

② 325-329

GeSi/Si 应变结构内应力纵向分布

肖剑飞¹⁾ 封松林¹⁾ 彭长四²⁾

¹⁾中国科学院半导体研究所半导体超晶格国家重点实验室,北京,100083;

²⁾中国科学院物理研究所,北京,100080)

TN304.2
0471.4

摘要 利用深能级瞬态谱(DLTS)研究分子束外延 n-Ge_{0.2}Si_{0.8}/Si 应变超晶格,观察到两个与位错有关的深中心,其中一个能级位置在 $E_c=0.42\text{eV}$,另一个随着偏压变化而发生明显的移动,深能级位置从 $E_c=0.21\text{eV}$ 变化到 $E_c=0.276\text{eV}$.我们认为是内应力引起的.取该深能级的流体静压力系数 $\gamma=6.59\text{meV/Kba}$,求出超晶格中的应力分布与计算值符合较好.在此基础上提出了一种通过测量深能级随应力移动效应来确定应变结构内应力纵向分布的新方法.

关键词 GeSi/Si, 应变超晶格, 内应力, 深能级瞬态谱(DLTS).

引言

GeSi/Si 应变超晶格与成熟的 Si 集成工艺兼容,作为潜在的 Si 基光电集成材料近年来受到极大关注.应变层超晶格的能带结构和排列、电子结构等性质都可以通过应变来调节^[1-3].目前确定应变和应力的实验方法主要有喇曼声子谱^[4]和 X-射线双晶衍射^[5].这两种实验方法很难直接给出不同应变层及同一应变层里的应力差别,其结果比较粗糙.有充分的证据表明,应变层的应力分布并不是均匀的,因此,应力分布的准确测定对于这些材料物理性质的理解及其应用有重要意义.

已有大量的工作利用外加压力来确定深能级在应力场作用下的行为,如利用深能级在内应力或者外加压力下的移动来识别深能级^[6-8].应变层中的深中心能级位置在内建应变场的应力作用下,一般也会发生相对于能带边的移动^[9-11].由于深中心具有局域波函数,其能级位置仅对近邻晶格畸变比较敏感,利用这一特点根据不同层内深中心在内应力作用下能级位置的移动,来探测应变层中不同区域的局部应力,进而获得纵向应力分布.由此提出一种用深中心测定应变超晶格中内应力纵向分布的新方法,弥补了前述方法的不足.

1 原理

深能级的应力作用下一般会发生相对于能带边的能级移动,以导带 E_c 下电子深能级 E_T 为例做一简单讨论,所有结论均可推广至空穴深能级和价带的情形.设在静压力 P 下(对于单轴应力,情形比较复杂^[14]),电子热运动平均速度 V .和导带有效能级密度 N_c 与压力无关(相当于假定电子有效质量与压力无关).此时某固定温度下的压力系数 γ 为^[7-12]

$$\gamma = \frac{\partial(E_c - E_T)}{\partial P} \Big|_T \approx = kT \frac{\partial \ln e_n}{\partial P} \Big|_T, \quad (1)$$

式中 e_n 为电子发射率. 结合深能级应力系数, 由深能级在应力下的移动而测定应力大小, 即由式(1)可得

$$\partial P = \frac{1}{\gamma} \partial(E_c - E_T) \approx -\frac{kT}{\gamma} \partial \ln e_n. \quad (2)$$

2 实验结果

实验样品是分子束外延生长的 GeSi/Si 超晶格. 在 p-型 <100>Si 衬底上低温(400℃)生长 100nm 的 Si, 然后在 500℃ 生长 500nm 的 $\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$ 合金缓冲层, 再生长一个原子单层的 Sb, 接着共度生长 2.8nm 的 $\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$ 层和 2.8nm 的 Si 层, 交替生长 10 个周期, 最后是 50nm 的 Si 顶层, 所有外延层均未掺杂, 但 Sb 原子单层总是向上扩散, 主要聚集在界面处, 因此超晶格层是 n 型. 低温生长的 Si 层很“软”, 极易发生形变, 目的在于减少失配位错密度, 提高缓冲层的质量. 样品结构及其生长条件如图 1 所示. 样品背面蒸铝形成欧姆接触, 正面蒸发直径 $\phi \approx 1\text{mm}$ 的金点形成肖特基接触.

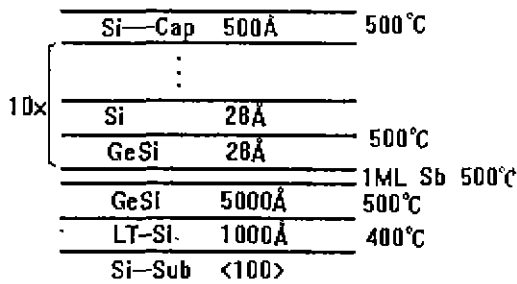


图 1 样品结构及生长条件
Fig. 1 Sample structure and growth condition

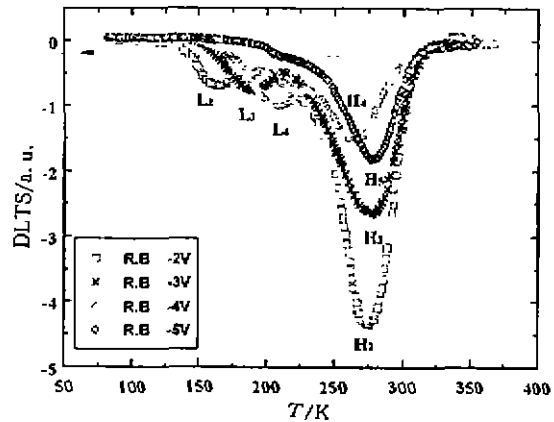


图 2 不同偏压下的典型 DLTS 谱
Fig. 2 Typical DLTS spectra for different reverse bias

C-V 测得超晶格的 n-型掺杂浓度约为 $6 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$. 样品超晶格层典型 DLTS 谱如图 2 所示, 其测试条件为: 注入脉冲高度 $P_H = 1\text{V}$, 宽度 $P_W = 0.1\text{ms}$, 测量率窗 $t = 2.07\text{ms}$, 外加反向偏压 V_R 分别取 -2、-3、-4、-5V.

样品存在两个深中心, 分别记作 H(高温)和 L(低温). 其中 DLTS 峰 L 不仅出现较明显的加宽, 而且温度位置随偏压的变化发生显著的移动, 移动量最多达 40K 以上, 但峰的形状几乎不变, 深中心 L 在不同偏压下的能级位置见表 1, $\ln(T^2 e_n^{-1}) - \frac{1}{T}$ 如图 3 所示. 可见深中心 L 确实发生了明显的移动, 其能级位置移动多达 70meV. 深中心 H 的峰形和温度位置变化很小, 其能级为: $\Delta E_H = E_c - 0.42\text{eV}$. 样品未有意掺杂, 基本可以排除深中心为杂质缺陷能级的可能性. 对照文献报导^[15-18], 这两个深中心都与位错有关.

表 1 深中心 L 在不同偏压下的能级位置(填充脉冲高度恒定)
Table 1 Activation energy of deep level L as a function of
reverse bias (with fixed filling pulse height)

外加偏置电压(V)	-2	-3	-4	-5
测量耗尽层区(nm)	76.8~81.7	81.7~89.6	89.6~104.7	104.7~122.4
DLTS 峰位置(K)	165	190	208	213
深能级位置(eV)	0.21	0.244	0.276	/

3 分析与讨论

对于深中心 L 的 DLTS 谱峰的加宽和温度位置的显著移动,可以排除电场效应.因为在 $V_p=1V$ 的实验条件下,测量区域是耗尽层中电场最弱的区域,电场对深中心的影响可以忽略不计.外加反向偏压不同时,耗尽层深入超晶格的区域也不同.随着反向偏压的增大,耗尽层在超晶格中逐渐向下延伸,深中心的 DLTS 峰越向高温移动,深能级位置逐渐移向禁带中央,距离导带越来越远.而深能级的移动量与引起移动的内应力存在着一定的对应关系,这一现象实质上说明不同应变层的内应力大小不同,越靠近缓冲层界面,内应力越大,证实了对应变超晶格中应变分布的普遍看法一致.一般认为,应变超晶格中应变和应力并非均匀不变,因为超晶格不同深度处的晶格畸变不完全一样,越靠近衬底方向,形变越厉害,应力越大.计算结果表明^[9~10],内应力和外加压力相似也能导致深能级的移动.生长在 Si 衬底上的 GeSi 形变层,受到 Si 作用的压应力越大,深能级越往禁带中央移动,而相对导带的距离越来越远.这与实验现象完全吻合,说明 DLTS 谱峰的移动和深能级位置的移动确实来自超晶格内应力的作用,而且由此可以断定此深中心来源于超晶格的 GeSi 层.根据深中心对应力的敏感性,可以进一步推测这个深中心是与空位有关的位错或者是位错与空位的相互作用引起的. DLTS 谱峰的加宽效应也能用内应力作用很好的解释.实验测量的是有一定厚度的耗尽层区域,谱峰表现的是这个区域内信息的总和,而在这个厚度区域内,其应变和应力是不一样的,因此引起的深能级移动也不一样.在一定的范围内,其应力差别不会很大,引起的能级移动也相差不大,深能级位置差别较小,从而形成一定的准连续分布,表现在 DLTS 谱上就是谱峰的加宽.这种现象在弹性形变 Si 中有关位错中心 DLTS 谱上也能观察到,也是因为内建应变场对深中心的影响.

对于深中心 H,没有明显的谱峰移动和加宽,我们认为可能有两个原因:一是该深中心的压力移动系数很小,压力移动效应不明显;二是该深中心由失配位错引起的,主要集中在 GeSi 层与 Si 层的界面,失配位错使其周围的内应力释放或部分释放,此时局部应力较小甚至为零,因此深中心感受不到应力的影响,所以在 DLTS 谱上也观察不到谱峰的移动和加宽.深中心 L 能级位置、H 浓度与电压的关系为第二种推测提供了有力的证据.深中心 H 的浓度由表及里逐渐减少,说明失配位错减少,应力逐渐增加.深中心 H 的浓度和能级位置也与此一致,深中心 L 移动越大,受到内建应变场的影响越大,即内应力越大.指认深中心 H 由失配位错引起,H 的浓度越高,说明失配位错的密度越大,失配位错释放内应力越多,从而内应力变小,对深中心 L 的影响也越小.相反,深中心 H 的浓度越低,失配位错密度越低,释

放内应力越小,则深中心 L 受到的内应力越大,产生的深能级越深,DLTS 谱峰越往高温移动.这种 DLTS 谱本身的自洽性证明上述推测的正确性.

通过深中心位置在内应力作用下的移动还可以计算内应力大小.由前面讨论可知,内应力大小等于深中心在内应力作用下的移动乘以该深中心应力系数的倒数.下面以深中心 L 在内应力作用下的移动来推算相应内应力的大小.由于没有文献报导该位错中心的压力系数,参考 Si 的深能级压力系数,取 $\gamma = 6.59 \text{ meV/kba}$.以超晶格表面为参考零点,此处应力完全释放.深中心 L 的能级移动分别为 0.084、0.118 和 0.15eV.由此得到相应应变层的内应力分别为 12.7、17.9 和 22.8kba.由此可见应变超晶格的内应力不是均匀的,相反,不同层内应力差异很大,是根本不能忽略的.超晶格中 GeSi 层实测应力分布如图 4(实点)所示,其中深度值取测量区域的平均值.假定内应力分布线性变化,不难从理论上估算 GeSi 层内应力分布,其中参数值取自文献[19]和[20],且不区分超晶格中的 Si 层,结果如图 4 虚线所示.与实验结果比较,两者符合得相当好,应力分布的变化趋势基本一致.相反,如果已知应力分布,亦可从应力对深中心的移动求出深能级的应力系数来研究深中心的性质.实际上超晶格中的应力分布要比实验结果和粗略估算结果复杂.若对上述估算稍作改正,区分 GeSi 层与 Si 层(Si 层受到拉伸力,这里暂不考虑),结果如图 4 中实线所示,说明实验测量到是长程应力趋势.

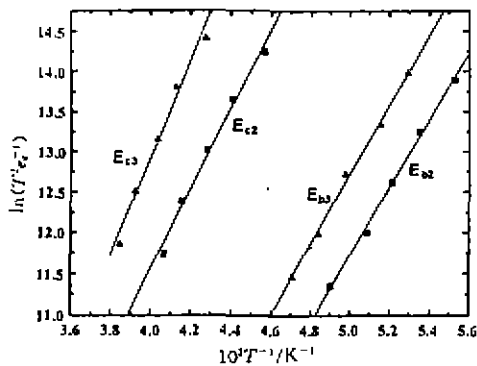


图 3 DLTS 测量的 Arrhenius 图

Fig. 3 Arrhenius plot of DLTS measurement

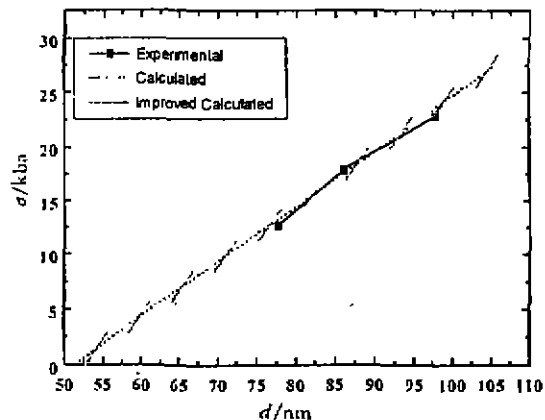


图 4 GeSi 超晶格中的应力分布

Fig. 4 Strain profile of GeSi superlattice

4 结论

我们研究了与位错有关的能级在应变 GeSi/Si 超晶格中的行为,对位错能级进行了指认.提出一种新的确定应变超晶格纵向应力分布的实验方法,即通过测量已知的应力系数深中心在不同层内能级的移动测量内应力分布.这种新方法克服了常用的 X-双晶衍射和喇曼声子谱缺点,可以比较准确地直接逐层求出应变层的内应力.对 GeSi/Si 超晶格样品测量表明,应变层内的应力在缓冲界面处最大,在应变超晶格层内应力随测量点到缓冲层界面的距离减小,直到临界厚度应力完全弛豫.

REFERENCES

- 1 People R. *Phys. Rev.*, 1985, **32**:1405
- 2 People R, Bean J C. *Appl. Phys. Lett.*, 1986, **48**:538
- 3 Walle C G Vande, Martin R M. *Phys. Rev. B*, 1986, **34**:5621
- 4 Englert Th, Abstreiter G, Pontcharra J. *Solid-State Electron.*, 1980, **23**:31
- 5 Cembali F, Fabbri E. *et al. Mater. Sci. Forum*, 1989, **38~41**:243
- 6 Walls R H, Żylbersztejn A, Besson J M. *Appl. Phys. Lett.*, 1981, **38**(9):698
- 7 李明复, 陈建新, 姚玉书, 等. *物理学报* (LI M F, CHEN J X, YAO Y S, *et al. Acta Physica Sinica*), 1985, **34**(8):1068
- 8 Zhou J, Wang L, Yao X C. *et al. Mater. Sci. Forum*, 1989, **38~41**:403
- 9 Hao Qiao, Xu Z Z, Zhang K M. *Superlatt. & Microstruct.* 1993, **14**(1):111
- 10 乔 皓. 博士学位论文. 复旦大学 (QIAO G. Doctor's Thesis, Fudan Univ.), 1993.
- 11 Ren S Y, Dow J D, Shen J. *Phys. Rev. B*, 1988, **38**:10677
- 12 Jantsch W, Wunstel K, *et al. Phys. Rev. B*, 1982, **25**:5515
- 13 Smid V, Zépan J, *et al. Mater. Sci. Forum.*, 1989, **38~41**:231
- 14 李复明. *物理学报* (LI F M. *Acta Physica Sinica*), 1985, **34**(12):1449
- 15 Brighten J C, Hawkins I D, *et al. J. Appl. Phys.*, 1994, **76**(7):4237
- 16 Grillot P N, Ringel S A, *et al. J. Appl. Phys.*, 1995, **77**(2):676
- 17 Schmalz K, Yassievich I N, *et al. Phys. Rev. B*, 1994, **50**(19):14287
- 18 Grillot P N, Ringel S A, *et al. J. Appl. Phys.*, 1995, **77**(7):3248
- 19 Hull R, Bean J C, *et al. Appl. Phys. Lett.*, 1992, **61**(23):2802
- 20 Fischer A, Richter H. *Appl. Phys. Lett.*, 1992, **61**(22):2656

LONGITUDINAL STRAIN PROFILE IN GESI/SI SUPERLATTICE

XIAO Jian-Fei¹⁾ FENG Song-Lin¹⁾ PENG Chang-Si²⁾

⁽¹⁾National Laboratory for Superlattices and Microstructures, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China; ⁽²⁾Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

Abstract n-Ge_{0.2}Si_{0.8}/Si strained superlattice grown by MBE was investigated using DLTS. Two deep centers related to dislocations were observed. One level was located at E_c-0.42eV; the other one had evident shift of the activation energy ranging from E_c-0.21eV to E_c-0.276eV when the reverse bias increased from 2V to 4V, which was considered to be the results of built-in strain. When the stress coefficient of the deep level was taken as $r = 6.59 \text{ kba/meV}$, the profile of strain was obtained, which is in agreement with the theoretical result. On this basis a new method which determines the longitudinal strain profile in the strained structure was given by the stress effect on the deep levels.

Key words GeSi/Si, strained superlattice, strain, DLTS.