	1,373	1,371–1,376
№ 2	940,6	939,0–941,3	1,318	1,317–1,320	916,3	914,1–917,6	1,353	1,351–1,356	903,1	901,7–903,8	1,373	1,372–1,375
№ 3	939,0	937,6–939,8	1,320	1,319–1,322	914,8	912,7–916,1	1,355	1,353–1,358	902,3	901,0–903,0	1,374	1,373–1,376



(а)



(б)

Рисунок А.10 — Типичные СПЭМ-изображения поперечного среза в области квантовой ямы (а) образца D (GaAs), (б) образца E (Ge/Si/КНИ), полученные в режиме темного поля (HAADF) (слева), и профиль Z-контраста от соответствующего изображения (справа)

Примечание — Кристаллографические направления, указанные на изображении (а), соответствуют всем изображениям рисунка.

Таблица А.2 — Значения ширины гетерограниц (ГГ) и толщины квантовых ям (КЯ) InGaAs/GaAs образца D (GaAs), рассчитанные по HAADF СПЭМ-изображениям с Z-контрастом

Размеры в нанометрах

Номер КЯ в ростовом направлении	Ширина				Толщина КЯ	
	верхней ГГ GaAs/InGaAs		нижней ГГ InGaAs/GaAs			
	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.
3	2,1	—	1,5	—	6,6	±1,8
2	2,0	—	1,8	—	6,2	±1,9
1	2,4	—	1,6	—	7,1	±2,0
Среднее значение	2,2	±0,2	1,6	±0,2	6,6	±1,1

Таблица А.3 — Значения ширины гетерограниц (ГГ) и толщины квантовых ям (КЯ) InGaAs/GaAs образца E (Ge/Si/КНИ), рассчитанные по HAADF СПЭМ-изображениям с Z-контрастом

Размеры в нанометрах

Номер КЯ в ростовом направлении	Ширина				Толщина КЯ	
	верхней ГГ GaAs/InGaAs		нижней ГГ InGaAs/GaAs			
	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.
3	2,1	—	1,5	—	6,5	±1,9
2	2,1	—	2,0	—	6,1	±2,1
1	2,3	—	1,7	—	6,8	±2,0
Среднее значение	2,2	±0,2	1,7	±0,3	6,5	±1,2

Рисунок А.10 демонстрирует наличие неровных интерфейсов InGaAs/GaAs, что указывает на неоднородность толщины квантовых ям. Согласно данным таблиц А.2 и А.3 наблюдается уширение верхней гетерограницы GaAs/InGaAs относительно нижней InGaAs/GaAs. Данный эффект можно объяснить сегрегацией атомов In.

Исследования методом ВРПЭМ в совокупности с методом анализа геометрической фазы демонстрируют когерентность решеток InGaAs и GaAs в образце D на подложке GaAs, что указывает на то, что частичная релаксация слоев InGaAs отсутствует или незначительна. Косвенным подтверждением данного предположения является отсутствие на СПЭМ-изображениях поперечного среза образца D совокупной длины ≈50 мкм контраста, связанного с прорастающими дислокациями, в том числе и в активной области. Полученные результаты указывают на то, что смещению длины волны энергетического перехода квантовых ям (КЯ) 1e-1hh в образце D (GaAs) способствовали две причины: неоднородность толщины КЯ и вариация доли In по толщине КЯ из-за сегрегации In.

Поскольку в образце E на платформе Ge/Si/КНИ (001) присутствуют прорастающие дислокации, то, учитывая результаты недавних исследований, описанных в статьях [25, 26], на гетеогранице с InGaAs даже в случае их толщины меньше равновесной критической толщины должны образовываться дислокации несоответствия. В свою очередь дислокации несоответствия способствуют частичной релаксации напряженной решетки слоев InGaAs. Полученные результаты вместе с литературными данными указывают на то, что смещению длины волны энергетического перехода в образце E (Ge/Si/КНИ) (рисунок А.1 (а), (б)) способствуют три перечисленные ранее причины: неоднородность толщины квантовых ям (КЯ), вариация доли In по толщине КЯ из-за сегрегации In, частичная релаксация КЯ.

Стоит отметить, что толщины слоев InGaAs в образцах D (GaAs) и E (Ge/Si/КНИ) в пределах погрешности измерений методом ПЭМ имеют одинаковые значения (см. таблицы А.2 и А.3), что свидетельствует об использовании одинаковых параметров роста слоев III-V методом МОС-гидридной эпитаксии.

Приложения Б
(рекомендуемое)
Исследование гетероструктур Ge/Si и GaAs/$A^{III}B^{V}$/Ge/Si, выращенных на подложке «кремний-на-сапфире»

Б.1 Режимы роста и исследований

В данном приложении представлены результаты исследования серии образцов, состоящей из трех подложек КНС (Si/Al_2O_3 (R-срез)), изготовленных методом газофазной эпитаксии, платформы Ge/Si/КНС (R-срез) и гетероструктуры GaAs/III-V/Ge/Si/КНС (R-срез). В используемых подложках КНС (R-срез) толщина приборного слоя Si варьировалась от 290 до 340 нм.

Для создания платформы Ge/Si/КНС (R-срез) слой Ge толщиной ≈550 нм выращен методом HWCVD через буферный слой Si толщиной ≈200 нм на очищенной с помощью стандартного RCA травления подложке КНС (R-срез) с применением стандартных режимов роста (раздел 2.1.1).

Гетероструктура GaAs/III-V/Ge/Si выращена на подложке КНС (Si/Al_2O_3 (R-срез)) в две стадии. До начала роста проводилось стандартное RCA травление и термическая очистка подложки при 900 °C. На первой стадии выращивали слой Si толщиной ≈200 нм методом молекулярно-пучковой эпитаксии при температуре роста 800 °C в течение 20 мин, а затем слой Ge толщиной ≈1,7 мкм — методом HWCVD при температуре роста 350 °C. Остальные параметры роста идентичны тем, которые описаны в методике роста HWCVD (раздел 2.1.1). На второй стадии слои III-V выращены методом МОС-гидридной эпитаксии в системе AIX 200RF при давлении 50 мбар. Перед этим проведен отжиг подложки при температуре 700 °C по термопаре (реальная температура ≈680 °C) в атмосфере водорода с арсином. Рост системы слоев AlAs/GaAs/AlAs с толщинами AlAs — 10 нм, GaAs — 50 нм проведен при температуре 700 °C по термопаре (реальная температура ≈680 °C). После этого выращен нелегированный слой GaAs толщиной ≈1,2 мкм при скорости роста 1 нм/с и при той же температуре.

Для исследования оптических свойств применялся метод спектроскопии фотолюминесценции (ФЛ) при комнатной температуре. В качестве источника возбуждения для получения спектров и карт ФЛ использовался Nd:YAG лазер с длиной волны 532 нм и оптической плотностью мощности 341,7 Вт/см^2. Исследование структурных свойств осуществлялось методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и подсчета «ямок»

травления на АСМ-сканах. Процесс травления для выявления «ямок» от дефектов описан в разделе 2.3.2.2. Методика препарирования поперечного среза образцов для исследований методом ПЭМ адаптирована для препарирования гетероструктур на подложках сапфира. Установленные нами особенности при отработке методики представлены в приложении И.

Б.2 Обработка и обсуждение результатов

На просвечивающем электронном микроскопе получен ряд изображений поперченного среза гетероструктур КНС (R-срез), полученных методом газофазной эпитаксии, а также Ge/Si/КНС (R-срез) и GaAs/III-V/Ge/Si/КНС (R-срез).

Б.2.1 Подложка КНС (R-срез)

На обзорном ПЭМ-изображении поперечного среза КНС (R-срез) (рисунок Б.1) в приборном слое Si с толщиной ≈290 нм и с кристаллографической ориентацией (001) видны темные прямые линии, распространяющиеся строго в двух направлениях. Эти линии имеют угол с гетерограницей Si/Al_2O_3 равный ≈55°, а между собой угол ≈71°. Эти данные указывают на то, что темные линии лежат в плоскостях {111}.

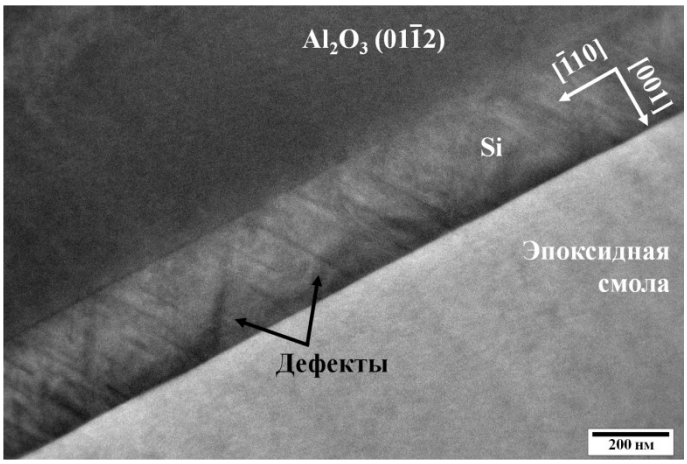
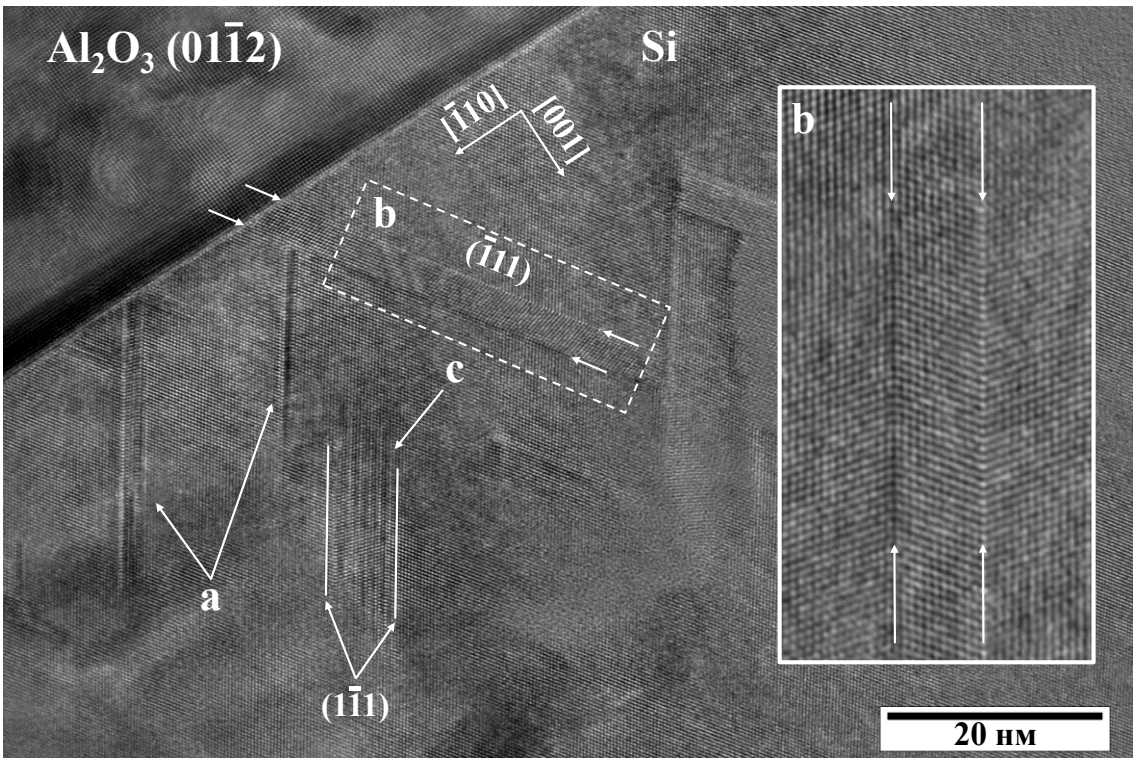


Рисунок Б.1 — Обзорное ПЭМ-изображение поперечного среза (ось зон по терминам кристаллической решетки Si [110]) гетероструктуры КНС (R-срез)

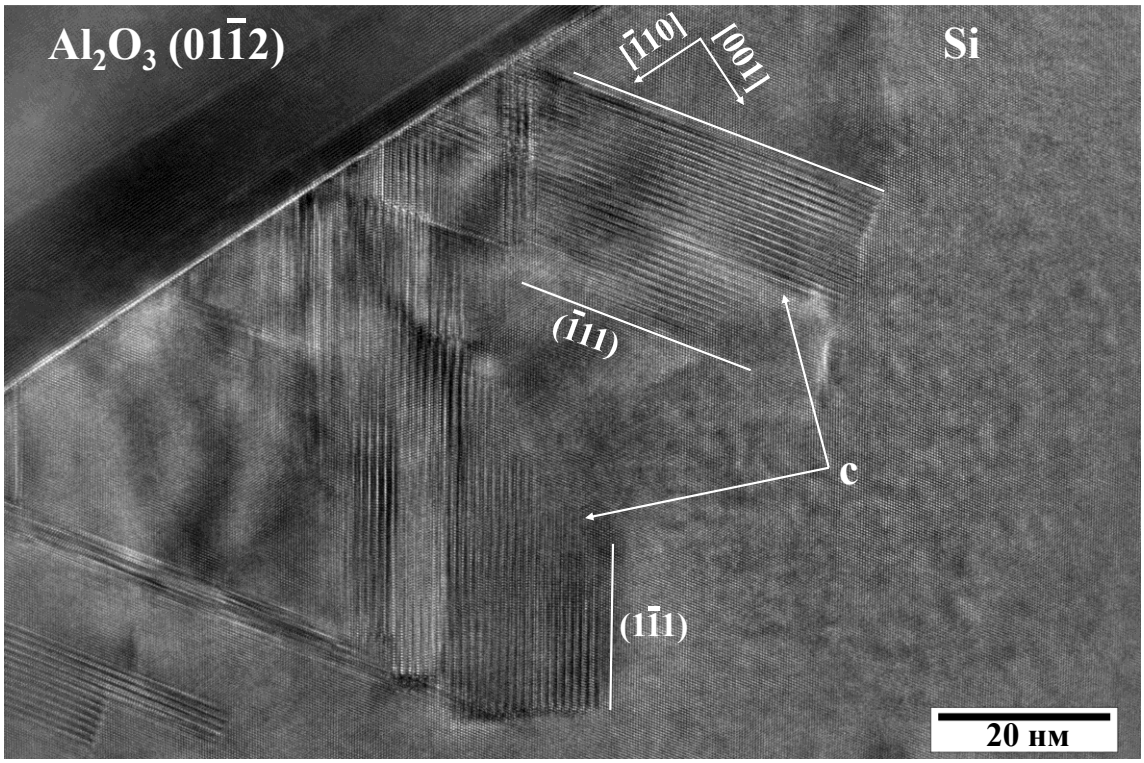
Электронно-микроскопические исследования гетерограницы Si/Al_2O_3 при высоком разрешении позволили обнаружить в слое Si несколько типов дефектов, которые лежат в плоскостях {111}. В наиболее тонких областях ПЭМ-диска присутствуют в основном двумерные дефекты двойникования и упаковки (рисунок Б.2 (а)). В более толстых областях преимущественно наблюдаются дефекты, кристаллическая решетка которых имеет периодическую структуру в направлениях <111> (рисунок Б.2 (б)).

Известно, что плоскости дефектов упаковки и двойникования, как правило, имеют наиболее плотную упаковку атомов. В полупроводниках со структурными типами алмаз (Si, Ge) и сфалерит (GaAs, AlAs) такими плоскостями как раз являются плоскости {111}. Эти данные указывают на то, что темные прямые линии на обзорных ПЭМ-изображениях вероятнее всего являются перечисленными выше дефектами, которые образовались из-за релаксации упругих деформаций псевдоморфного эпитаксиального слоя.

Применение Фурье-преобразования к областям на ПЭМ-изображениях высокого разрешения (ВРПЭМ-изображения), в которых присутствуют дефекты с периодической структурой в направлении $[\bar{1}11]$ (рисунок Б.3 (а)), позволило обнаружить два дополнительных рефлекса между рефлексами, относящимися к кристаллической решетке Si, (000) и $(\bar{1}11)$, которые делят отрезок между ними на три равные части (рисунок Б.3 (б)). Данный факт указывает на то, что период кристаллической решетки дефекта в направлении <111> в три раза больше, чем в решетке Si со структурным типом алмаз. В работе [181] в слое Si гетероструктуры КНС (R-срез) на ПЭМ-изображениях наблюдались аналогичные дефекты. Причем на дифракционной картине от таких областей имеются аналогичные дополнительные рефлексы. Авторы статьи [181] сопоставили изображения высокого разрешения и дифракционной картины с результатами в работе [182], где приведены различные политипы Si на ВРПЭМ-изображениях. Ими сделан вывод, что данные дефекты являются политипом 9R-Si.



(а)



(б)

Рисунок Б.2 — ВРПЭМ-изображения поперечного среза (ось зон по терминам кристаллической решетки Si [110]) гетерограницы Si/Al_2O_3 (R-срез) (а) в тонкой области ПЭМ-диска, (б) в толстой области ПЭМ-диска.

Примечание — Буквами на рисунках отмечены: a — дефекты упаковки, b — область с плоскостями двойникования, c — политип 9R-Si.

Для подтверждения данного заключения нами смоделировано ПЭМ-изображение от решетки политипа 9R-Si с помощью ПО JEMs. Для этого использовались построенная элементарная ячейка политипа 9R-Si (рисунок Б.3 (в)), параметры ПЭМ JEOL 2100F и условия эксперимента. Результаты представлены на рисунке Б.3 (а). Для проверки правильности введенных параметров ПЭМ и условий эксперимента также смоделировано ПЭМ-изображение от распространенного политипа 3C-Si (структурный тип алмаз). Контраст на смоделированном ПЭМ-изображении от 3C-Si точно повторяет контраст на экспериментальном ПЭМ-изображении от 3C-Si (рисунок Б.3 (а)), что указывает на правильность введенных при моделировании параметров ПЭМ и условий эксперимента. Контраст на смоделированном ПЭМ-изображении от 9R-Si достаточно хорошо повторяет контраст на экспериментальном ПЭМ-изображении, особенно вблизи участка, указанного стрелкой (рисунок Б.3 (а)). Отличия контраста в некоторых местах на экспериментальном ПЭМ-изображении от смоделированного можно объяснить процессом перестройки решетки политипа 9R-Si в решетку 3C-Si. Таким образом, кроме дефектов упаковки и двойникования на гетерогранице Si/Al_2O_3 формируется политип 9R-Si. Причем на ВРПЭМ-изображениях нами обнаружены области политипа 9R-Si шириной до 100 нм и распространяющиеся на толщину до 250 нм (рисунок Б.4).

Стоит отметить, что зачастую распространение политипа 9R-Si и двумерных дефектов в слое Si подложки КНС (R-срез) ограничивается именно тем, что на пути встречаются аналогичные дефекты, распространяющиеся в другом направлении <111> (рисунок Б.4). Особенно наглядно это можно наблюдать на рисунке Б.4 (б). Данный эффект называется процессом взаимной аннигиляции.

Взаимная аннигиляция двумерных дефектов и политипа 9R в полупроводниках с кубической решеткой (Si, Ge, GaAs и т.д.) и кристаллографической ориентацией {001} происходит достаточно эффективно. Для таких полупроводников характерны четыре семейства плоскостей {111}, два из которых наблюдаются на ПЭМ-изображениях поперечного среза {110}. Плоскости {111} в случае точно ориентированной подложки имеют один и тот же угол с латеральной плоскостью {001}. Благодаря этому вероятность образования перечисленных дефектов в разных четырех направлениях одинаковая, что способствует эффективной взаимной аннигиляции.

Б.2.2 Платформа Ge/Si/КНС (R-срез)

Ввиду того, что толщина приборного слоя Si в подложке КНС (R-срез), используемой при создании платформы Ge/Si/КНИ составляла ≈340 нм, то основная плотность двумерных дефектов и политипа 9R-Si взаимно аннигилировалась в нем. Тем не менее наблюдались двумерные дефекты прорастающие через весь приборный слой Si (рисунок Б.4), некоторые из которых дорастали до гетерограницы с Ge.

В буферном слое Si толщиной ≈200 нм на подложке КНС наблюдались дефекты упаковки, которые зарождались на гомогранице с Si и прорастали через весь буферный слой Si (рисунок Б.4). Вероятнее всего такие дефекты образовывались на загрязнениях, не удалившихся с поверхности подложки КНС во время ее подготовки. Зарождение дефекта упаковки на загрязнениях хорошо описывается схемой на рисунке Б.5, адаптированной из работы [42].

Дислокации несоответствия, которые образовывались на гетерогранице Ge/Si в данном образце не исследовались, так как эта работа проведена во время детального изучения поперечного среза гетерограницы Ge/Si при высоком разрешении, в которой слой Ge выращен на подложке Si (001) через буферный слой Si тем же методом роста HWCVD. Обработка и обсуждение данных результатов представлены в разделе 3.2. В приложении Б акцент сделан на двумерных дефектах, политипе 9R и прорастающих дислокациях.

На гетерогранице Ge/Si обнаружен политип 9R-Ge, расшифровка которого проведена по аналогии с расшифровкой политипа 9R-Si, описаной ранее. ВРПЭМ-изображение области с политипом 9R-Ge и Фурье-преобразование (ФП) от нее представлены на рисунке Б.4. Причем наблюдались области слоя Ge вблизи гетерограницы Ge/Si, в которых политип 9R-Ge имел ширину 50 нм и распространялся на толщину слоя Ge ≈170 нм.

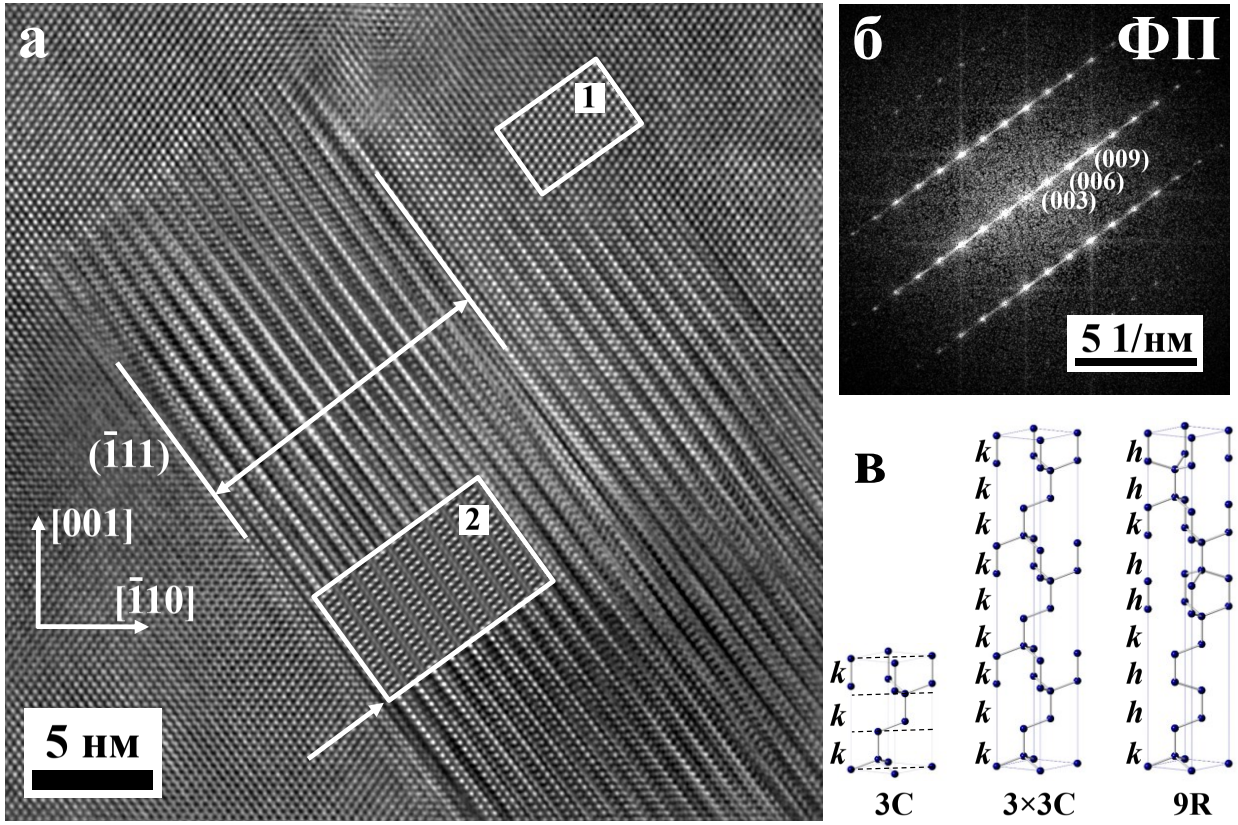


Рисунок Б.3 — (а) ВРПЭМ-изображение поперечного среза (ось зон по терминам кристаллической решетки Si [110]) области слоя Si в гетероструктуре КНС (R-срез) с политипом 9R-Si. (б) Фурье-преобразование (ФП) от ВРПЭМ-изображения (а) с указанием рефлексов политипа 9R-Si. (в) Фрагменты атомной структуры для политипов Si: 3C и 9R

Примечания

1 На вставках изображения (а) смоделированные ПЭМ-изображения: (1) от политипа 3C-Si, (2) от политипа 9R-Si. Стрелкой отмечена область с наибольшим сходством модели 9R-Si с экспериментом.

2 Рефлекс (009) политипа 9R-Si соответствует рефлексу ($\bar{1}11$) политипа 3C-Si.

3 Названия политипов 3C и 9R из терминологии Рамсделла; из терминологии Ягодзинского политип 3C имеет упаковку $(k)_3$, политип 9R — $(khh)_3$.

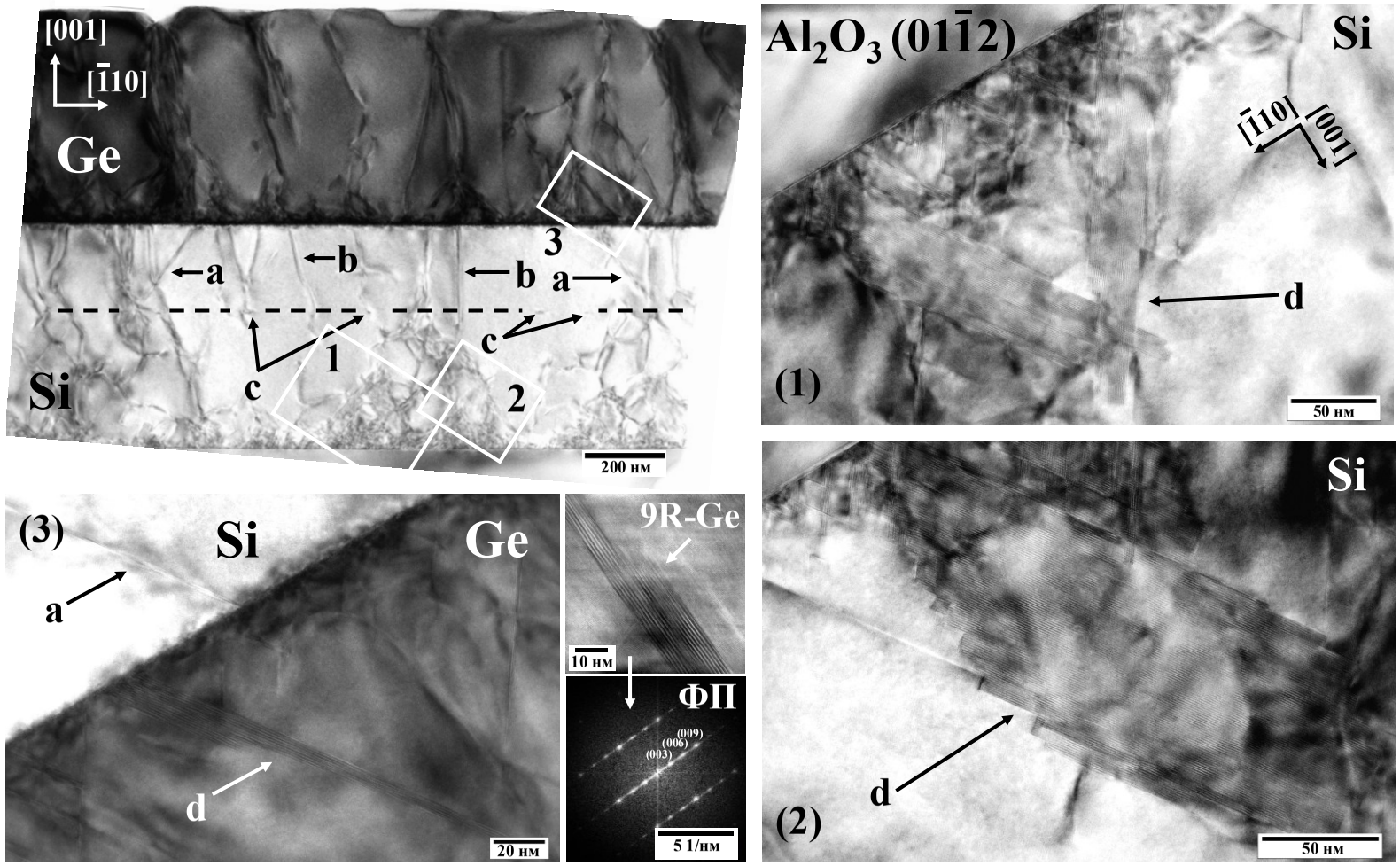


Рисунок Б.4 — (ВР)ПЭМ-изображения поперечного среза (ось зон [110] по терминам кристаллической решетки Si) гетероструктуры Ge/Si/КНС (R-срез)

Примечания

1 Прямоугольной рамкой на обзорном ПЭМ-изображении выделены области, соответствующие (1) — изображению (1), (2) — изображению (2), (3) — (3).

2 Буквами отмечены: (a) дефекты упаковки, (b) прорастающие дислокации, (c) загрязнения (темные пятна, характерные для гомограницы буферного слоя Si и приборного слоя Si подложки КНС), (d) политип 9R.

3 Пунктирной линией указана гомограница между буферным слоем Si и приборным слоем Si подложки КНС; ФП — Фурье-преобразование.

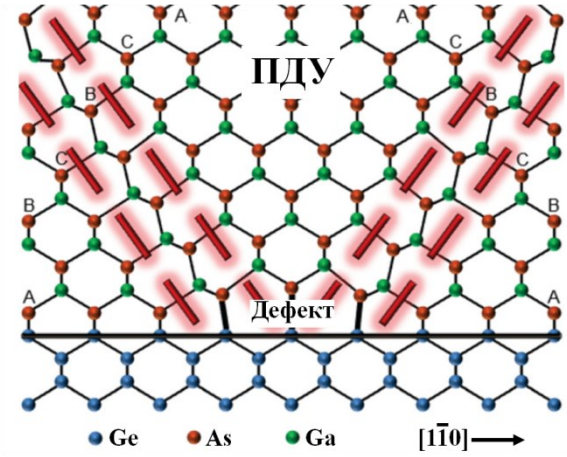


Рисунок Б.5 — Схематическое изображение кристаллической решетки, показывающее дефекты упаковки, возникающие из-за дефекта или загрязнения на поверхности Ge (рисунок адаптирован из работы [42])

Примечание — Пунктирные линии обозначают укладку плоскостей {111} типа CBCB дефекта упаковки; ПДУ — пирамидальный дефект упаковки.

Мы не наблюдали распространения двумерных дефектов и политипа 9R через весь слой Ge. Тот факт, что двумерные дефекты и политип 9R, распространяющиеся на толщину более 170 нм в слое Ge не были обнаружены на ПЭМ, не исключает их наличие, но указывает на то, что линейная плотность их меньше определенного значения. В данном разделе минимальное значение линейной плотности, которое можно было зафиксировать составляло 0,1 мкм$^{-1}$.

Примечательно, что в слоях Si и Ge прорастающие дислокации на ПЭМ-изображениях обнаруживаются преимущественно над местами аннигиляции политипов 9R, дефектов упаковки или дефектов двойникования (рисунок Б.4). Такие прорастающие дислокации распространяются преимущественно вертикально до поверхности слоя Si или Ge. В результате в слое Ge толщиной ≈550 нм, выращенном методом HWCVD, прорастающие дислокации, достигшие поверхности, имеют высокую линейную плотность ≈7 мкм$^{-1}$ (рисунок Б.4), и впоследствии прорастают в слои III-V (см. далее). Не исключено, что дислокации, распространяющиеся строго вертикально в данных образцах являются чисто винтовыми дислокациями, у которых линия дислокации совпадает с вектором Бюргерса a[001] [66]. Однако это предположение не проверялось с помощью двухпучкового режима или темного поля с использованием отражений **g**=(004) и **g**=(220). При использовании **g**=(004) условие (**g**·**b**)=0 не выполняется и винтовая дислокация несоответствия (ДН) с **b**=a[001] видна, а при **g**=(220) условие (**g**·**b**)=0 выполняется и данная ДН становится незаметной [66, 152].

Кроме этого, на рисунке Б.4 можно наблюдать, что поверхность слоя Ge в тех местах, куда прорастают комплексы дислокаций, имеет характерные ямы. Одним из способов уменьшения

шероховатости может служить увеличение толщины слоя Ge [115], что успешно использовано в следующих процессах роста на подложке КНС (R-срез).

Б.2.3 Гетероструктура GaAs/$A^{III}B^{V}$ на платформе Ge/Si/КНС (R-срез)

На рисунке Б.6 представлено обзорное ПЭМ-изображение поперечного среза гетероструктуры III-V/Ge/Si/КНС. Благодаря увеличению толщины буферного слоя Ge удалось уменьшить линейную плотность прорастающих до гетерограницы AlAs/Ge дислокаций до значений ≈3 мкм$^{-1}$. Кроме этого на рисунке Б.6 можно увидеть, что гетерограница AlAs/Ge получилась ровная относительно поверхности слоя Ge в образце, ПЭМ-изображение поперечного среза которого представлено на рисунке Б.4. Линейная плотность прорастающих дислокаций, которые проросли до поверхности гетероструктуры III-V/Ge/Si/КНС, уменьшилась незначительно, и составляет ≈2 мкм$^{-1}$.

Детальное исследование слоев AlAs/GaAs/AlAs позволило обнаружить области, в которых прорастающие дислокации запирались между слоями AlAs (рисунок Б.7 (а)). Подобное явление наблюдалось нами и в гетероструктурах на подложке Si (001) [A7]. Однако незначительное уменьшение линейной плотности прорастающих до поверхности дислокаций (линейная ППД) в 1,5 раза, то есть с ≈3 мкм$^{-1}$ до ≈2 мкм$^{-1}$, учитывая большое начальное значение линейной ППД ≈3 мкм$^{-1}$, указывает на то, что дислокационные фильтры эффективнее в уменьшении плотности прорастающих дислокаций (см. таблицу 11, образец А).

В слоях III-V кроме прорастающих дислокаций обнаружены дефекты упаковки, двойникования, политип 9R, а также АФГ (рисунок Б.8). Нами не обнаружено двумерных дефектов или политипа 9R, которые бы прорастали через всю гетероструктуру III-V/Ge/Si/КНС, начиная с гетерограницы Si/КНС или Ge/Si. Все двумерные дефекты и политип 9R в слоях III-V, которые мы наблюдали, начинались либо вблизи гетерограницы III-V/Ge, либо в слоях III-V (рисунок Б.6). Причем обнаружены дефекты 9R, прорастающие через все слои III-V (рисунок Б.6), по сравнению с ситуацией со слоем Ge, описанной ранее. Распространение двумерных дефектов и политипа 9R через все слои III-V общей толщиной ≈1,3 мкм можно объяснить тем, что их плотность достаточно низкая, чтобы они успели встретиться за рост слоев III-V и в результате взаимно аннигилировать. Наглядный пример этому рисунок Б.6: два политипа 9R, распространяясь навстречу друг к другу, не успели провзаимодействовать и доросли до поверхности гетероструктуры GaAs/III-V/Ge/Si/КНС (R-срез).

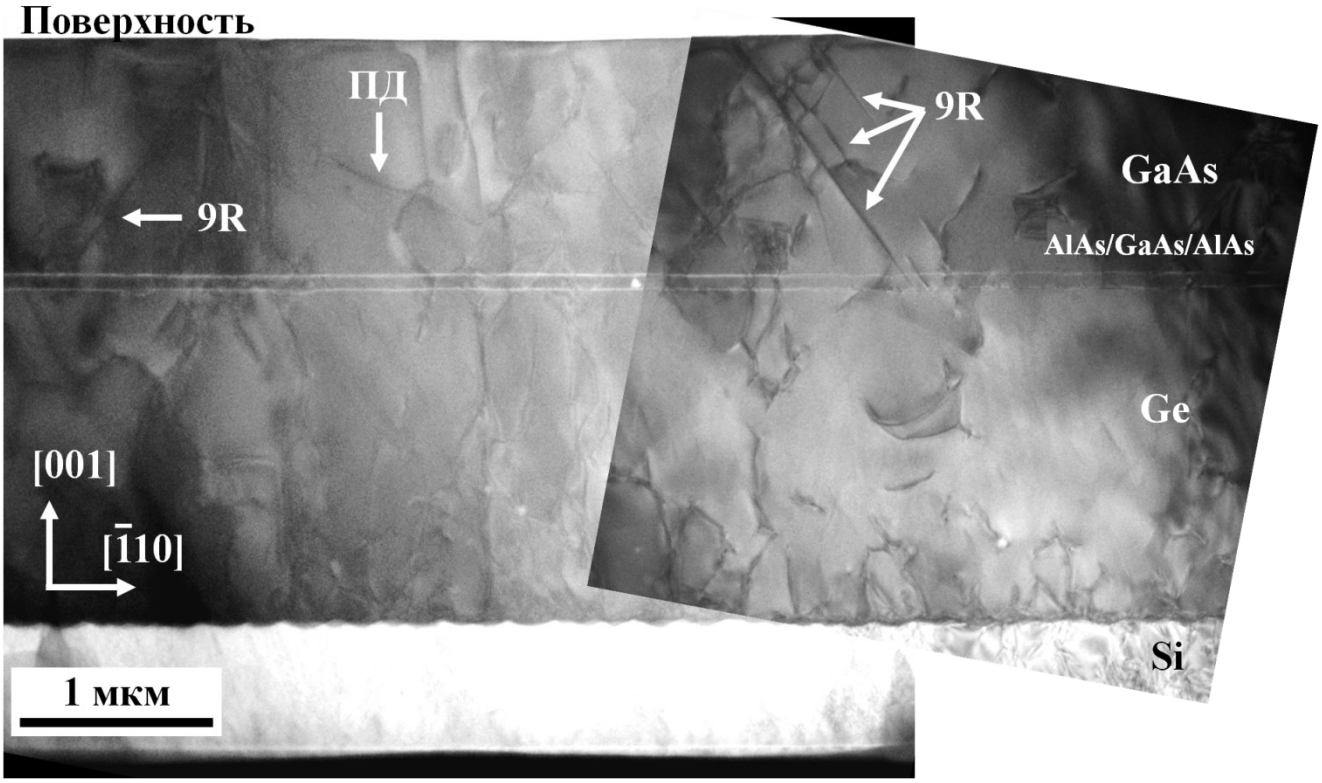
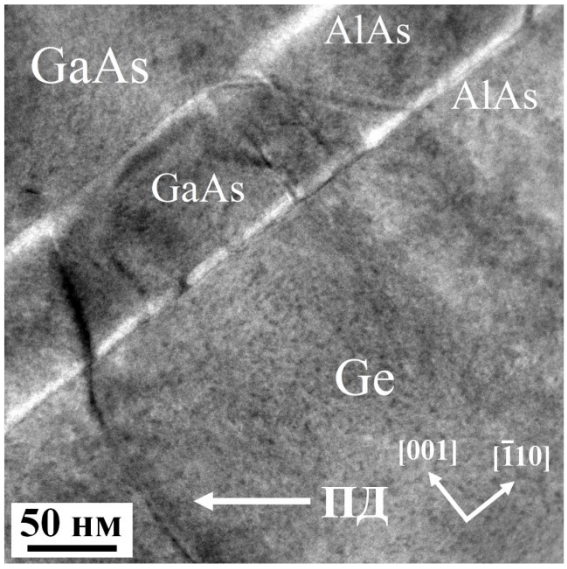
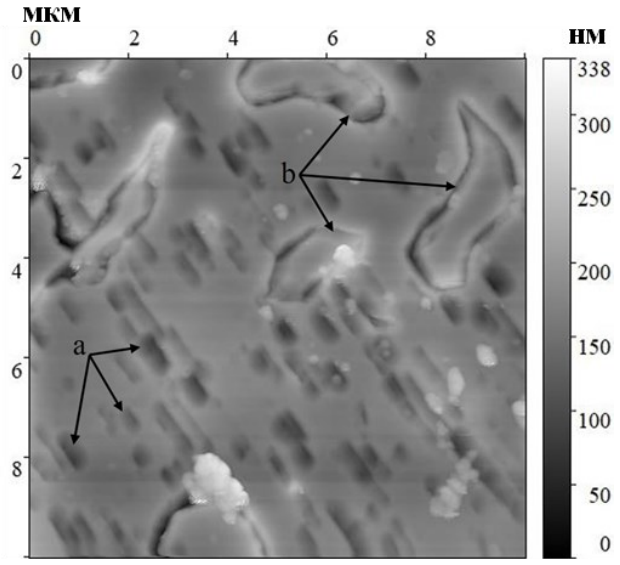


Рисунок Б.6 — ПЭМ-изображения поперечного среза (ось зон по терминам кристаллической решетки Si [110]) гетероструктуры III-V/Ge/Si/КНС (R-срез)

Примечание — ПД — прорастающая дислокация, 9R — политип 9R.



(а)



(б)

Рисунок Б.7 — (а) ПЭМ-изображение (ось зон [110]) поперечного среза гетероструктуры GaAs/AlAs/GaAs/AlAs/Ge, выращенной через буферный слой Si на подложке КНС (R-срез); (б) АСМ-изображение поверхности слоя GaAs после проведения селективного травления

Примечание — ПД — прорастающая дислокация; на изображении (б) буквами отмечено: a — «ямки» травления от дефектов, b — антифазные границы.

Значение плотности «ямок» травления от дислокаций (EPD) на АСМ-сканах размером 10 на 10 мкм равно $9 \cdot 10^7$ см$^{-2}$ (рисунок Б.7 (б)). Если перевести линейную плотность прорастающих дислокаций в плотность дислокаций на поверхности возведением значения в квадрат, то получим $4 \cdot 10^8$ см$^{-2}$. Это значение одного порядка со значением EPD. Значение EPD получилось меньше, так как «ямки» от нескольких дислокаций могли слиться в одну и быть не учтены в подсчетах. Стоит отметить, что травитель еще больше проявил антифазные границы (АФГ) — замкнутые фигуры неправильной формы. Наличие АФГ объясняется ростом бинарного полупроводника с полярной связью на не отклоненной поверхности неполярного кристалла с ориентацией типа (001). В данном образце неполярными кристаллами являются кремний и германий. На R-срезе сапфира (Al_2O_3 $(01\bar{1}2)$) они имеют ориентацию (001).

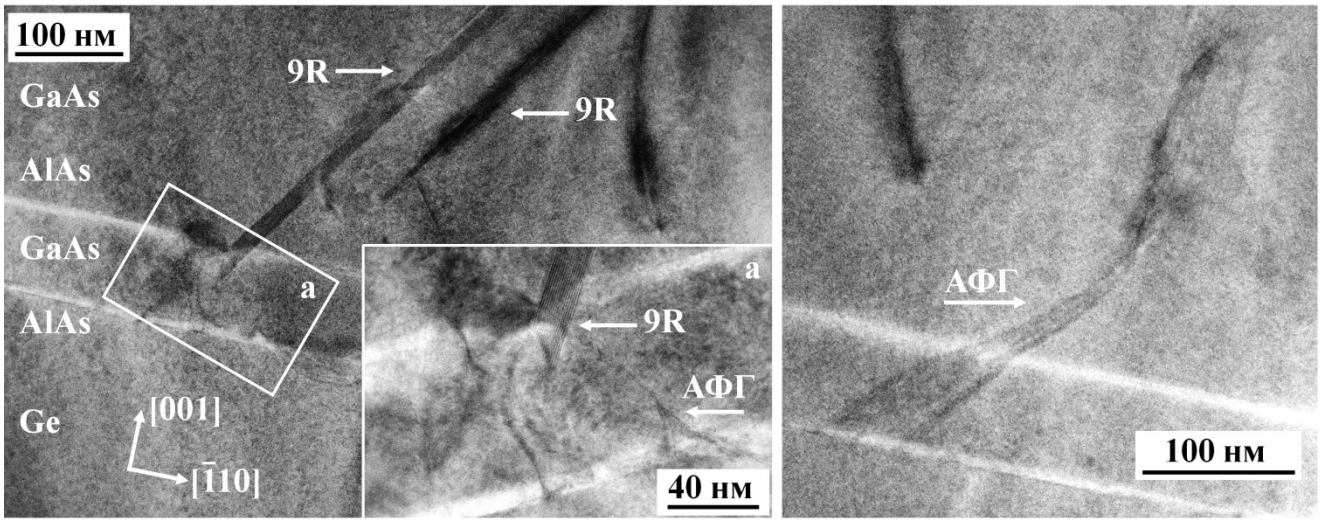


Рисунок Б.8 — ПЭМ-изображения поперечного среза (ось зон [110]) системы слоев GaAs/AlAs/GaAs/AlAs/Ge, выращенной через буферный слой Si на подложке КНС (R-срез)

Примечание — На вставке (а) увеличенное изображение области с началом образования политипа 9R; АФГ — антифазная граница.

Что касается рельефа поверхности, то на обзорном изображении с линейным масштабом 4,4 мкм (рисунок Б.6) видно, что он имеет волнистую форму. Данный факт указывает на неоднородность толщины слоя GaAs. Детальное исследование рельефа поверхности при высоком разрешении демонстрирует темную полосу на поверхности толщиной около 5 нм, которая может свидетельствовать о разбросе высот на поверхности до 5 нм на линейном масштабе 22,8 нм (рисунок Б.9).

Дифракционная картина от верхнего слоя GaAs демонстрирует характерные для GaAs со структурным типом сфалерит рефлексы (рисунок Б.10 (а)), что указывает на то, что верхний слой GaAs имеет монокристаллическую структуру. Косвенным подтверждением наличия

монокристаллической структуры является ярко выраженный относительно узкий пик от GaAs на спектре фотолюминесценции (ФЛ) при комнатной температуре (рисунок Б.10 (б)). Карты ФЛ демонстрируют однородность выращенного верхнего слоя GaAs по площади подложки 1000 мм^2: среднее значение максимумов длин волн составляет (862,3±0,7) нм, а ширины пика на полувысоте — (26,7±1,1) нм.

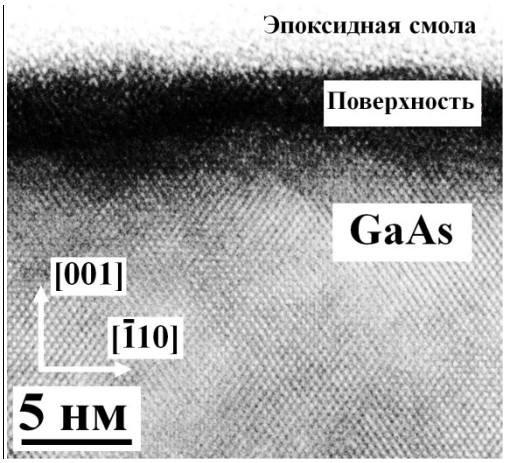
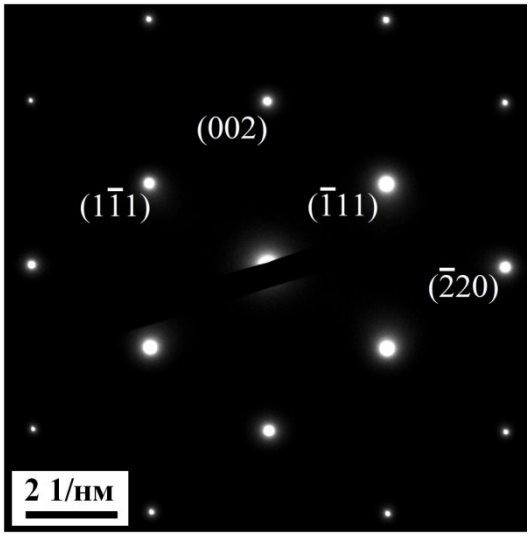
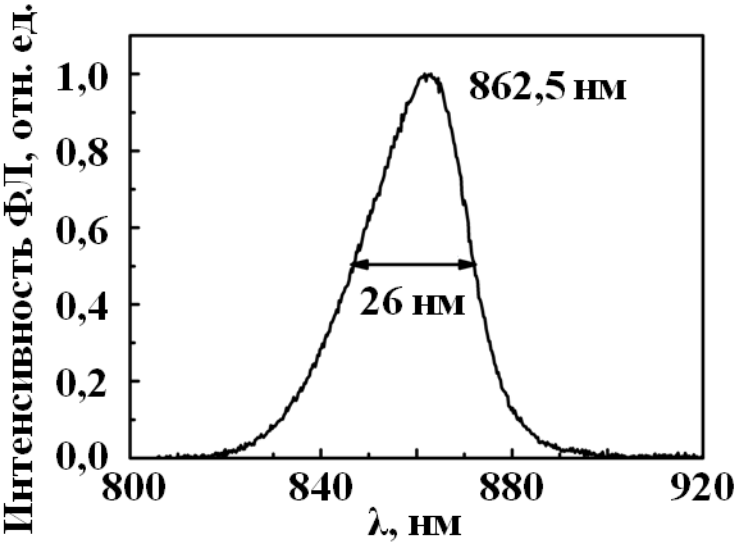


Рисунок Б.9 — ВРПЭМ-изображение (ось зон [110]) поперечного среза поверхности слоя GaAs, выращенного на платформе Ge/Si/Al_2O_3 (R-срез) через буферные слои AlAs/GaAs/AlAs





(а) (б)

Рисунок Б.10 — (а) Дифракционная картина (ось зон — [110]) от верхнего слоя GaAs гетероструктуры III-V/Ge/Si/Al_2O_3 (R-срез); (б) типичный спектр фотолюминесценции (ФЛ) такой гетероструктуры, полученный при комнатной температуре

Примечание — Интенсивность ФЛ нормирована на максимальное значение.

Приложение В
(рекомендуемое)
Релаксация решетки слоя Ge в созданной платформе Ge/Si/КНИ (001)

Для подтверждения предположения о полной релаксации слоя Ge в созданной нами платформе Ge/Si/КНИ (001) проведено исследование поперечного среза образца В методом ПЭМ с высоким разрешением (ВРПЭМ) при использовании разных параметров линзовой системы ПЭМ (разные увеличения) совместно с инструментом для измерения деформаций — методом анализа геометрической фазы (МГФ) [150, 151].

Каждый пиксель на ВРПЭМ-изображении несет информацию о локальной деформации и ориентации кристаллической решетки. При обработке ВРПЭМ-изображений с помощью МГФ важно понимать физический смысл понятия локальность и точность данных. Точность определяется стандартным отклонением значений деформаций в однородной области решетки, что является шумом, а пространственное разрешение — масштабом флуктуаций. Пространственное разрешение находится в обратной зависимости от размера маски, используемой в МГФ, а также точности [151]. Поэтому необходимо найти золотую середину между точностью и пространственным разрешением для каждого изображения или серии изображений с реперной областью при использовании МГФ.

Для анализа выбраны области на поперечном срезе, которые расположены в середине приборного слоя Si в КНИ и в середине слоя Ge. В качестве реперной области выбрана область Si, так как в разделе 3.3.2.2 доказано, что в приборном слое Si отсутствуют деформации решетки относительно решетки подложки Si в КНИ. Предполагается, что выбранные области решеток Ge и Si являются однородными, так как расположены достаточно далеко от гетерограниц, следовательно, отклонения значений деформаций являются шумом.

Результаты с указанием стандартного отклонения значений деформаций и пространственного разрешения представлены на рисунке В.1. За погрешность МГФ принято стандартное отклонение значений деформаций, которое вычислялось от усредненного профиля вдоль направления [001] без учета краевых областей карты деформаций. Использование разных параметров линзовой системы ПЭМ позволило уменьшить погрешность измерения. Деформации решетки Ge в глубине слоя относительно решетки Si в глубине приборного слоя Si составляют: ε_{xx}=(4,2±0,4) %, ε_{zz}=(3,9±0,5) %. Большее среднее значение ε_{xx} объясняется наличием термоупругих деформаций, которые растягивают решетку Ge в латеральном направлении и сжимают в ростовом. Средние значения деформаций отличаются от средних значений,

полученных методом рентгеновской дифрактометрии с учетом наличия в решетке Ge 1,5 ат. % атомов Si (см. раздел 3.3.2.4), на 0,06 %, что с высокой точностью говорит о полной релаксации слоя Ge в созданной платформе Ge/Si/КНИ (001).

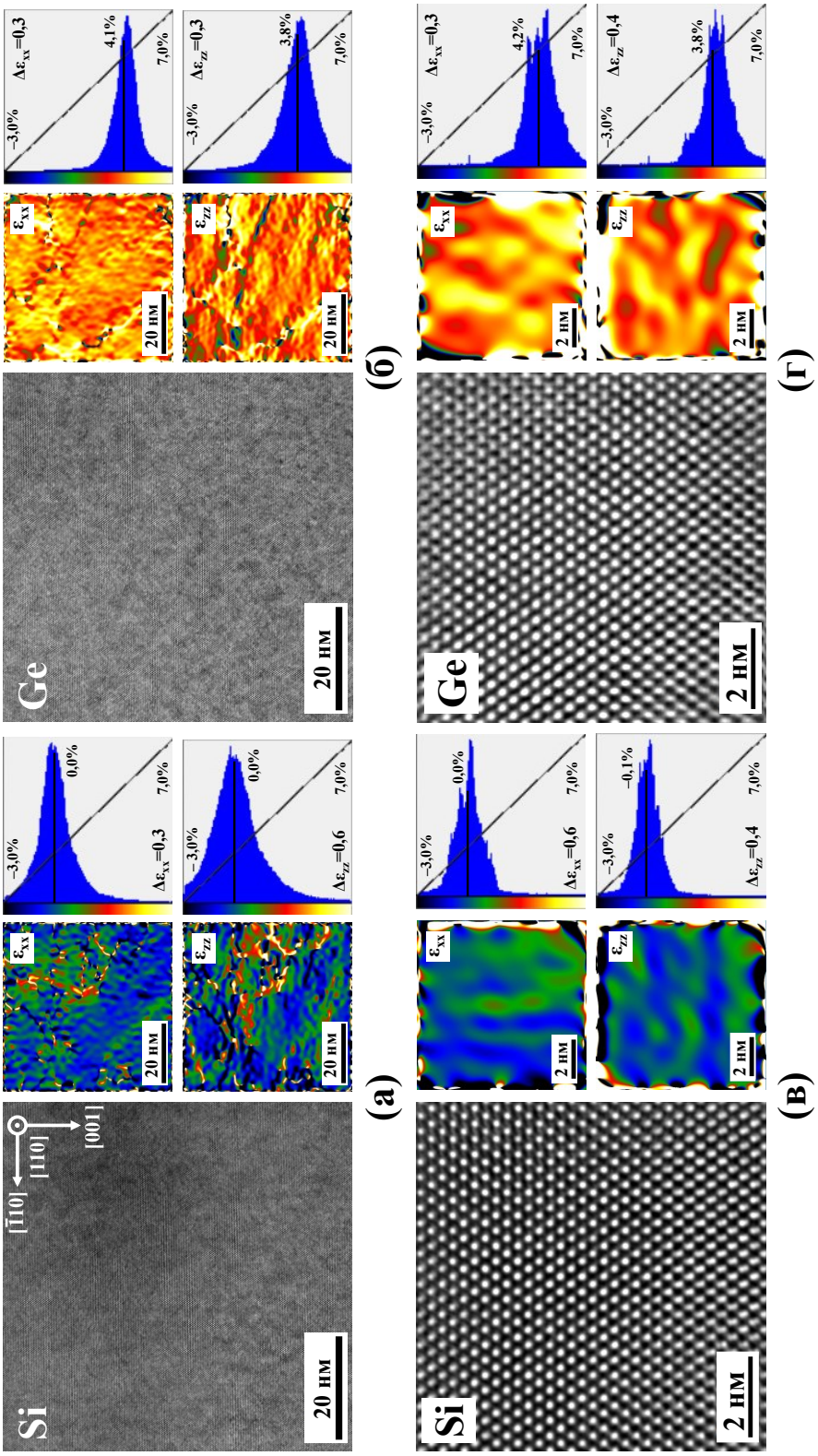


Рисунок В.1 — ВРПЭМ-изображения поперечного среза (слева) и соответствующие им карты деформаций в латеральном направлении (ε_{xx}) и в ростовом направлении (ε_{zz}) с гистограммами (справа) от области (а), (в) в середине приборного слоя Si, (б), (г) в середине слоя Ge образца В на платформе Ge/Si/КНИ

Примечания

1 Значения $\Delta\varepsilon_{xx}$ и $\Delta\varepsilon_{zz}$ являются стандартными отклонениями значений ε_{xx} и ε_{zz} соответственно по всему ВРПЭМ-изображению за исключением областей с краевыми эффектами при пространственном разрешении 3 нм для изображений (а), (б) и 1,5 нм для (в), (г).

2 Области с решеткой Si являются реперными: (а) для (б), (в) для (г); ВРПЭМ-изображения (а), (б) отличаются меньшим увеличением от изобаржений (в), (г).

3 Кристаллографические направления, указанные на изображении (а), соответствуют и другим изображениям.

Приложение Г
(рекомендуемое)
Определение параметров сверхрешетки методом рентгеновской дифрактометрии

Для определения состава чередующихся слоев, например дислокационных фильтров (ДФ) или квантовых ям (КЯ), использовался метод рентгеновской дифрактометрии. Отработка методики осуществлялась на образце С (GaAs) с дислокационными фильтрами InAlAs/GaAs. В терминах рентгеновской дифрактометрии набор чередующихся слоев принято называть сверхрешетками (СР). Поэтому в этом разделе термин ДФ будет заменен на СР. Предполагается, что для образцов А и В значение состава слоев InAlAs будет схожим с образцом С, так как III-V слои выращены в образцах А, В и С в едином ростовом процессе. Возможно небольшое отличие в температурах роста на платформах Ge/Si, Ge/Si/КНИ и подложке GaAs могло незначительно повлиять на эффективность встраивания атомов In и Al в твердой фазе, а также на скорость роста III-V. Образец С для этой цели выбран в связи с тем, что в данном образце используется подложка GaAs, а не платформы Ge/Si и Ge/Si/КНИ, как в образцах А и В соответственно. Это значит, что на (2θ-ω)-скане вблизи любых отражений GaAs пик от GaAs будет иметь меньшее значение полной ширины на полувысоте (FWHM) и будет отсутствовать пик от Ge, который близко расположен к пику GaAs из-за незначительного рассогласования параметров решеток — 0,07 %, в отличие от образцов А и В. Кроме этого прорастающие дефекты, возникающие на гетерограницах Ge/Si и AlGaAs/Ge в образцах А и В будут усложнять анализ параметров сверхрешеток. Все это приведет к тому, что сателлиты и осцилляции от сверхрешеток будут более выражены на (2θ-ω)-скане образца С, чем А и В. Кроме этого в соответствии заданию на рост значения толщины и состава слоев InAlAs не превышают критических значений, что предполагает отсутствие релаксации напряженных слоев InAlAs. Это в свою очередь значительно упрощает оценку параметров сверхрешеток и делает ее более точной.

Для повышения точности определения толщин слоев СР на (2θ-ω)-сканах требуется зафиксировать как можно больше периодов огибающей сателлитных пиков. Для этого необходимо выбрать отражение (002) или (004). При выборе рекомендуется смоделировать кривые при разных отражениях конкретно для используемого оборудования и обратить внимание на следующие моменты. Основным фактором при выборе является интенсивность сателлитов и осцилляций от СР. Она должна быть достаточной, чтобы разглядеть как минимум

один период огибающей сателлитов при разумном времени качания. При этом желательно, чтобы контраст между сателлитами от сверхрешетки и пиком от подложки был слабым.

При выборе отражения вместо моделирования можно оценить структурные факторы материалов подложки и сверхрешетки (СР). Необходимо выбирать отражение, при котором структурный фактор материалов СР во много раз больше, чем структурный фактор материала подложки. При этом стоит учитывать тот факт, что интенсивность отражения зависит от структурного фактора: чем больше значение структурного фактора, тем более интенсивное будет отражение. Поэтому не стоит выбирать отражение, при котором структурный фактор материалов сверхрешетки имеет низкое значение, даже если он в несколько раз больше структурного фактора материала подложки. Структурный фактор равен квадрату структурной амплитуды, которая рассчитывается по формуле (Г.1).

$$F_{hkl}=\sum_{j=1}^{N_{at}} f_{atj}\cdot\exp(2\pi i\cdot(h\cdot x_j+k\cdot y_j+l\cdot z_j)), \qquad (Г.1)$$

где h, k, l — индексы отражения;

N_{at} — число базисных атомов;

j — порядковый номер атома;

f_{atj} — атомный рассеивающий фактор j-го атома;

i — мнимая единица;

x_j, y_j, z_j — координаты j-го базисного атома в элементарной ячейке в долях от размера соответствующих векторов решетки **a**, **b**, **c**.

Для материалов со структурой цинковой обманки выражения для структурных амплитуд отражений (002) и (004) соответствуют формулам (Г.2) и (Г.3).

$$F_{002}=4\cdot f_{atIII}-4\cdot f_{atV}, \qquad (Г.2)$$

$$F_{004}=4\cdot f_{atIII}+4\cdot f_{atV}, \qquad (Г.3)$$

где f_{atIII} и f_{atV} — атомные рассеивающие факторы для элементов III и V групп таблицы Менделеева соответственно.

Для оценки отношения структурных факторов материалов СР и подложки рассмотрим частный случай, при котором угол падения рентгеновского излучения равен 0. В таком случае атомные рассеивающие факторы равны порядковому номеру атома в таблице Менделеева. Результаты расчетов структурных факторов для различных элементарных ячеек для отражений (002) и (004) при угле падения рентгеновского излучения равном 0 представлены в таблице Г.1.

Таблица Г.1 — Структурные факторы для элементарных ячеек GaAs, AlAs и InAs для отражений (002) и (004) при угле падения рентгеновского излучения равном 0

Материал	F_{002}^2	F_{004}^2
GaAs	64	65536
AlAs	6400	33856
InAs	4096	107584

Из таблицы Г.1 видно, что наиболее предпочтительным для нашей задачи является отражение (002). Этот факт наглядно подтверждается в эксперименте (рисунок Г.1). Сравнивая рисунок Г.1 (а) и рисунок Г.1 (б) можно заметить, что сателлиты и осцилляции от сверхрешетки наиболее выражены при бóльших углах относительно положения пика от подложки GaAs вблизи отражения (002), чем (004). Однако для случая сверхрешетки InGaAs/GaAs на подложке GaAs, в которой доля атомов In в несколько раз меньше доли GaAs предпочтительнее использовать отражение (004), так как из таблицы Г.1 видно, что для материалов СР структурные факторы для отражения (002) имеют низкие значения.

Известно, что для точного определения параметров сверхрешетки методом рентгеновской дифрактометрии необходимо учитывать угол между нормалью к поверхности образца, которая в обратном пространстве совпадает с линиями сателлитного спектра искусственной СР, нанесенной послойным эпитаксиальным наращиванием на подложку, и направлением вектора обратной решетки кристалла, вдоль которого происходит (2θ-ω)-сканирование [183, 184]. Этот угол является углом отклонения плоскости среза от кристаллографической плоскости подложки (γ^*) и далее может сокращенно называться углом разориентации подложки.

В работах [183–185] показано, что расчет периода сверхрешетки (D_t) по формуле (Г.4) по данным из (2θ-ω)-сканов вблизи симметричного отражения вдоль разных направлений (разных углах поворота образца в своей плоскости), не учитывая угол γ^*, дает разные значения.

$$D_t = (\lambda\cdot(n_1 - n_2))/(2\cdot\delta\theta\cdot\cos\theta), \qquad (Г.4)$$

где λ — длина волны рентгеновского излучения, нм;

n_1 и n_2 — порядки отражений сателлитов;

δθ — параметр, который определяется по формуле (Г.5), рад;

θ — параметр, который определяется по формуле (Г.6), градус.

$$\delta\theta=\theta_1-\theta_2, \qquad (Г.5)$$

$$\theta=(\theta_1+\theta_2)/2, \qquad (Г.6)$$

где θ_1 и θ_2 — угловые положения максимумов сателлитных пиков, соответствующих порядкам отражений n_1 и n_2, в рад для формулы (Г.5) и в градусах для формулы (Г.6).

Чтобы компенсировать эффект, связанный с углом γ^*, в работах [183, 185] была предложена формула (Г.7), в которой для расчета $\delta\theta$ и θ необходимо использовать угловые положения максимумов двух последовательных сателлитных пиков.

$$D_t=\lambda\cdot\sin(\theta+\gamma^*\cdot\cos\varphi^*)/(\delta\theta\cdot\sin2\theta), \qquad (Г.7)$$

где φ^* — угол поворота образца в своей плоскости, отсчитываемый от направления отклонения среза в градусах.

Из формулы (Г.7) можно заметить, что максимальное и минимальное значения D_t будут соответствовать углам $\varphi^*=0°$ и 180° соответственно, а значение D_t, полученное при $\varphi^*=\pm90°$, будет являться средним арифметическим для них и соответственно наиболее вероятным значением периода сверхрешетки [183].

Для демонстрации этого эффекта были сняты четыре (2θ-ω)-скана вблизи отражения (002) GaAs вдоль, против направления отклонения среза подложки и в двух перпендикулярных к нему направлениях (рисунок Г.2) и для каждого скана рассчитаны значения D_t с помощью формул (Г.4) и (Г.7), используя одну и ту же пару сателлитов. Одна и та же пара сателлитов использовалась, чтобы сравнение D_t для разных сканов было максимально точным, так как известно, что расстояние между соседними пиками, расположенными ближе к пику подложки, больше, чем между дальними. Это происходит из-за того, что в результате наложения на «хвост» сильного пика подложки ближние сателлиты заметно сдвигаются в сторону этого пика [184]. Сдвиг сателлитов от сверхрешетки к пику подложки наиболее выражен на (2θ-ω)-скане, снятом вблизи отражения (004) (рисунок Г.1 (б)), так как для этого отражения по сравнению с отражением (002) пик от подложки имеет большую интенсивность и соответственно более широкий «хвост». Значения $\delta\theta$ изменяются от 573” для самой близкой к пику подложки пары сателлитов до 557” для самой дальней. В связи с этим для увеличения точности расчета значения периода сверхрешетки нужно использовать пару сателлитов, которые расположены максимально далеко от пика подложки. Погрешность рассчитывалась по формуле абсолютной погрешности косвенных измерений и определялась шагом сканирования по углу θ. Результаты расчетов представлены в таблице Г.2.

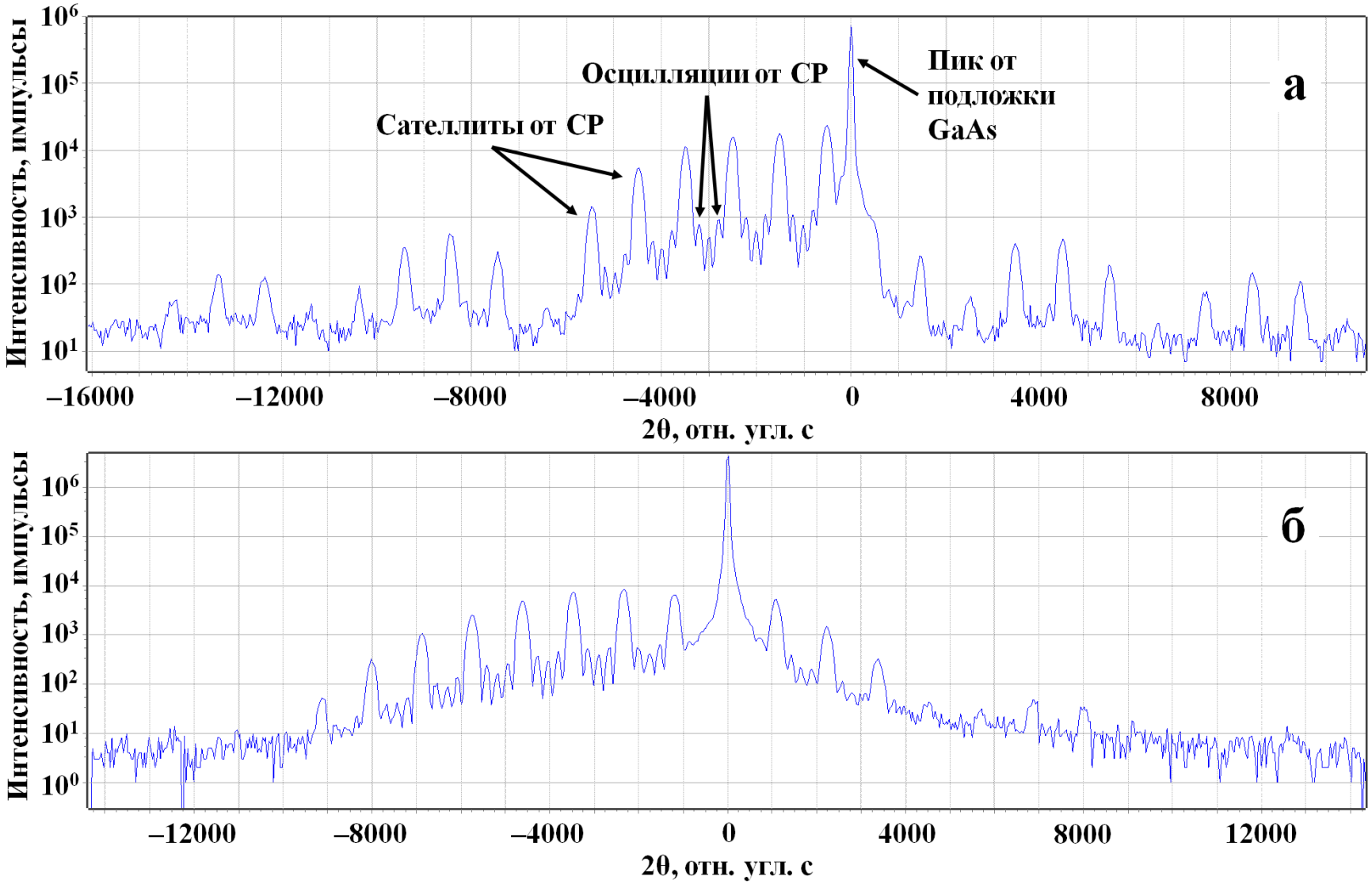
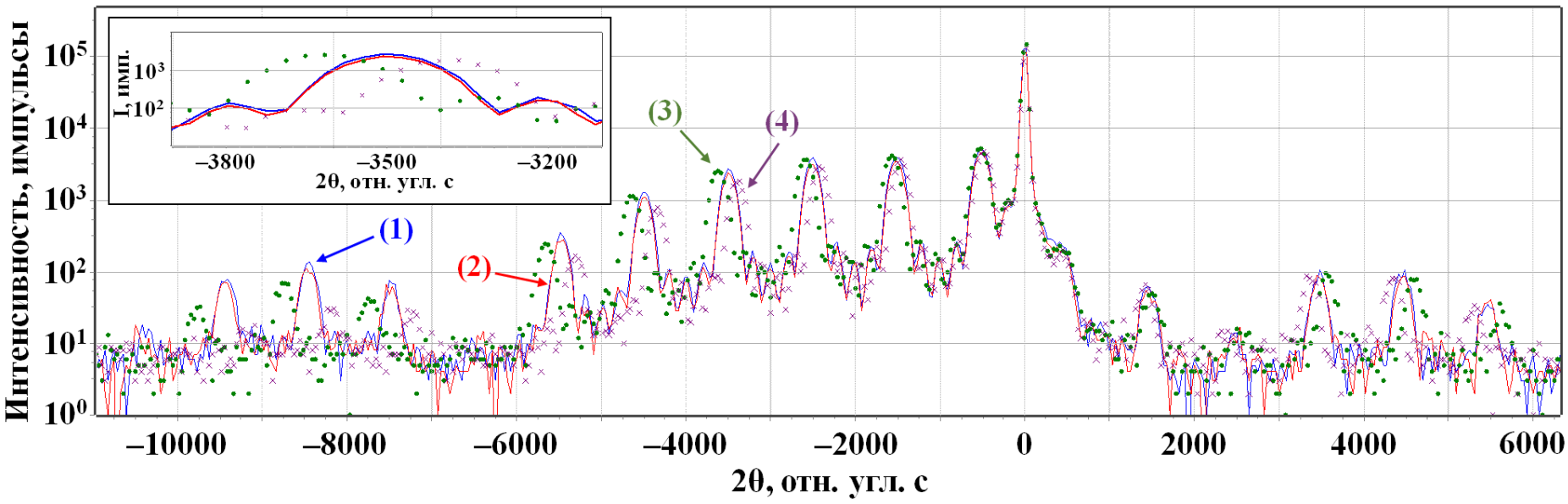


Рисунок Г.1 — (2θ-ω)-сканы вблизи отражений (а) (002) и (б) (004) GaAs образца С на подложке GaAs в направлении перпендикулярном к направлению отклонения среза подложки

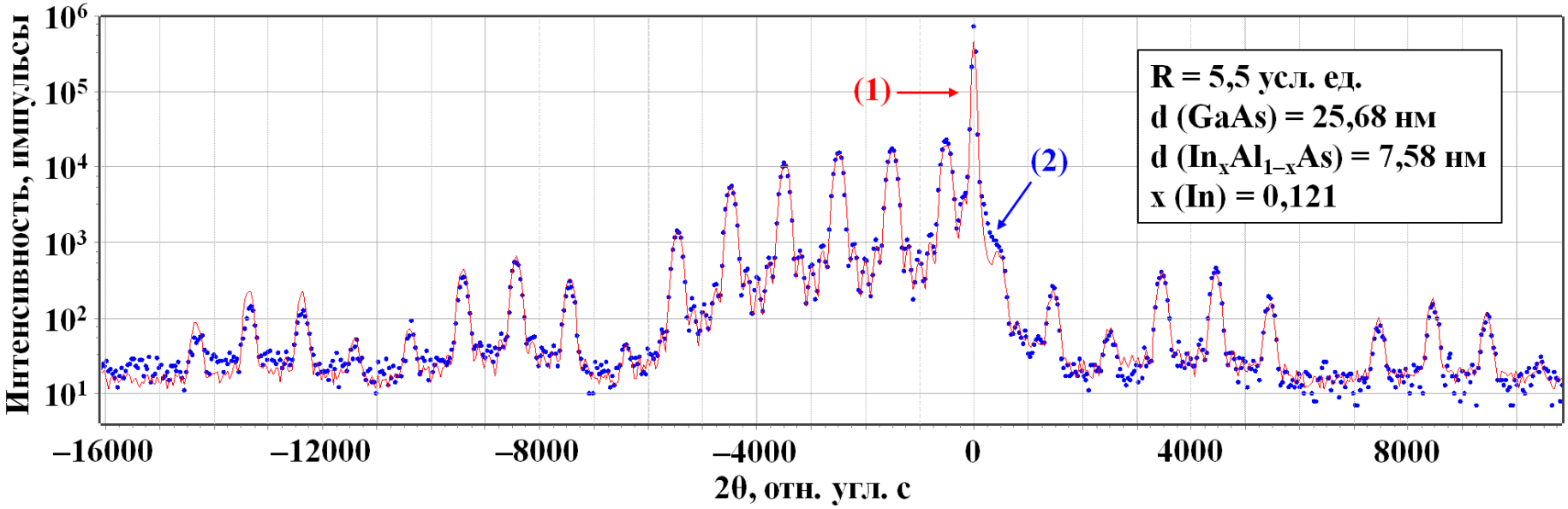
Примечание — Для построения (2θ-ω)-скана вблизи отражения (004) в плече монохроматора использовалась щель в брэгговской плоскости в два раза уже, чем при построении (2θ-ω)-скана вблизи отражения (002), чтобы защитить детектор от интенсивного пика подложки.



(2θ-ω)-сканы, снятые в разных направлениях относительно направления отклонения среза подложки: 1, 2 — перпендикулярно, но в противоположных направлениях; 3 — против; 4 — вдоль.

Рисунок. Г.2 — (2θ-ω)-сканы вблизи отражения (002) GaAs образца С на подложке GaAs

Примечание — На вставке увеличенное изображение участка (2θ-ω)-сканов с одним сателлитным пиком от сверхрешетки.



(2θ-ω)-Сканы: 1 — смоделированный; 2 — полученный в эксперименте.

Рисунок Г.3 — Результаты моделирования (2θ-ω)-скана к (2θ-ω)-скану, полученному в ходе эксперимента вблизи отражения (002) GaAs в направлении перпендикулярном к направлению отклонения среза подложки

Примечание — R — процент ошибки в усл. ед., значение которого характеризует несоответствие смоделированного (2θ-ω)-скана с экспериментальным, d — толщины слоев, x — доля In в слое $In_xAl_{1-x}As$ сверхрешетки InAlAs/GaAs.

Для использования формулы (Г.7) требовалось определить угол γ^* и направление отклонения среза. Методом рентгеновской дифрактометрии установлено, что угол разориентации подложки GaAs образца С от кристаллографического направления [001] (γ^*) составляет (0,47°±0,12°), а проекция направления отклонения среза на плоскость (001) повернута на угол η^*=(30°±8°) против часовой стрелки от кристаллографического направления [110]. Для определения γ^* и η^* записывались кривые качания для отражения (004) с широкой щелью перед детектором при четырех углах φ^*: 0°; 90°; 180°; 270°. По кривым качания определяли положения максимума пиков от подложки (ω_{max}). Набор углов (φ^*, ω_{max}) аппроксимировали функцией, соответствующей формуле (Г.8).

$$\omega^*(\varphi^*)=\omega_0+\gamma^*\cdot\cos(\varphi^*-\eta^*), \qquad (Г.8)$$

где ω_0 — ноль функции $\cos(\varphi^*-\eta^*)$.

Результатом аппроксимации были углы (ω_0, γ^*, η^*). Погрешность измерения углов γ^* и η^* определялась в эксперименте путем юстировки вблизи отражений (002) и (004) вдоль, против направления отклонения среза и в двух перпендикулярных к нему направлениях.

Таблица Г.2 — Период сверхрешетки (D_t) образца С, рассчитанный по формулам (Г.4), (Г.7) и для четырех (2θ-ω)-сканов вблизи отражения (002) GaAs вдоль (φ^*=0°) против (φ^*=180°) направления отклонения среза и в двух перпендикулярных к нему направлениях (φ^*=±90°)

Размеры в нанометрах

φ^*	D_t			
	Расчет по формуле (Г.4)		Расчет по формуле (Г.7)	
	Номин.	Пред. откл.	Номин.	Пред. откл.
+90°	33,27	±1,12	33,27	±1,13
–90°	33,39	±1,13	33,39	±1,13
0°	32,33	±1,06	33,30	±1,12
180°	34,53	±1,20	33,49	±1,20

Из таблицы Г.2 видно, что центры доверительных интервалов параметра D_t, рассчитанного по формулам (Г.4) и (Г.7) по (2θ-ω)-сканам снятым перпендикулярно направлению отклонения среза (φ^*=±90°) имеют одинаковые значения. Это очевидно, так как $\cos(\varphi^*)$ в этих случаях равен 0 и для соседних сателлитов формулы (Г.4) и (Г.7) становятся идентичны. Центры доверительных интервалов параметра D_t, рассчитанного по формуле (Г.4) по

(2θ-ω)-сканам снятым вдоль и против направления отклонения среза (φ^*=0° и φ^*=180° соответственно) имеют различия в значениях сравнимые с величиной погрешности. Стоит отметить, что подложка GaAs образца C имеет низкое значение угла разориентации (γ^*=0,47°±0,12°), поэтому различия в параметре D_t незначительны для случаев φ^*=0° и φ^*=180°. Несмотря на слабое различие в величине D_t для φ^*=0° и φ^*=180°, можно заметить, что использование формулы (Г.7) позволяет сместить центры доверительных интервалов ближе к центрам доверительных интервалов параметра D_t для φ^*=90°.

Результаты расчетов коррелируют с тем, что мы видим на рисунке Г.2. Снятые перпендикулярно к направлению отклонения среза (2θ-ω)-сканы практически полностью совпадают. Их сателлиты и осцилляции лежат между сателлитами и осцилляциями (2θ-ω)-сканов, снятых вдоль и против направления отклонения среза. Также можно заметить, что интенсивности спектров, полученных вдоль и против направления отклонения среза, значительно быстрее спадают по мере отдаления от пика подложки. Это объясняется тем, что щель сканирования в обратном пространстве кристаллической решетки имеет конечный размер. При (2θ-ω)-сканировании вблизи отражения (004) вдоль или против направления отклонения среза, начиная с определенного угла 2θ, линия спектра от сверхрешетки (СР) не будет попадать в щель сканирования из-за наличия угла между направлением (2θ-ω)-сканирования и линией спектра от СР. Наиболее наглядно это можно продемонстрировать на картах обратного пространства (рисунок Г.4 (б) и (в)). На карте (004), снятой в кристаллографическом направлении [110] (рисунок Г.4 (б)), видно, что направление (2θ-ω)-сканирования, которое на картах (004) в определенном диапазоне углов ω можно считать вертикальным, имеет небольшой угол с линией спектра от сверхрешетки, которая проходит через пик от подложки GaAs. Однако на карте (004), снятой в направлении перпендикулярном к направлению отклонения среза, этот угол отсутствует (рисунок Г.4 (в)).

Для подтверждения близкой к 0 релаксации сверхрешетки (СР) записаны карты вблизи отражений (224+) и (004) GaAs в кристаллографических направлениях [110] (рисунок Г.4 (а), (б)) и [1$\bar{1}$0]. Наличие сателлитов на картах (224+), а также наличие четко выраженных сателлитов и осцилляций на картах (004) свидетельствует о близкой к 0 релаксации СР. Небольшое отклонение линии спектра сателлитов от сверхрешетки от вертикали связано с углом разориентации подложки GaAs.

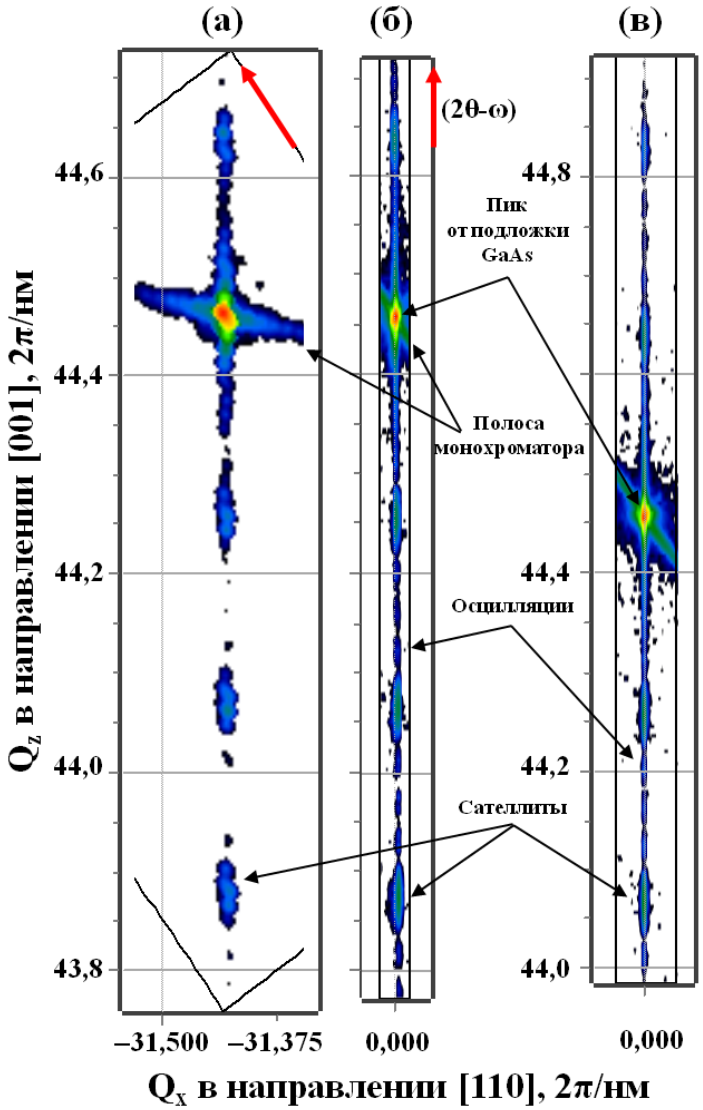


Рисунок Г.4 — Карты обратного пространства кристаллической решетки GaAs образца С (GaAs) вблизи отражений (а) (224+), (б) (004) в кристаллографическом направлении [110] и (в) (004) в кристаллографическом направлении перпендикулярном к направлению отклонения среза подложки GaAs

Примечание — Красной стрелкой указано направление (2θ-ω)-сканирования на картах (224+) и (004).

На основе вышеуказанных фактов (2θ-ω)-скан вблизи отражения (002), снятый перпендикулярно направлению отклонения среза подложки на рисунке Г.1 (а) использовался для определения параметров сверхрешетки (СР) InAlAs/GaAs.

Сначала с помощью формулы (Г.4) и дальних сателлитов рассчитан период СР, который составляет (33,21±1,12) нм. Далее в программном обеспечении AMASS проводилось моделирование (2θ-ω)-скана вблизи отражения (002) GaAs с использованием модели DWBA (Distorted wave born approximation, борновское приближение метода искаженных волн) для моделирования диффузного рассеяния, среднего значения D_t=33,21 нм и значения доли In в слое

InAlAs, соответствующего заданию на рост. После чего проводилась оптимизация параметров моделированной кривой с помощью «Genetic Algorithm» для максимального соответствия с кривой, полученной в эксперименте. Для этого учитывалось, что диапазон возможных значений периода сверхрешетки лежит в доверительном интервале (33,21±1,12) нм. Расчет процента ошибки проводился по формуле (Г.9), которая чувствительна к особенностям спектра низкой интенсивности.

$$R=\sum\left|\lg y_{io}-\lg y_{ic}\right| / \sum\left|\lg y_{io}\right|, \qquad (Г.9)$$

где y_{io} — интенсивность в i-ой точке данных, полученных в эксперименте;

y_{ic} — интенсивность в i-ой точке данных, полученных при моделировании.

Результаты моделирования представлены на рисунке Г.3. С учетом процента ошибки R=5,5 усл. ед. определены толщины (d) и доля In (x) в дислокационных фильтрах $In_xAl_{1-x}As/GaAs$: d (GaAs)=25,68 нм; d ($In_xAl_{1-x}As$)=7,58 нм; x=0,121. В качестве доверительного интервала для параметров d (GaAs), d ($In_xAl_{1-x}As$) и x выбраны диапазоны, изменения величин в которых не приводят к увеличению процента ошибки выше 6 усл. ед. Доверительные интервалы для d (GaAs) — (25,68–25,71) нм, d ($In_xAl_{1-x}As$) — (7,54–7,63) нм и x — (0,120–0,124).

На основе обзора литературы и проведенных экспериментов, можно прописать следующую последовательность действий по определению параметров сверхрешетки методом рентгеновской дифрактометрии:

— определение используемого отражения по описанной выше методике;

— определение угла разориентации и направления отклонения среза подложки;

— проведение (2θ-ω)-сканирования вблизи выбранного отражения перпендикулярно направлению отклонения среза подложки с максимальным диапазоном по углу 2θ, при котором сателлиты от сверхрешетки (СР) различаются, и с шагом сканирования, при котором на нескольких периодах огибающей спектра четко проявляются осцилляции от СР;

— расчет периода сверхрешетки по формуле (Г.7), используя отдаленные от пика подложки сателлиты;

— оптимизация параметров моделированной кривой для максимального соответствия с кривой, полученной в эксперименте, с помощью математических методов, например, «Genetic Algorithm», учитывая доверительный диапазон для значения периода сверхрешетки.

Приложение Д
(справочное)
Измерение толщины слоев на изображениях поперечного среза

Обработка СПЭМ-изображений выполнена с помощью программных обеспечений (ПО) Gatan Digital Micrograph и ПО Gwyddion. ПО Gwyddion использовалось для выравнивания данных с помощью вычитания средней плоскости, а ПО Gatan Digital Micrograph для калибровки изображения и определения толщины слоя.

Для определения толщины слоя строился усредненный по ширине всего СПЭМ-изображения профиль нужного слоя, после чего определялись центр и ширина каждой из гетерограниц. Расширение гетерограниц на профиле обусловлено взаимной диффузией атомов на границе соседних слоев и вариацией толщины слоя.

Границы гетерограниц выбирались по следующим правилам.

— Если ширина гетерограницы больше, чем размер пикселя изображения, то для границ гетерограницы выбирались координаты, соответствующие интенсивности профиля равной 80 % и 20 % от перепада высот по интенсивности двух слоев (рисунок Д.1).

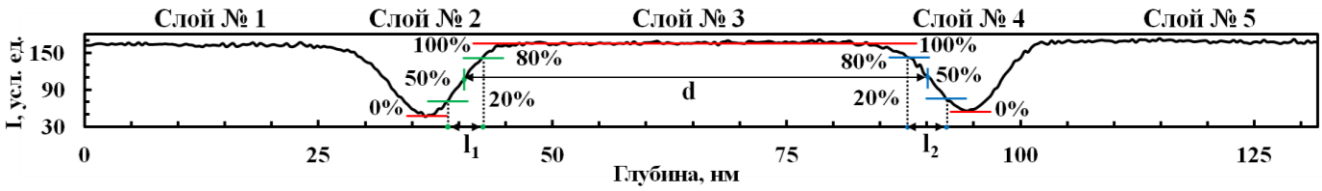


Рисунок Д.1 — Схема измерения толщины слоя № 3 (d) и ширины гетерограниц (l_1, l_2) по профилю от СПЭМ-изображения, который представляет собой зависимость интенсивности сигнала от координаты

— Если гетерограница на СПЭМ-изображении резкая, то есть ширина гетерограницы меньше, чем размер пикселя изображения, то для границ гетерограницы выбирались координаты глубины равные плюс и минус 1 пикселю от положения гетерограницы.

В качестве среднего значения толщины слоя принималось расстояние между центрами гетерограниц. В качестве погрешности измерения толщины слоя использовалась формула (Д.1).

$$\Delta d=\sqrt{(\Delta d_1)^2+(\Delta d_2)^2}, \qquad (Д.1)$$

где Δd_1 — сумма полуширин гетерограниц слоя, нм;

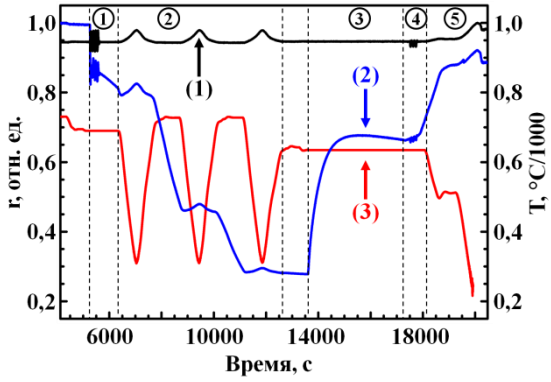
Δd_2 — размер пикселя на изображении, умноженный на коэффициент 1,96/3, что соответствует приборной погрешности для доверительной вероятности 0,95, нм.

Значение Δd_2 зависит от толщины слоя, поскольку с ростом толщины требуется использовать более низкое увеличение, что приводит к росту размера пикселя на изображении. На изображениях, в которых размер пикселя ≤0,2 нм приборная погрешность устанавливается равной Δd_2=0,13 нм.

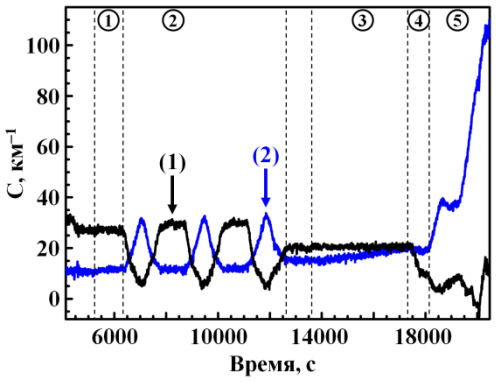
Приложение Е
(рекомендуемое)
Измерение отражательной способности во время эпитаксии $A^{III}B^{V}$

Сильно развитая морфология поверхности гетероструктуры III-V критична для многих приложений, в том числе и для создания светоизлучающих гетероструктур. Для решения задачи минимизации шероховатости поверхности необходимо четкое понимание, в какие моменты роста она начинает увеличиваться. С этой целью in-situ методы измерения являются актуальными. Измерение отражательной способности поверхности гетероструктуры во время роста является одним из таких методов, который хорошо себя зарекомендовал для решения данной задачи [186]. Принцип работы и суть данного метода с введением необходимой терминологии описаны в разделе 2.3.1. В данном приложении представлена обработка и обсуждение результатов исследования отражательной способности образца Е (Ge/Si/КНИ) во время роста III-V.

В одном процессе роста Е кроме созданной платформы Ge/Si/КНИ (001) присутствовала подложка-спутник GaAs (001). Для гетероструктуры на подложке GaAs не наблюдались изменения значения отражательной способности (r) (рисунок Е.1), что указывает на сохранение атомарно гладкой поверхности на всем этапе роста. Обратная ситуация наблюдается для гетероструктуры на платформе Ge/Si/КНИ. На рисунке Е.2 (а) можно заметить, что центральное значение осцилляций r (r_∞) для гетероструктуры на платформе Ge/Si/КНИ уменьшается, что указывает на увеличение шероховатости во время роста буферных слоев GaAs/$Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ и GaAs. За время роста зародышевого слоя AlGaAs значение r для гетероструктуры на Ge/Si/КНИ резко уменьшилось. Частично это связано с тем, что появляется новая гетерограница AlGaAs/Ge, а частично с 3D режимом роста. На первую причину указывает уменьшение значения r во время роста зародышевого слоя не только для излучения на 405 нм, но и для излучений на 633 и 949 нм (рисунок Е.2 (б)). Можно заметить, что за время роста зародышевого слоя AlGaAs и половины слоя GaAs значение r_∞ меньше, чем значение r_∞ для последующих слоев AlGaAs/GaAs. Данный факт связан с прекращением влияния на значение r гетерограницы AlGaAs/Ge и заращиванием большого количества антифазных доменов (АФД). Методами ПЭМ установлено, что островковый рост заканчивается в зародышевом слое AlGaAs, а также, что основная плотность АФД заращивается уже в пределах первого периода GaAs/AlGaAs (см. раздел 4.2.2), что согласуется с данными результатами.



(а)



(б)

1 — Зависимости отражательной способности (r) и кривизны (C) от времени роста для образца-спутника на подложке GaAs;

2 — зависимости r и C от времени роста для образца E (Ge/Si/КНИ);

3 — зависимость температуры роста (T) от времени для образца E (Ge/Si/КНИ).

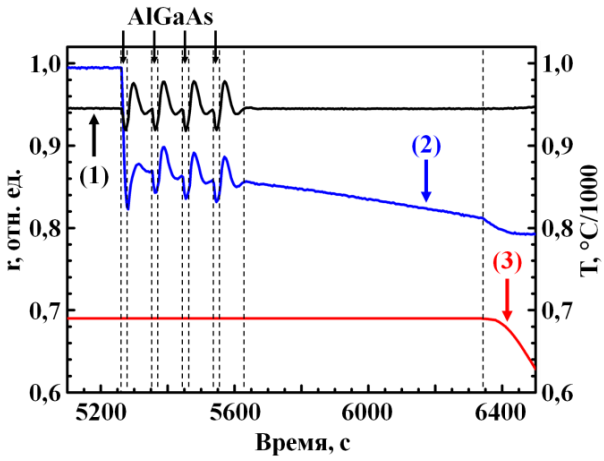
Рисунок E.1 — In-situ измерения (а) r, T и (б) C образца E (Ge/Si/КНИ) и образца-спутника на подложке GaAs (GaAs), с указанием областей: 1 — рост буферных слоев AlGaAs/GaAs и буферного слоя GaAs, 2 — термоциклический отжиг, 3 — рост n-типа GaAs, 4 — рост активной области с КЯ InGaAs/GaAs, 5 — рост p-типа GaAs

Примечания

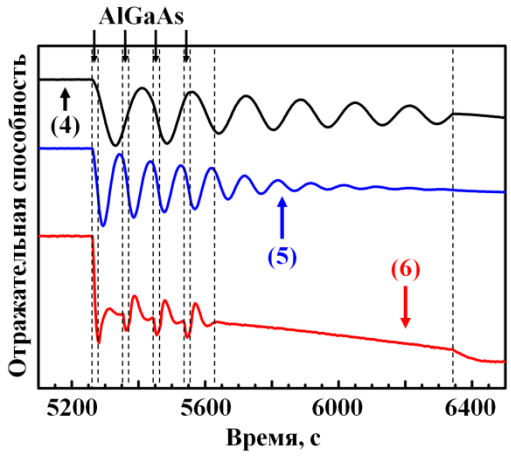
1 Значения r нормированы на максимальные значения для соответствующей гетероструктуры за все время роста.

2 Для получения значения r использовалось излучение с длиной волны 405 нм.

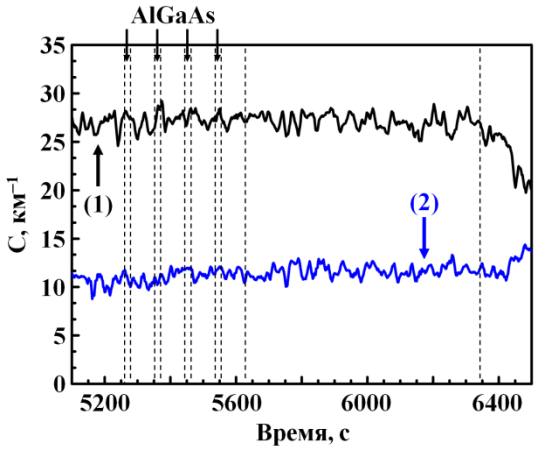
3 Значения температуры на поверхности образца-спутника на подложке GaAs меньше незначительно, в зависимости от значения температуры, максимум на 12 °C. Значения температуры роста в образце D (GaAs) совпадают со значениями температуры роста образца E (Ge/Si/КНИ) (рисунок E.1 (а)).



(а)



(б)



(в)

1 — Зависимости отражательной способности (r) и кривизны (C) от времени роста для образца-спутника на подложке GaAs;

2 — зависимости r и C от времени роста для образца E (Ge/Si/КНИ);

3 — зависимость температуры роста (T) от времени;

4; 5; 6 — зависимости r от времени роста для образца E (Ge/Si/КНИ) при использовании излучений с длинами волн 949; 633; 405 нм соответственно.

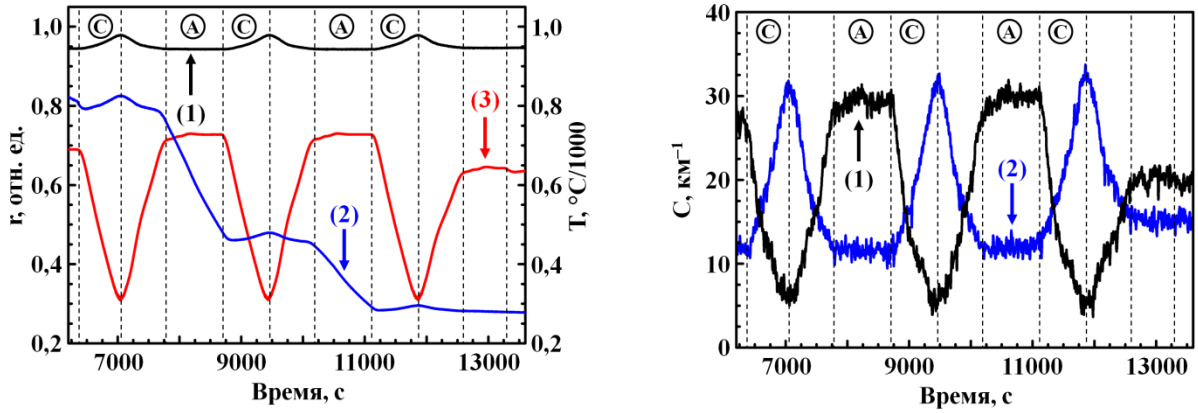
Рисунок E.2 — In-situ измерения, соответствующие участку 1 на рисунке E.1: (а) r (405 нм), T; (в) C образца E (Ge/Si/КНИ) и образца-спутника на подложке GaAs (GaAs) во время роста буферных слоев III-V; а также (б) измерения r образца E (Ge/Si/КНИ) при использовании излучений с длинами волн 949; 633; 405 нм

Примечания

1 Значения r (405 нм) на изображении (а) нормированы на максимальные значения для соответствующей гетероструктуры за все время роста.

2 Значения r на изображении (б) нормированы на максимальные значения для соответствующей длины волны; значения, полученные при длине волны 405 нм, увеличены в 4 раза; кривые на изображении (б) отделены друг от друга по высоте.

Для гетероструктуры на платформе Ge/Si/КНИ также можно заметить резкое уменьшение значения r на этапе выдержки при высокой температуре во время термоциклического отжига (ТЦО) (рисунок Е.3 (а)). При этом значения кривизны и температуры оставались постоянными, что указывает на увеличение шероховатости. Стоит отметить, что во время ТЦО значение потока арсина уменьшено в два раза в целях экономии. Однако уменьшение потока арсина никак не сказалось на значении r для гетероструктуры на подложке GaAs, что опровергает предположение о влиянии значения потока арсина на r. Кроме этого во время установления температуры, соответствующей температуре роста светоизлучающей III-V-гетероструктуры, угол наклона кривой r от времени уменьшается, что указывает на влияние температуры поверхности на шероховатость во время паузы роста — чем больше температура, тем сильнее происходит увеличение шероховатости поверхности.



(а) (б)

1 — Зависимости отражательной способности (r) и кривизны (C) от времени роста для образца-спутника на подложке GaAs;

2 — зависимости r и C от времени роста для образца E (Ge/Si/КНИ);

3 — зависимость температуры роста (T) от времени.

Рисунок Е.3 — In-situ измерения, соответствующие участку 2 на рисунке Е.1: (а) r, T и (б) C образца E (Ge/Si/КНИ) и образца-спутника на подложке GaAs (GaAs) во время термоциклического отжига

Примечания

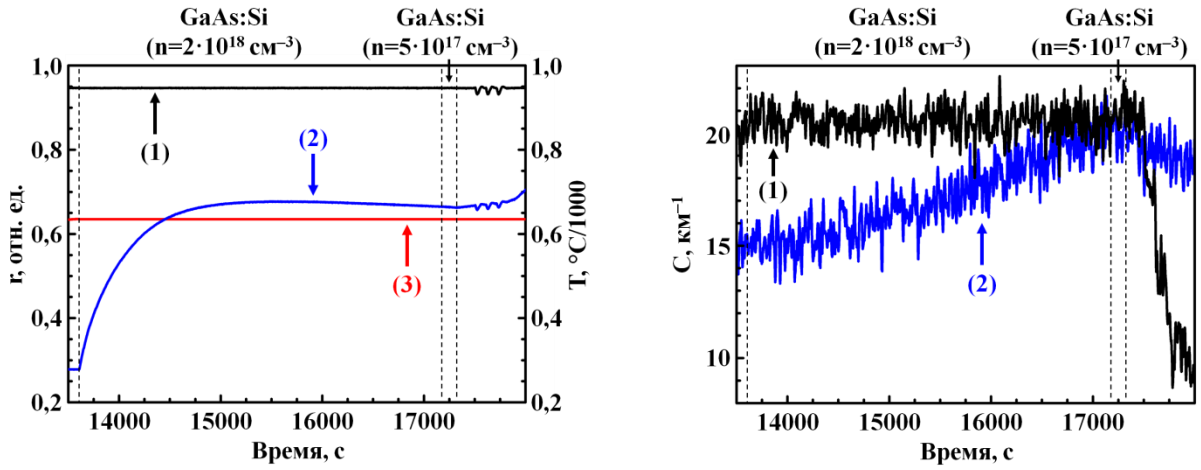
1 Значения r нормированы на максимальные значения для соответствующей гетероструктуры за все время роста.

2 Для получения значения r использовалось излучение с длиной волны 405 нм.

3 Обозначения: C — cooling (охлаждение), A — annealing (отжиг).

На рисунке Е.4 (а) можно заметить, что с момента роста слоя n+GaAs при скорости роста (0,71±0,07) нм/с, отношении V/III=69 и температуре роста 635 °C значение r стало резко

увеличиваться, что в данном случае указывает на выравнивание фронта роста. При этом через 1800 с, что соответствует толщине слоя GaAs (1278±126) нм, значение r достигает максимального значения и начинает незначительно уменьшаться.



(а) (б)

1 — Зависимости отражательной способности (r) и кривизны (C) от времени роста для образца-спутника на подложке GaAs;

2 — зависимости r и C от времени роста для образца E (Ge/Si/КНИ);

3 — зависимость температуры роста (T) от времени.

Рисунок E.4 — In-situ измерения, соответствующие участку 3 на рисунке E.1: (а) r, T и (б) C образца E (Ge/Si/КНИ) и образца-спутника на подложке GaAs во время роста слоев GaAs:Si

Примечания

1 Значения r нормированы на максимальные значения для соответствующей гетероструктуры за все время роста.

2 Для получения значения r использовалось излучение с длиной волны 405 нм.

3 Концентрации носителей заряда указаны в соответствии с заданием на рост.

4 Пунктирными вертикальными линиями ограничены интервалы роста отмеченных сверху слоев.

Во время роста буферных слоев (рисунок E.2 (в)) и слоя n+GaAs (рисунок E.4 (б)) кривизна (C) платформы Ge/Si/КНИ незначительно увеличивалась со скоростью ≈1,5^{-3} км$^{-1}$/с. Учитывая, что путь света от источника излучения с длиной волны 405 нм лежит в центральной части подложки и излучение падает нормально к ее поверхности, то незначительное изменение кривизны не должно повлиять на значение r, что подтверждается экспериментально.

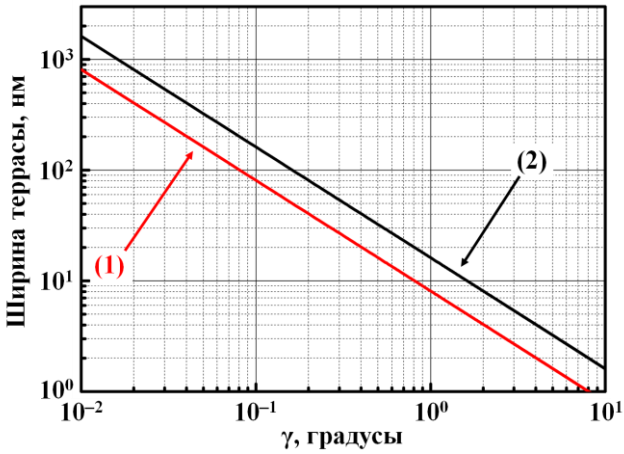
Приложение Ж
(справочное)
Ступенчатая морфология поверхности

Поверхность подложек кристаллического полупроводника представляет собой набор ступеней и терасс. Ширина террас в направлении <110> (D_b) полупроводников с кристаллографической ориентацией (001) определяется по формуле (Ж.1), которая легко выводится из геометрических соображений. Средняя ширина террас вдоль направления <110> как функция от угла отклонения среза подложки GaAs в направлении <110> (γ) представлена на рисунке Ж.1 в двойном логарифмическом масштабе.

$$D_b = a/(\kappa \cdot \tan\gamma), \qquad (Ж.1)$$

где a — параметр решетки полупроводника, нм;

κ — коэффициент, зависящий от высоты ступени: для одноатомных ступеней κ=4, для двухатомных ступеней κ=2.



Зависимости ширины террасы от γ: 1 — для одноатомных ступеней; 2 — для двухатомных ступеней.

Рисунок Ж.1 — Средняя ширина террас вдоль направления <110> как функция от угла отклонения среза подложки GaAs в направлении <110> (γ)

Для того чтобы установить какой режим эпитаксиального роста полупроводников III-V преобладал: 2D-островковый или на ступенях, важно определить морфологию ступенчатой поверхности конечной гетероструктуры. При анализе результатов важно понимать возможности

метода исследования. С этой целью методом атомно-силовой микроскопии в полуконтактном режиме (АСМ) получены АСМ-сканы поверхности подложки GaAs с ориентацией (001), углом отклонения среза в направлении <110> γ≈3° и образца D (GaAs), представляющего собой гетероструктуру GaAs/III-V, выращенную на подложке GaAs с ориентацией (001), γ≈0,15° (рисунок Ж.2). Углы отклонения среза подложек в направлении <110> установлены методом рентгеновской дифрактометрии. Полученные значения входят в диапазон углов γ, заявленных в спецификации на подложки.

На АСМ-скане (рисунок Ж.2 (а)) можно увидеть набор террас, чередующихся в направлении <110>, ширина которых составляет (48±8) нм, что в пределах погрешности соответствует ширине террас с одноатомными ступенями на поверхности GaAs с γ≈0,15°. Учитывая незначительную разницу в ширине террас для Si и GaAs, которая при γ≈0,15° и одноатомных ступенях составляет примерно 2 нм, то контраст на АСМ-сканах таких поверхностей будет идентичным, что мы и наблюдаем на рисунке Ж.2 (а), который соответствует GaAs, и на его вставке, которая соответствует Si и адаптирована из статьи [20]. Авторы статьи [20] утверждают, что средняя ширина террас на поверхности Si составляет ≈50 нм. Данное значение лежит в доверительном интервале, рассчитанным нами для поверхности GaAs.

Так как на рисунке Ж.2 (а) представлен АСМ-скан поверхности гетероструктуры GaAs/III-V, выращенной на подложке GaAs с γ≈0,15 в направлении <110>, то можно сделать вывод, что присутствовал режим роста III-V на ступенях и произошла практически полная трансляция ступенчатой морфологии поверхности подложки GaAs.

Учитывая латеральное разрешение для используемого в диссертации атомно-силового микроскопа, которое составляет 50 нм, то террасы с шириной на порядок меньше зафиксировать невозможно. Поэтому ширина «террас», наблюдаемых на АСМ-скане поверхности подложки GaAs (001) с отклонением среза ≈3° в направлении <110> (рисунок Ж.2 (б)), равная (41±9) нм связана с размером АСМ-зонда, а не шириной реальных террас.

Таким образом, используемый нами метод исследования поверхности атомно-силовой микроскопии позволяет достоверно разглядеть ступенчатую морфологию поверхности кристаллического полупроводника, если ширина его террас имеет значение ≈50 нм или больше. В случае поверхности подложки с одноатомными ступенями или эпитаксиально выращенной на ней гетероструктуры с трансляцией ступенчатой морфологии поверхности подложки значение ширины террас ≈50 нм соответствует γ≈0,15° для полупроводников Si, Ge, GaAs.

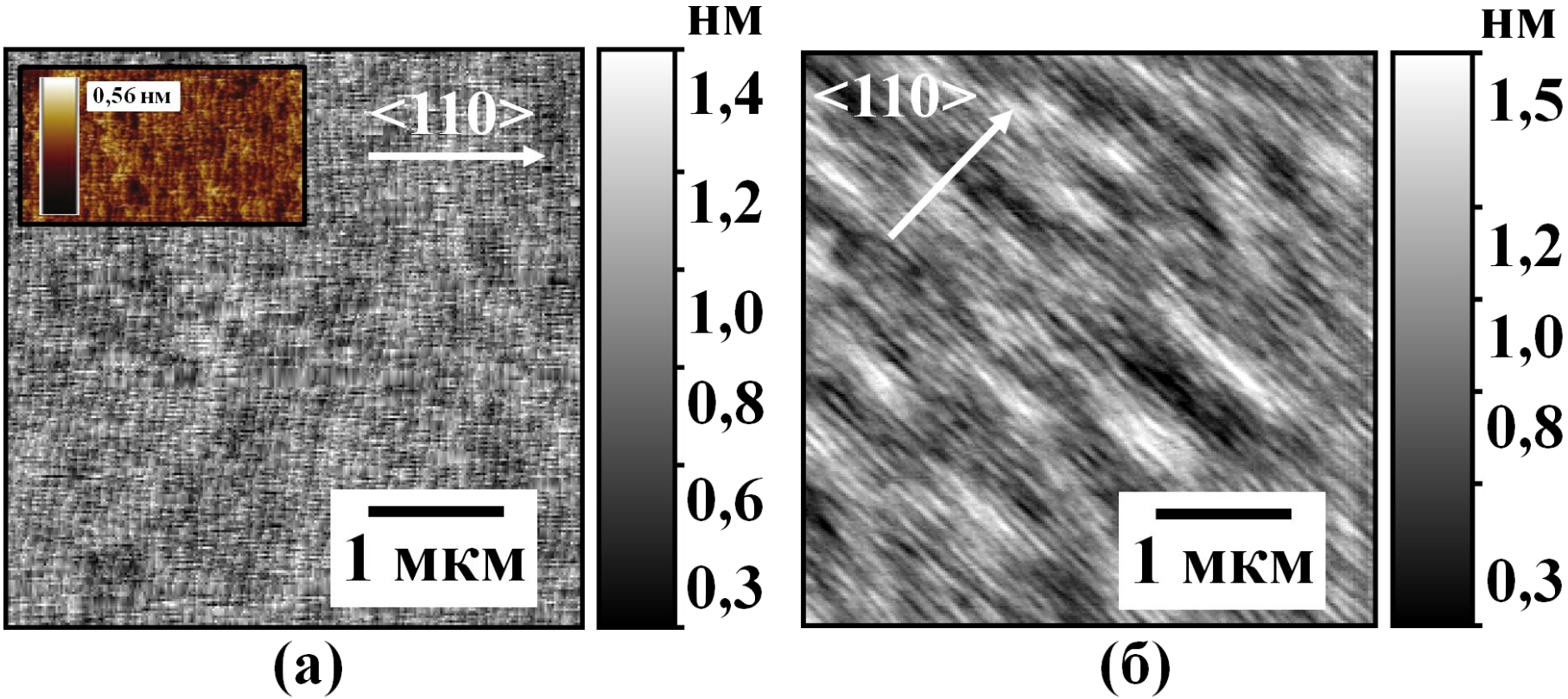


Рисунок Ж.2 — АСМ-сканы поверхности (а) гетероструктуры GaAs/III-V на подложке GaAs с углом отклонения среза в направлении <110> $\gamma \approx 0{,}15°$ и (б) подложки GaAs (001) с $\gamma \approx 3°$

Примечания

1 На вставке АСМ-скана (а) представлен АСМ-скан поверхности с одноатомными ступенями подложки Si с $\gamma \approx 0{,}15°$ после отжига в атмосфере водорода при температуре 900 °С и давлении 10 Торр, адаптированный из статьи [20].

2 Масштабная шкала на АСМ-скане (а) соответствует масштабной шкале АСМ-скана на вставке.

Приложение И
(справочное)
Особенности препарирования поперечного среза сапфира

1. Сапфировые подложки, в силу их высокой твердости, практически не режутся ультразвуком, но при ориентации $(1\bar{1}02)$, называемой R-срезом, они относительно легко скрайбируются алмазом и разламываются вдоль взаимно перпендикулярных направлений $(2\bar{1}\bar{1}0)$ и $(0\bar{1}11)$. Значение факторов навыка и везения при скрайбировании и разламывании подложек из сапфира очень высокое. Другим вариантом нарезки сапфировых подложек является использование дисковой алмазной пилы.

2. В качестве жертвенных слоев используются пластины поликора. Поликор содержит до 99 % Al_2O_3, основной фазой которого является кристаллический корунд (α-Al_2O_3). Поликор по прочности ближе к сапфиру, что увеличивает вероятность получения качественных ПЭМ-дисков. Однако лицом к лицу с исследуемым образцом желательно приклеивать пластину из материала подложки образца, чтобы скорость утонения в прецизионной ионной полировальной системе была одинаковой.

3. Рекомендуется нарезать пластины 3 на 4 мм, а не 4 на 5 мм (как при стандартной методике препарирования), чтобы уменьшить эффект изнашивания сверла при высверливании цилиндра из пакета склеенных пластин.

4. Для высверливания цилиндра из пакета склеенных пластин необходимо использовать отдельное сверло с алмазным абразивным покрытием, выделенное специально для сапфировых образцов. Поскольку твердость сапфира высока, то высверливание цилиндра из сапфира будет приводить к быстрому изнашиванию сверла.

5. В случае если цилиндр не влезает в стандартную латунную трубку, требуется утонить трубку изнутри с помощью специальной машины и шлифовальной шкурки. Сверло в процессе изнашивания расширяется, и в результате получаются цилиндры с большим диаметром, которые могут не помещаться в стандартные латунные трубки.

6. Используется более грубое механическое утонение с помощью электрической шлифовальной машины и шлифовальных шкурок: P320, P360 или P400.

7. При механическом утонении ПЭМ-диска с сапфировой подложкой требуется строго контролировать поверхность, чтобы она была плоскопараллельной. Допускается превышение толщины ПЭМ-диска в области нахождения подложки сапфира не более чем на 20 мкм. При механическом утонении сапфир стачивается значительно медленнее, чем латунное кольцо. В

результате сапфир выпирает из ПЭМ-диска, и при переклеивании на другую сторону латунное кольцо оказывается не прижатой к металлическому столбику (основанию), что увеличивает вероятность отклеивания латунного кольца от ПЭМ-диска.

8. При создании лунки на устройстве «Dimpler» необходимо использовать максимальную нагрузку 40 г и максимальную скорость вращения диска. В качестве абразива требуется применять водорастворимую пасту с размером зерна 0,5 мкм.