

低维结构中的应变效应的研究

汤乃云*

(中国科学院上海技术物理研究所, 上海, 200083)

1 引言

半个世纪以来, 半导体的研究在当代物理学和高技术的发展中都占有突出的地位。这是因为半导体不仅具有极其丰富的物理内涵, 而且其性能可置于不断发展的精密工艺控制之下, 传统的晶体管、集成电路及很多其他半导体电子元件都是明显的例证。半导体超晶格和微结构则是近年来开拓的新领域, 它在一个新的水平上体现了半导体的上述特点。量子阱、超晶格的早期研究主要集中在 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 材料上。这是由于这两种材料界面平整, 缺陷、位错很少, 质量较高。随着研究的发展, 人们希望研制其它半导体材料组成的量子阱和超晶格, 但发现自然界中两种晶格常数相等或相近的半导体材料组合是很少的, 大多数量子阱和超晶格结构的晶格常数是不匹配的。由晶格失配达百分之几的材料来组成量子阱和超晶格结构可以提供大量的新型半导体材料, 极大地发展了量子阱和超晶格材料的种类和应用。因此人们开始研究生长晶格常数不匹配的量子阱和超晶格, 并发现, 若失配在一定限度内 (小于 7%), 只要每层材料的厚度不超过一个临界厚度, 就可依靠弹性形变补偿晶格常数之间的差别, 在界面不会产生位错或缺陷。这样形成的超晶格中存在一定的弹性形变, 称为应变超晶格。Osborn 首先制备出高质量的应变超晶格^[1]。

2 应变超晶格理论研究

如果组成超晶格的两种材料的晶格常数相等, 或者失配度 $\Delta a/a$ 小于 0.5%, 则生长出超晶

格的质量比较好, 不会因晶格常数失配而引起晶体中的内应力甚至位错缺陷。目前研究和应用得最多的 GaAs/AlGaAs 超晶格就属于这种类型。但是, 实际的半导体中两种材料晶格常数相等的情形几乎没有, 见图 1。

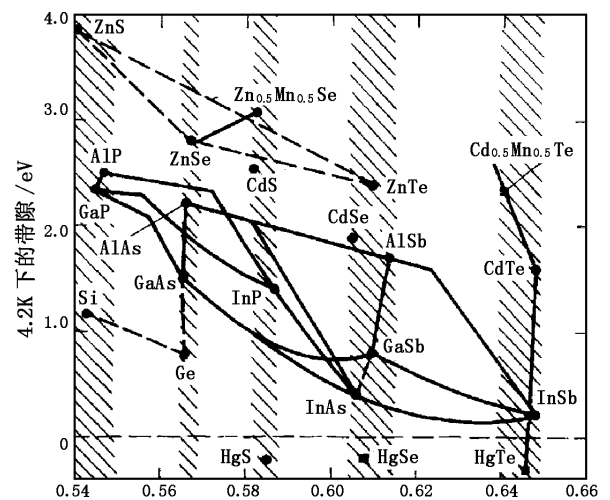


图 1 各种半导体材料的晶格常数和带隙

一般利用三元合金或四元合金法, 以求得两种材料的晶格常数尽量匹配。但是, 晶格常数失配或多或少存在。实验发现, 只要失配度不是很大, 超晶格每层厚度不是很大, 则两种材料会发生弹性形变, 以在平行方向上达到一个统一的平衡的晶格常数 a , 并仍保持晶体的结构性质, 这种超晶格称为应变超晶格, 见图 2。生长量子阱超晶格结构前两种材料交替排列, 生成量子阱超晶格结构后晶格常数发生变化, 但呈现一一对应的晶格结构, 同时由图可见, 如果衬底厚度比薄层材料的层厚大得多, 晶格畸变和应力主要发生在薄层材料内部。

* 2002 级博士研究生

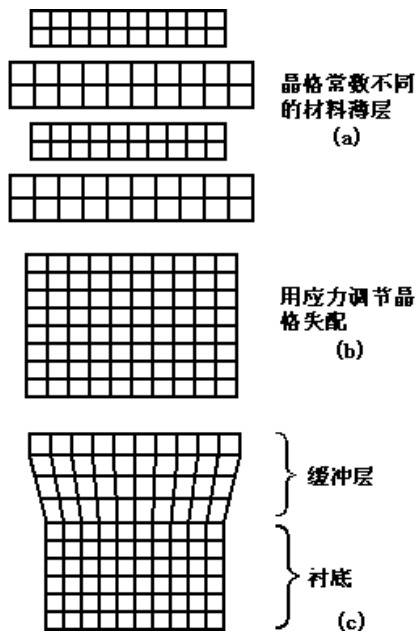


图 2 两种材料形成超晶格示意图

对于组成超晶格的三元或四元合金，其晶格常数等参数可适用 Vegard 定律利用二元化合物的参数进行线性内插，如图 3。

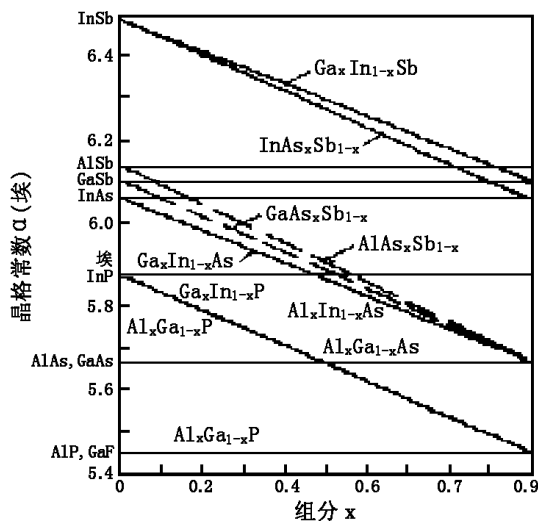


图 3 III - V 族化合物二元合金的晶格常数随组分的变化

如果令生长超晶格的两种材料的晶格常数分别为 a_1 和 a_2 ，则生长后沿垂直生长方向和平行生长方向的晶格常数分别为^[2-6]：

$$a_{\parallel} = a_1 \left[1 + \frac{fG_2h_2}{G_1h_1 + G_2h_2} \right] = a_2 \left[1 - \frac{fG_2h_2}{G_1h_1 + G_2h_2} \right]$$

$$a_{i\perp} = a_i \left[1 - D^i(a/a_i - 1) \right]$$

$$G_i = 2 \left(c_{11}^i + 2c_{12}^i \right) \left(1 - D^i/2 \right)$$

式中， G_i 为切变系数。

应变层超晶格生长的临界厚度是一个在应变层超晶格生长中的实际问题。由于在应变层中存在弹性形变能，对应一定的应变分量，存在一临界厚度 h_c 。当应变层厚度小于 h_c 时，应变层中无位错，保持高质量，否则，将出现大量位错，破坏弹性形变。

在临界厚度研究中，目前存在两个理论模型，即力学平衡模型和能量平衡模型^[7,8]。在力学平衡模型中，位错的产生是由力平衡的破坏所产生，当由失配作用到位错线上的应力超过位错内部的张力时，产生位错。在能量平衡模型中，失配位错是由能量平衡破坏产生的，当薄层的面应变能量密度超过形成一个螺旋位错所需的能量密度时，产生位错。研究表明， $GexSi_{1-x}/Si$ 应变超晶格的能量平衡模型与实验符合较好， $InxGaxAs/GaAs$ 超晶格的力学平衡模型与实验符合较好。

由于晶体在平行和垂直于界面方向上的伸缩，其中应变分量 (e_{ij}) 定义为平行于量子阱表面：

$$e_{xx} = e_{yy} = \left(\frac{a}{a_i} - 1 \right)$$

垂直于量子阱表面：

$$e_{zz} = \left(- \frac{2c_{12}}{c_{11}} e_{xx} \right)$$

在应变超晶格内，由于发生弹性形变，要维持这种形变就有一定的应力，这种应力称为内应力。另一方面，人们通过外加应力的方法，如流体静压力、单轴应力等改变超晶格的电子结构，研究它们的特性，这种应力称为外应力。

根据固体物理理论，一个物体的应变由六个应变分量描述，其应力主要为双轴压应力，可等效为单轴应力和流体静压力。

流体静压力是只引起晶体体积压缩而不改变其对称性的各向同性压应力，它对半导体能

带结构及光吸收边行为的影响是通过晶格常数的变化来实现的。引起能带本征值的移动而不引起简并能带的分裂，见图 4。

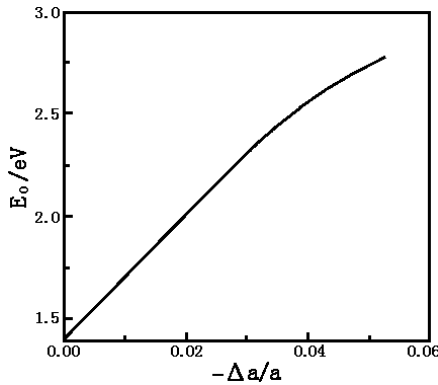


图 4 GaAs 直接禁带宽度和晶格常数畸变的关系

单轴应力使晶体偏离立方结构，改变了晶体的对称性而不改变晶体体积，引起简并能带的分裂而不改变分裂能带的平均值。如图 5 所示，随着单轴应力的增大，轻空穴带上升，重空穴带下降^[9]。

对于 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 应变超晶格，单轴应力的作用使轻重空穴分别上升和下降，电子和重空穴被约束在 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 层中，轻空穴被约束在 GaAs 势垒层，形成第二类量子阱^[10]。

应变使 3 度简并的价带分裂成非简并能带 $E_{\nu(1)}$ 和 2 度简并能带 $E_{\nu(2)}$ 。平均价带可表示为：

$$E_{\nu,av} = [2E_{\nu(2)} + E_{\nu(1)}] / 3$$

而自旋轨道分裂使 2 度简并能带 $E_{\nu(2)}$ 进一步分裂成非简并能带。形变后的导带为：

$$E_c = E_{\nu,av} + \frac{\Delta_0}{3} + E_{g,0} + E_{hc}$$

计及应变后的价带可表示如下：

$$\begin{aligned} E_{\nu,1} &= E_{av} - \frac{\Delta_0}{6} + \frac{\delta E_t}{4} + E_{hv} \\ &+ \frac{1}{2} \left[\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E_t + \frac{9}{4} (\delta E_t)^2 \right]^{1/2} \\ E_{\nu,2} &= E_{av} + \frac{\Delta_0}{3} + E_{hv} - \frac{\delta E_t}{2} \\ &- \frac{1}{2} \left[\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E_t + \frac{9}{4} (\delta E_t)^2 \right]^{1/2} \end{aligned}$$

对于应变超晶格中的能带计算，常用的有有限差分法、有限元法、传递矩阵法、包络函数等。其跃迁能量可表示为：

$$E_{e \rightarrow lh} = E_c + E_{lh} + E_{g,lh}$$

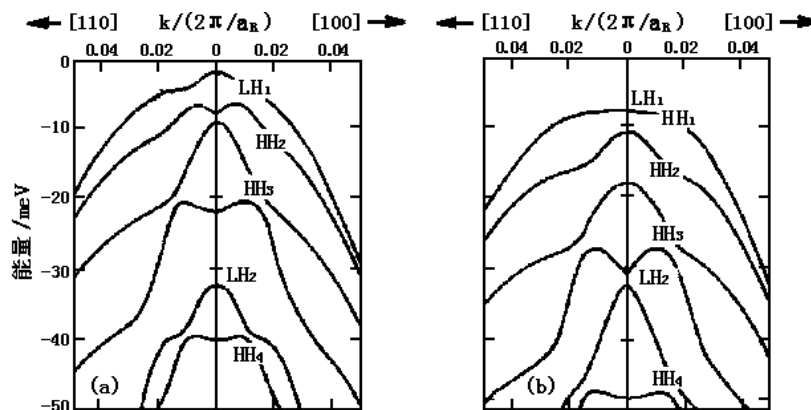
$$E_{e \rightarrow hh} = E_c + E_{hh} + E_{g,hh}$$

在超晶格或量子阱中，由于元素的互扩散，必须考虑界面混合效应导致的组分变化可能带来的应力的变化。

界面混合引起的组分变化可由下式表示：

$$yp(z) = y_0 \times 0.5 \times \left[\text{erf} \left(\frac{L_z + 2z}{4L_d} \right) + \text{erf} \left(\frac{L_z - 2z}{4L_d} \right) \right]$$

$$\text{erf} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$$



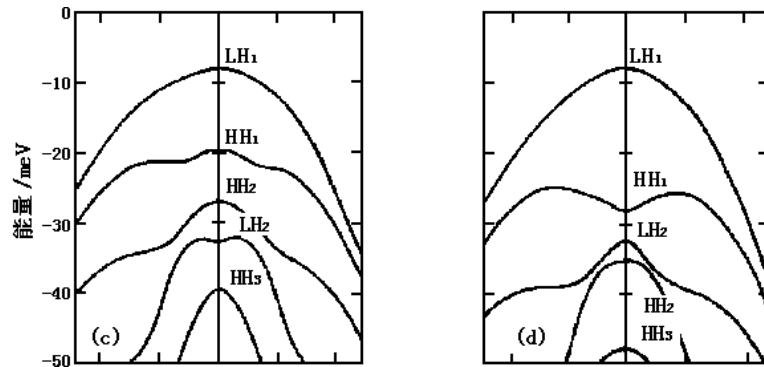


图 5 阱宽为 19.2nm 的 GaAs/Al_{0.25}Ga_{0.75}As 量子阱的空穴子带随单轴应力的变化
(a) P=0MP, (b) P=230MP, (c) P=700MP

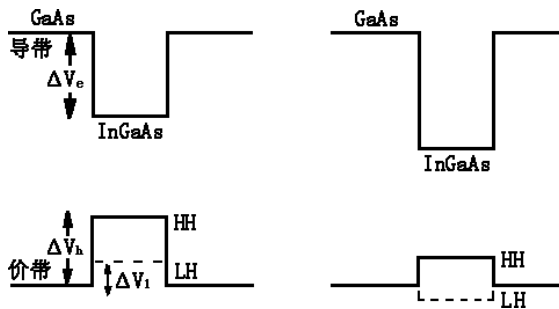


图 6 InGaAs/GaAs 超晶格两种可能的价带带阶情形

3 应变超晶格的器件应用

3.1 长波长激光器

与光纤通讯相匹配的长波长 GaInAsP/InP 激光器有一个主要问题, 就是阈值电流对温度十分敏感, 主要与价带间吸收和俄歇复合有关, 其机理来源与重空穴带上空穴分布有关。一个理想的半导体激光器, 它的能带结构应该是: 导带和价带都有小的有效质量, 因为如果价带空穴的有效质量和导带电子的一样小, 则它的态密度也小, 这样就使得价带间吸收和俄歇复合的概率大大减小, 有利于实现粒子数反转。但通常的半导体不是这样, 最上面的价带是重空穴带, 它的有效质量远大于电子有效质量。Osborn 首先从理论上预言, 在应变超晶格中, 如果量子阱材料在平面内受到压缩, 在生长方向伸长, 第一空穴子带的平行生长平面的有效质量就会减小。近年来, 应变超晶格激光器的研制已取得了很大进展, 阈值电流大大降低,

T_0 相应提高^[11,12]。

3.2 光电探测器

光纤通讯除需要与之相匹配的长波长激光器外, 还需要有红外光电探测器。以往的光电探测器都是将 Ge 或者 InGaAs/InP 探测器和 Si 集成电路做在各自的芯片上, 人们希望将探测器和集成电路做在同一个 Si 芯片上, 这样既简化工艺, 又可利用非常成熟的 Si 工艺技术。最早的尝试是 Ge pin 结单晶生长在 Si 衬底上, 晶格失配产生刃位错引起室温下相当高的反向偏置寄生漏电流^[13]。

于是提出了利用 Ge_xSi_{1-x}/Si 应变超晶格制造波导红外探测器^[14]。当 $x > 0.5$ 时, 带隙低于纯 Ge 的带隙, 适合于制造波导红外探测器, 同时加入缓冲层, 防止高密宽的位错进入超晶格。

4 结束语

应变超晶格增加了超晶格的种类, 同时由于晶格中存在弹性形变, 影响到它的能带结构, 增加一种可剪裁能带的手段。最近, 人们对温度、量子阱宽度、材料组分、衬底取向等对生长出的量子阱性质的影响进行了广泛研究, 取得了一定进展^[15], 但是覆盖层对量子结构的应变、失配位错和能带结构的影响还没有报道。同时, 扩散效应带来的应力变化、近表面量子阱结构中的应变问题、量子点结构中的应变弛豫问题等均需进一步的研究。

参考文献

- [1] Osbourn G C. J Appl Phys. 1982. 53:1586.
- [2] Van de Wall C G. Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory. Phys. Rev., 1989, B39:1871.
- [3] C. G. Van de Walle and R. M. Martin, Phys. Rev. B 38(1987) 8154.
- [4] S. Satpathy, R. M. Martin and C. G. Van de Walle, Phys. Rev. B 38(1988)13273.
- [5] T. Ishikawa and J. E. Bowers IEEE J. Quantum Elect. QE-30, (1994)562.
- [6] Landolt-Bornstein, Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology. Vol. 17a (Springer, Berlin, 1982).
- [7] Matthews J W, Blakeslee A E, J Cryst Growth, 1974, 27:118.
- [8] People R bean J C. Appl Phys Lett, 1985, 47:332.
- [9] Platero G, Altarelli M. Phys Rev, 1987, B36:6591.
- [10] Marzin J y, Charasse M n, Sermage B. Phys Rev, 1985, B 31:8298.
- [11] Tanbou-Ek T, Logan R A, Temkin H, et al. Appl Phys Lett, 1989, 55:2283.
- [12] Wu M C, Olosson N A, Sivco D et al. Appl Phys Lett, 199, 56:221.
- [13] Luryi, S, Pearsall T P, Temkin H, et al. IEEE electron Device lett, 1984, ED-13:1135.
- [14] Luryi S Pearsall T P, Temkin H, et al. IEEE electron Device lett 1986, EDL-7, 104.
- [15] T. S. Moise, L. J. Guido and R. C. Barker, Phys. Rev. B 47, 6758(1993).

简 讯

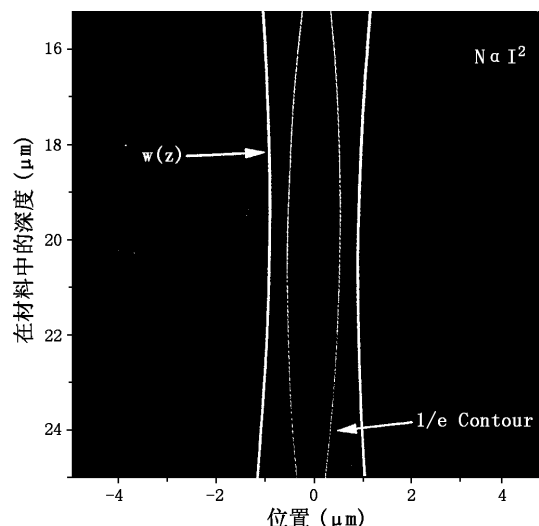
用双光子方法测试电路

由美国海军研究实验室研究出来的一种新的双光子吸收技术可用来测试半导体的辐射灵敏度，从而可把用于空间和地面先进仪器的集成电路做得更坚固。当一个高能粒子或者一个光子穿过一个电路时，它会在很小的局部留下电荷痕迹，后者会产生一些单一事件效应，例如丢失数据、错误的结果或者器件故障等。由于集成电路都用不透明的材料封装，因此这种单一事件效应最易在高能粒子密集的空间环境中发生。然而，人们更关心在地面或者航空应用中的器件所涉及到的这一问题。

通常的激光技术向被测试的半导体注射具有适当能量的单个光子以便让半导体吸收并产生缺陷。新技术使用的是低能量的光子，一个光子本身的能量还不足于产生单一事件效应，但当两个或者两个以上的光子在聚焦区相互作用时，就会造成电荷的沉积。这种技术使得用户可在半导体的特定深度处制造缺陷，从而测绘出器件的三维辐射灵敏度。

为了证明这种原理，人们对一个运算放大器和一个电压比较器结点中发生的单一事件的瞬态进行了比较。人们发现，用 1.26 μm 的钛：蓝宝石抽运的双光子吸收结构的激光放大器所产生的结果等效于单光子技术中 590nm 激光器所产生的结果。通过对一个晶体管表面以下部分的探查，人们对这种新技术的三维测

绘能力也进行了试验，从而测定了与深度有关的器件灵敏度的分布，这种数据用其它技术是无法测得的。据有关专家说，新技术的最大优点是能够通过芯片从背面检查器件，这将使那些用普通技术无法评估的器件也能得到评估。



一种新的双光子吸收技术使得用户能够通过引入可控制的缺陷来调查辐射对电子器件的影响。从图中可以看出，由波长为 1.26 μm 、功率为 1nJ、持续时间为 120fs 的激光脉冲在硅中产生的载流子集中在激光焦点 $w(z)$ 的附近

□ 顾聚兴