

Температурная зависимость остаточных механических напряжений в эпитаксиальных пленках GaAs/Si(100) по данным спектроскопии фотоотражения

© Р.В. Кузьменко[¶], А.В. Ганжа, О.В. Бочурова, Э.П. Домашевская, Й. Шрайбер[†], С. Хильдебрандт[†], Ш. Мо^{*}, Э. Пайнер^{*}, А. Шлахетцкий^{*}

Воронежский государственный университет (физический факультет),
394693 Воронеж, Россия

[†]Fachbereich Physik der Martin-Luther-Universität Halle-Witteberg,
D-06108 Halle/Saale, Deutschland

^{*}Institut für Halbleitertechnik der Technischen Universität Braunschweig,
D-38106 Braunschweig, Deutschland

(Получена 25 мая 1999 г. Принята к печати 11 июня 1999 г.)

В области температур $T = 10 \div 300$ К при помощи спектроскопии фотоотражения исследована температурная зависимость остаточных механических напряжений в эпитаксиальных пленках n -GaAs (толщина $1 \div 5$ мкм, концентрация электронов $10^{16} \div 10^{17}$ см⁻³), выращенных на подложках Si(100). Количественный анализ показывает, что спектры фотоотражения, измеряемые в энергетической области перехода E_0 GaAs, двухкомпонентны и состоят из электромодеуляционной компоненты, обусловленной переходом "валентная подзона $|3/2; \pm 1/2\rangle$ -зона проводимости", и низкоэнергетической экситонной компоненты. Величина механических напряжений определяется из значения деформационно-индуцированного сдвига энергии фундаментального перехода из подзоны $|3/2; \pm 1/2\rangle$ по отношению к ширине запрещенной зоны ненапряженного эпитаксиального материала, $E_0(T) - E_0^{[3/2; \pm 1/2]}(T)$. Обнаруженное увеличение энергетического сдвига $E_0 - E_0^{[3/2; \pm 1/2]}$ от 22 ± 3 мэВ при 296 К до 29 ± 3 мэВ при 10 К указывает на рост биаксиального напряжения растяжения при понижении температуры.

Основные рабочие элементы оптико-информационных систем в настоящее время изготавливаются на основе прямозонных полупроводниковых соединений $A^{III}B^V$. С другой стороны, кремний является основным материалом полупроводниковой индустрии, и в ближайшее время он не может быть заменен арсенидом галлия или другими полупроводниковыми соединениями $A^{III}B^V$. Возможный путь дальнейшего развития технологии изготовления оптико-информационных систем мог бы заключаться в соединении преимуществ полупроводников $A^{III}B^V$ с достижениями кремниевой технологии, т.е. в объединении на одном кремниевом чипе различных электронных и оптоэлектронных элементов. Это позволило бы достигнуть высокой плотности интеграции элементов, большой скорости обработки сигнала и высокой надежности, исходя из высокой термической проводимости и твердости материалов. Кроме этого, низкая стоимость кремниевых подложек должна привести к резкому снижению стоимости оптико-информационных систем [1].

Одной из основных проблем гетероэпитаксиальной технологии выращивания является минимизация остаточного механического напряжения в эпитаксиальном слое, вызывающего движение центров безызлучательной рекомбинации (точечных дефектов и дислокаций) в активную область и существенно понижающего срок службы полупроводникового лазера [2]. Известно, что механические напряжения в эпитаксиальном слое GaAs, выращенном на кремниевой подложке, могут возникнуть

из-за: а) различия в величине постоянных решеток пленки и подложки ($a_{Si} = 0.5431$ нм, $a_{GaAs} = 0.5653$ нм [3] и б) различия в коэффициентах теплового расширения материалов ($\alpha_{Si} = 2.60 \cdot 10^{-6}$ К⁻¹, $\alpha_{GaAs} = 5.90 \cdot 10^{-6}$ К⁻¹ при 300 К [3]). Для системы GaAs/Si напряжение в эпитаксиальном слое, связанное с несовпадением решеток, должно быть биаксиальным напряжением сжатия. Однако в области температур выращивания, обычно применяемых для эпитаксиального роста пленок (700 \div 1100 К), оно полностью снимается путем генерации дислокаций в области границы раздела [4,5]. Разница в коэффициентах расширения приводит при охлаждении образцов от температуры роста до комнатной температуры к возникновению биаксиального напряжения растяжения в эпитаксиальном слое [4]. Однако в [4,6] сообщалось, что величины механических напряжений, экспериментально определенные при комнатной температуре, существенно ниже вычисленных теоретически (исходя из значений коэффициентов теплового расширения материалов). Поэтому предполагается, что при охлаждении образца от температуры роста до некоторой критической температуры T_c напряжение растяжения в пленках также снимается путем генерации дислокаций и только при достижении температуры T_c этот процесс прекращается.

Проблема высокоточного определения механических напряжений в тонких эпитаксиальных пленках в широком интервале температур в рамках одного метода исследований до сих пор не может считаться окончательной решенной [7]. Одним из наиболее перспективных методов исследования является применение оптической

[¶] E-mail: phssd2@main.vsu.ru

модуляционной спектроскопии фотоотражения (ФО). В рамках этого метода для расчета механического напряжения используется деформационно-индуцированное изменение энергии электронных оптических переходов, определяемое по энергетическому сдвигу спектральных структур. Преимуществами метода являются высокое спектральное разрешение (~ 1 мэВ) в широком интервале температур, возможность исследования тонких слоев (с толщинами $d \geq 100$ нм), высокое поверхностное разрешение (до $\sim 20 \times 20$ мкм²) и возможность сканирования по глубине пленки. Несмотря на эти преимущества, об использовании спектроскопии ФО для определения остаточных напряжений в гетероструктурах A^{III}B^V/Si сообщалось только в немногих работах [8–11].

В наших предыдущих работах [12,13] были проанализированы результаты измерений фотоотражения, проведенных при комнатной температуре на образцах GaAs/Si и InP/Si с толщинами эпитаксиальных слоев от 1 до 5 мкм. При анализе спектров мы исходили из того, что основным механизмом, ответственным за возникновение спектральных компонент, является электромодуляция. Для количественного анализа спектров использовалась модель, учитывающая расщепление валентной зоны под действием напряжения и наличие в спектрах ФО низкоэнергетических компонент (экситонные компоненты). Результаты показали, что в области межзонных переходов преобладающий спектральный вклад соответствует электронному оптическому переходу из подзоны $|3/2; \pm 1/2\rangle$ ($E_0^{[3/2; \pm 1/2]}$), причем соответствующая компонента измеряется в среднеполевом режиме. Поэтому для определения остаточных механических напряжений в пленках GaAs и InP был использован энергетический сдвиг по отношению к энергии перехода E_0 в объемном ненапряженном материале, $E_0 - E_0^{[3/2; \pm 1/2]}$.

В настоящей работе исследуются спектры ФО, измеренные на гетероэпитаксиальных образцах GaAs/Si и гомоэпитаксиальных образцах GaAs/GaAs в интервале температур $T = 10 \div 300$ К. Для количественного анализа спектров нами было предпринято расширение математической модели, учитывающее обусловленный понижением температуры переход среднеполевой электромодуляционной межзонной компоненты в низкополевую. Полученные путем количественного анализа спектров зависимости $E_0(T)$ и $E_0^{[3/2; \pm 1/2]}(T)$ используются для расчета температурной зависимости остаточных механических напряжений $\sigma(T)$.

Изготовление образца

Исследованные пленки GaAs были выращены в Институте полупроводниковой техники Технического университета г. Брауншвайг на кремниевых подложках ориентации (100) при помощи газофазной эпитаксии из паров металлоорганических соединений в горизонтальном реакторе низкого давления с исходными веществами

арсином (AsH₃) и триметилгаллия (TMGa). После 20-минутной очистки в H₂SO₄:H₂O₂:H₂O подложки кремния были промыты в деионизованной воде. После этого следовало 30-секундное травление в 5%-м растворе HF для удаления возможных остатков оксида и повторная промывка в деионизованной воде. Перед эпитаксиальным ростом для удаления возможных оксидов проводится термический отжиг кремниевой подложки в атмосфере водорода (15 мин при температуре 950°C). Для предотвращения появления антифазных доменов в эпитаксиальном слое в процессе охлаждения при температуре 750°C была проведена 3-минутная обработка поверхности в атмосфере AsH₃. Процесс выращивания эпитаксиальной пленки начинается с роста буферного слоя при 400°C, толщиной 14 нм, при соотношении компонент в газовой фазе $B^V/A^{III} = 4$. На созданном таким образом буфере при 700°C выращивается основной слой GaAs (для слоя толщиной 2 мкм при давлении 50 мбар требуется 60 мин), при этом соотношение элементов B^V/A^{III} в газовой фазе равно 80. Толщина основного слоя в исследованных образцах варьируется в пределах 1–5 мкм. Материал, использовавшийся для выращивания пленок, был нелегированным, однако диффузия атомов Si из подложки приводит к легированию пленки на уровне $n = 10^{15} \div 10^{17}$ см⁻³ [14].

Для получения зависимости $E_0(T)$ были проведены исследования ФО гомоэпитаксиальных образцов n -GaAs/ n^+ -GaAs (100) с концентрациями носителей заряда $n = 10^{16} \div 10^{17}$ см⁻³, $n^+ = 10^{18}$ см⁻³ и толщинами эпитаксиальных слоев $d = 2 \div 5$ мкм.

Экспериментальная установка

Эксперименты по ФО проводились в Институте полупроводниковой техники Технического университета г. Брауншвайг и Лаборатории оптических исследований Университета Мартина Лютера г. Галле. Измерение спектров осуществлялось в энергетической области $E = 1.20 \div 1.65$ эВ с помощью красного He–Ne-лазера ($\lambda = 632.8$ нм). Плотность лазерного возбуждения L лежала в области $0.01 \div 10$ Вт/см². Частота модуляции при измерениях варьировалась от 100 до 300 Гц. Изменение сигнала отражения ΔR фиксировалось при помощи двухканального фазочувствительного усилителя SR850. На установке могли быть измерены сигналы ФО с амплитудами до $5 \cdot 10^{-6}$. Для охлаждения образцов был использован гелиевый криостат, температура образцов изменялась в пределах $10 \div 320$ К. Величина пятна зондирующего света на образце, определяющая площадь анализируемой поверхности, варьировалась в пределах от 100×100 до 1000×1000 мкм². Увеличение размеров пятна не приводило к изменению формы спектра, что свидетельствует о высокой однородности образцов. Дополнительные возможности при анализе спектров связаны с использованием методики фазового анализа [15,16].

Теоретические основы моделирования E_0 -спектров фотоотражения при наличии механического напряжения

В области E_0 -перехода структура деформационно-индуцированных спектров ФО должна быть промоделирована с учетом изменения зонной структуры. Вырождение E_0 -перехода для GaAs в ненапряженном состоянии ведет к двум наложенным друг на друга оптическим переходам из подзон $|3/2; \pm 3/2\rangle$ и $|3/2; \pm 1/2\rangle$ в соответствии с формулой

$$\frac{\Delta R}{R} = a_{|3/2; \pm 3/2\rangle} \frac{\Delta R^{|3/2; \pm 3/2\rangle}}{R_{E_0^{|3/2; \pm 3/2\rangle}}} + a_{|3/2; \pm 1/2\rangle} \frac{\Delta R^{|3/2; \pm 1/2\rangle}}{R_{E_0^{|3/2; \pm 1/2\rangle}}}, \quad (1)$$

где ΔR представляет собой фотоиндуцированное изменение сигнала отражения, $E_0 = E_0^{|3/2; \pm 3/2\rangle} = E_0^{|3/2; \pm 1/2\rangle}$ — энергии переходов из валентных подзон, а коэффициенты $a_{|3/2; \pm 3/2\rangle}$, $a_{|3/2; \pm 1/2\rangle}$ — амплитудные факторы соответствующих спектральных компонент. Амплитудные факторы зависят от матричного элемента перехода и эффективной массы носителей заряда в подзонах [17,18].

Электромодуляционные межзонные компоненты ФО могут иметь среднеполевую или низкополевую форму спектральной линии. Форма спектральной линии определяется отношением энергетического параметра уширения перехода Γ к величине электрооптической энергии $\hbar\Omega$,

$$\hbar\Omega = \left(\frac{e^2 F^2 \hbar^2}{8\mu_{\parallel}} \right)^{1/3}, \quad (2)$$

где e — элементарный заряд, F — поверхностное электрическое поле, \hbar — постоянная Планка и μ_{\parallel} — приведенная эффективная электронно-дырочная масса по направлению электрического поля. В среднеполевом случае $\Gamma < 3\hbar\Omega$, а в низкополевом $\Gamma \geq 3\hbar\Omega$.

В среднеполевом режиме межзонные спектральные E_0 -компоненты имеют главный пик в области перехода E_0 и высокоэнергетические осцилляции Франца–Келдыша, период которых через равенство (2) определяется значением поверхностного электрического поля. Различие в значениях приведенных эффективных электронно-дырочных масс обеих валентных подзон ($\mu^{|3/2; \pm 3/2\rangle} \neq \mu^{|3/2; \pm 1/2\rangle}$) ведет к небольшому различию в значениях электрооптических энергий, которое отражается в различных периодах осцилляций Франца–Келдыша.

Математическая модель для описания формы среднеполевой линии должна включать в себя такие физические параметры, как энергия оптического перехода E , напряженность электрического поля F , глубина проникновения поверхностного электрического поля d_F , энергия уширения Γ и уровень модуляции поверхностного электрического поля при освещении ξ ($0 \leq \xi \leq 1$).

Используемая нами модель носит название обобщенной многослойной модели и подробно описывается в работах [12,16].

При доминирующем влиянии энергии уширения низкополевая структура имеет вид так называемой кривой третьей производной и описывается математически как третья производная немодулированного спектра отражения [19]. Для моделирования низкополевых электро-модулированных компонент необходимо знание энергии перехода E , энергии уширения Γ и фазового угла φ .

При биаксиальной деформации в направлениях [100] и [010] симметрия решетки цинковой обманки понижается до тетрагональной [17]. Деформация решетки снимает вырождение валентной зоны в точке $\Gamma(0, 0, 0)$. При этом энергии электронных оптических переходов могут быть рассчитаны по следующим формулам [1,20]:

$$E_0^{|3/2; \pm 3/2\rangle} = E_0 + \left[\frac{2a}{C_{11} + 2C_{12}} - \frac{b}{C_{11} - C_{12}} \right], \quad (3)$$

$$E_0^{|3/2; \pm 1/2\rangle} = E_0 + \left[\frac{2a}{C_{11} + 2C_{12}} + \frac{b}{C_{11} - C_{12}} \right], \quad (4)$$

где $\sigma_{\parallel} > 0$ для напряжения растяжения и $\sigma_{\parallel} < 0$ для напряжения сжатия, a — гидростатический деформационный потенциал, b — деформационный потенциал сдвига, а C_{11}, C_{12} — коэффициенты упругости. Для расчетов в данной работе были использованы значения параметров из работы [3].

Напряжение растяжения сдвигает энергии обоих переходов в сторону низких энергий по отношению к переходу E_0 в ненапряженном материале. При этом энергетический сдвиг для перехода из подзоны $|3/2; \pm 1/2\rangle$ сильнее, чем для перехода из подзоны $|3/2; \pm 3/2\rangle$.

Дальнейшее влияние механических напряжений на электромодуляционную E_0 -компоненту GaAs должно проявиться в изменении соотношения амплитудных факторов компонент подзон из-за изменения эффективных масс носителей заряда в подзонах [17].

Перечисленные выше эффекты приводят к энергетическому сдвигу моделируемой спектральной структуры, зависящему от механического напряжения, и изменению формы линий спектра вследствие новой суперпозиции компонент.

Пример моделирования среднеполевого E_0 -спектра ФО GaAs в рамках формализма обобщенной многослойной модели для различных значений биаксиальных напряжений показан на рис. 1. Соотношение амплитуд $a^{|3/2; \pm 1/2\rangle} / a^{|3/2; \pm 3/2\rangle} = 2$, используемое при моделировании для усиления эффекта изменения спектральной формы, существенно выше значения для ненапряженного материала $a^{|3/2; \pm 1/2\rangle} / a^{|3/2; \pm 3/2\rangle} = 0.5$ [21,22]. Из рисунка видно, что в случае малых напряжений результирующая спектральная структура из-за небольшой разницы в значениях переходов E_0 , на первый взгляд, имеет вид однокомпонентной среднеполевой линии (спектр I). Механическое напряжение в этом случае может быть определено только из ее деформационно-индуцированного энергетического сдвига. Для больших

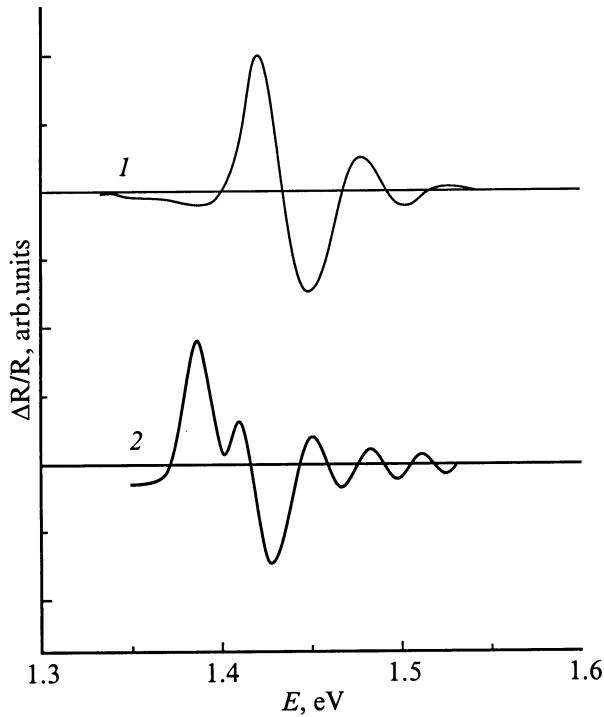


Рис. 1. Модельные среднеполевые электромультипликативные спектры ФЭ для биаксиально напряженного GaAs. Параметры расчета: $F = 4 \cdot 10^6$ В/м, $d_F = 400$ нм, $\Gamma = 7$ мэВ, $\xi = 1$, $a_{|3/2;\pm 1/2\rangle}/a_{|3/2;\pm 3/2\rangle} = 2$. 1 — $\sigma_{||} = 0.5$ кбар, $E_0^{|3/2;\pm 3/2\rangle} = 1.421$ эВ, $E_0^{|3/2;\pm 1/2\rangle} = 1.418$ эВ; 2 — $\sigma_{||} = 3.9$ кбар, $E_0^{|3/2;\pm 3/2\rangle} = 1.409$ эВ, $E_0^{|3/2;\pm 1/2\rangle} = 1.385$ эВ.

значений механических напряжений наряду с энергетическим сдвигом спектральной структуры обнаруживается появление плечевой структуры в области высокоэнергетического склона главного пика, указывающей на наличие близко лежащих электронных переходов ("структуры расщепления", спектр 2). При этом положение пиков в первом приближении может интерпретироваться как энергетическое положение переходов из подзон.

В случае низкополевых спектров нужно также исходить из того, что деформационно-индуцированное расщепление валентной зоны приводит к появлению двух низкополевых компонент с различными энергиями переходов и амплитудами. На рис. 2 представлены два промоделированных низкополевых спектра для биаксиально напряженного GaAs. Из рисунка видно, что деформационно-индуцированное расщепление валентной зоны визуально обнаруживается только в том случае, если оно превышает энергию уширения.

Проведенные расчеты показывают влияние "расщепления" валентной зоны и энергетического сдвига. Однако, поскольку для исследованных образцов ожидаются относительно "низкие" значения остаточных механических напряжений ($\sigma_{||} < 3.9$ кбар) и, как следствие, относительно малые значения расщепления, появление

существенных "структур расщепления" в E_0 -спектрах образцов GaAs/Si не ожидается.

Поскольку экспериментальные E_0 -спектры ФЭ подложек или эпитаксиального GaAs, измеренные в широком интервале температур, содержат, как правило, не только электромультипликативную E_0 -компоненту, но и спектрально наложенную низкоэнергетическую компоненту, приписываемую экситонным переходам и хорошо описываемую формулой Аспнеса с параметром $n = 2$ [16,22,23], адекватная модель для количественного анализа экспериментальных спектров ФЭ должна содержать в себе также математический аппарат и для ее моделирования. В спектре ФЭ, промоделированном с учетом экситонных эффектов, возникают спектральные особенности, напоминающие "структуры расщепления" [13].

Таким образом, понятна трудность, возникающая из возможной многозначности интерпретации экспериментальных спектральных структур. Исходя из этого, высокоточный количественный анализ спектральных структур, измеряемых на образцах GaAs/Si, возможен только в рамках многокомпонентной подгонки всей спектральной линии, использующей две электромультипликативные E_0 -компоненты и две экситонные компоненты (E_{exc}) с различными энергиями переходов $E_0^{|3/2;\pm 3/2\rangle} \neq E_0^{|3/2;\pm 1/2\rangle}$, $E_{exc}^{|3/2;\pm 3/2\rangle} \neq E_{exc}^{|3/2;\pm 1/2\rangle}$ и различными амплитудными факторами. Кроме этого, для доказательства наличия низкоэнергетических компонент в спектре должен быть привлечен один из дополнительных экспериментальных методов, например, фазовый анализ [15,16,23].

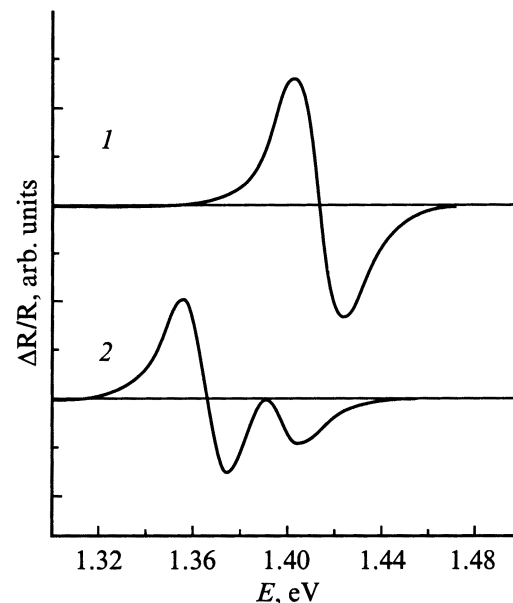


Рис. 2. Модельные низкополевые электромультипликативные спектры ФЭ для биаксиально напряженного GaAs. Параметры расчета: $\Gamma = 20$ мэВ, $\varphi = 50^\circ$, $a_{|3/2;\pm 1/2\rangle}/a_{|3/2;\pm 3/2\rangle} = 2$; 1 — $\sigma_{||} = 1.1$ кбар, $E_0^{|3/2;\pm 3/2\rangle} = 1.418$ эВ, $E_0^{|3/2;\pm 1/2\rangle} = 1.411$ эВ; 2 — $\sigma_{||} = 4.9$ кбар, $E_0^{|3/2;\pm 3/2\rangle} = 1.396$ эВ, $E_0^{|3/2;\pm 1/2\rangle} = 1.365$ эВ.

Количественный анализ спектров фотоотражения, измеренных при комнатной температуре [13]

На рис. 3 представлены E_0 -спектры ФО, полученные для гомоэпитаксиальных образцов GaAs/GaAs(100) и гетероэпитаксиальных образцов GaAs/Si(100) [13,14].

В спектрах ФО гомоэпитаксиальных образцов в области главного пика проявляются различные формы линий, являющихся результатом наложения экситонной и среднеполевой компонент. Все спектры имеют примерно одинаковые положения главного пика вблизи энергии перехода для объемного ненапряженного материала $E_0 = 1.425$ эВ.

На гетероэпитаксиальных образцах также измеряются спектры ФО со среднеполевыми электромультипликативными компонентами (на их наличие указывают высокоэнергетические осцилляции Франца-Келдыша). Эти спектры сдвинуты по отношению к спектрам гомоэпитаксиальных образцов в область низких энергий, что указывает на уменьшение энергий переходов всех их спектральных компонент. Низкоэнергетическое смещение спектров соответствует наличию остаточной деформации растяжения в пленках. В области высокоэнергетического склона главного пика спектров наблюдаются спектральные особенности — пики или перегибы.

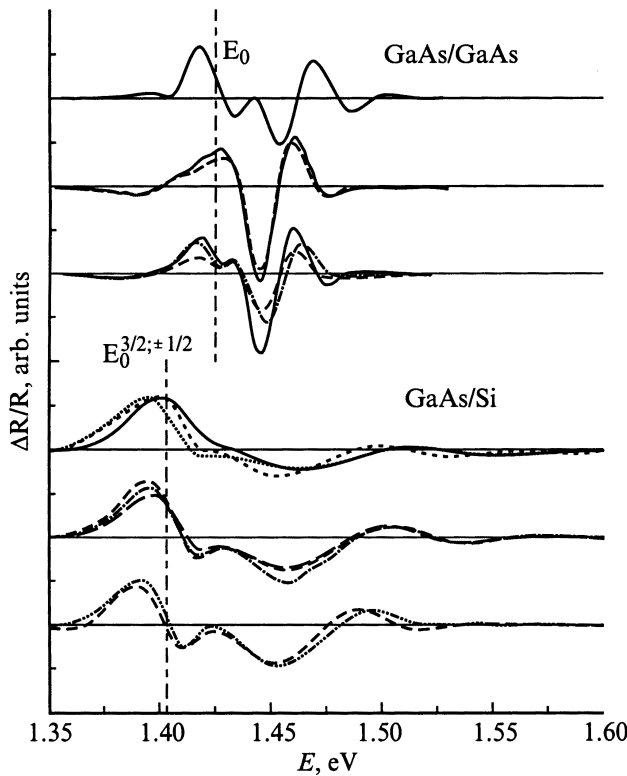


Рис. 3. Сравнение типичных экспериментальных E_0 -спектров ФО гомоэпитаксиальных образцов GaAs/GaAs (вверху) и гетероэпитаксиальных образцов GaAs/Si (внизу).

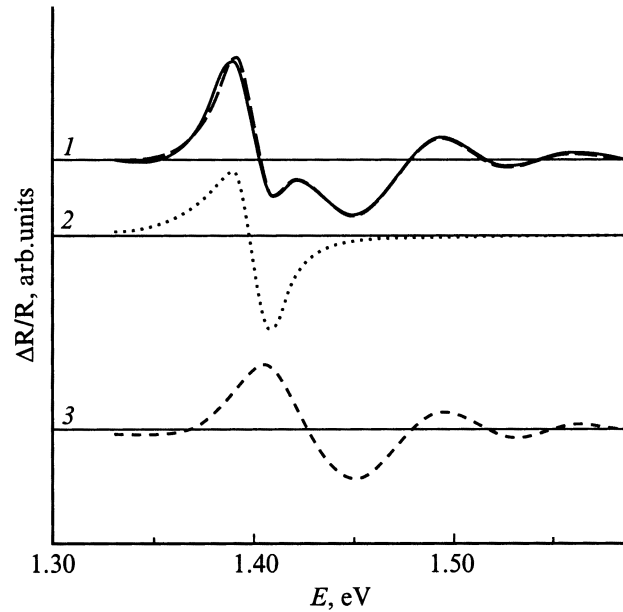


Рис. 4. Моделирование типичного спектра ФО GaAs/Si. 1 — экспериментальный спектр ФО (сплошная линия) и его подгонка (штриховая). 2, 3 — выделенные при анализе спектральные компоненты. 2 — экситонная компонента: $E_{exc} = 1.403$ эВ, $\Gamma = 18$ мэВ; 3 — среднеполевая компонента: $E_0^{[3/2;\pm 1/2]} = 1.406$ эВ, $F = 9.25 \cdot 10^6$ В/м, $\Gamma = 14$ мэВ.

Для выявления деформационно-индуцированного характера экспериментальные спектры ФО были проанализированы в рамках описанной выше многокомпонентной модели. Для моделирования использовались две среднеполевые и две экситонные компоненты с варьируемыми значениями энергий переходов и амплитудных факторов. Результаты показывают (см. рис. 4), что экспериментальные спектры могут быть промоделированы одной экситонной и одной среднеполевой компонентой, причем их суперпозиция описывает экспериментальную линию во всей спектральной области. Все предпринятые нами попытки подгонки с использованием двух среднеполевых компонент с отношением амплитудных факторов, превышающих величину $a^{[3/2;\pm 1/2]} / a^{[3/2;\pm 3/2]} = 0.1$, не привели к успеху. Таким образом, в рамках проведенного анализа возникновение высокоэнергетического плеча или "структур расщепления" в экспериментальных спектрах объясняется наложением одной среднеполевой и одной экситонной компонент. При этом спектральные компоненты в соответствии с их энергетическим положением и из сравнения с результатами предыдущих работ [8,10,12] должны быть приписаны переходам из подзоны $|3/2;\pm 1/2\rangle$. Отсутствие в спектре заметных вкладов переходов из подзоны $|3/2;\pm 3/2\rangle$ вызывает некоторое удивление, поскольку, хотя по модельным представлениям и ожидается уменьшение значения амплитудного фактора для компоненты подзоны $|3/2;\pm 3/2\rangle$, он по порядку величины все же должен остаться срав-

нимым с амплитудным фактором компоненты подзоны $|3/2; \pm 1/2\rangle$.

Проведенный фазовый анализ спектров также подтверждает наличие в спектре низкоэнергетических компонент. В случае наличия в спектре одних только электро-модуляционных компонент подзон в качестве экспериментальной фазовой линии ожидается прямая, поскольку их возникновение и затухание описывается одинаковыми временными законами. Между тем, экспериментальная фазовая диаграмма имеет петлевую структуру, что указывает на наличие второй, низкоэнергетической, компоненты с иной фазой сигнала [15].

Исходя из результатов проведенного количественного анализа экспериментальных спектров величины остаточных напряжений в эпитаксиальных слоях могут быть определены только из изменения энергии перехода E_0 для подзоны $|3/2; \pm 1/2\rangle$: $E_0 - E_0^{[3/2; \pm 1/2]}$. В качестве среднего значения энергии перехода E_0 объемного GaAs нами было использовано значение $E_0 = 1.425$ эВ [3]. Проведенный количественный анализ спектров гетероэпитаксиальных образцов GaAs/Si показывает, что значения энергии перехода $E_0^{[3/2; \pm 1/2]}$, независимо от толщины слоя GaAs, группируются около величины $E_0^{[3/2; \pm 1/2]} = 1.403 \pm 0.003$ эВ. Использование разности между приведенными значениями для вычисления механического напряжения с помощью формулы (4) приводит к величине биаксиального напряжения растяжения $\sigma_{||} = 1.88 \pm 0.16$ кбар.

Спектры фотоотражения в области температур 12 ÷ 300 К

Измерения спектров ФО в интервале температур 12 ÷ 300 К имели целью определение температурной зависимости остаточных механических напряжений в эпитаксиальных слоях GaAs. Для оценки остаточных механических напряжений из величины деформационно-индуцированного сдвига $E_0 - E_0^{[3/2; \pm 1/2]}$ также был необходим количественный анализ измеренных в той же области температур спектров ФО гомоэпитаксиальных образцов.

На рис. 5 показана типичная для исследованных гетероэпитаксиальных образцов экспериментальная температурная зависимость спектров ФО. Наблюдаемое уменьшение периода осцилляций Франца–Келдыша и их одновременное затухание указывают на спад напряженности поверхностного электрического поля, вызванный понижением температуры. Уменьшение напряженности электрического поля при понижении температуры для *n*-GaAs объясняется в [24] сдвигом энергетического положения уровня Ферми на поверхности в направлении от середины запрещенной зоны в сторону зоны проводимости.

Количественный анализ спектров, проведенный в рамках алгоритма многокомпонентной подгонки, показывает, что E_0 -спектр гетероэпитаксиального образца сохра-

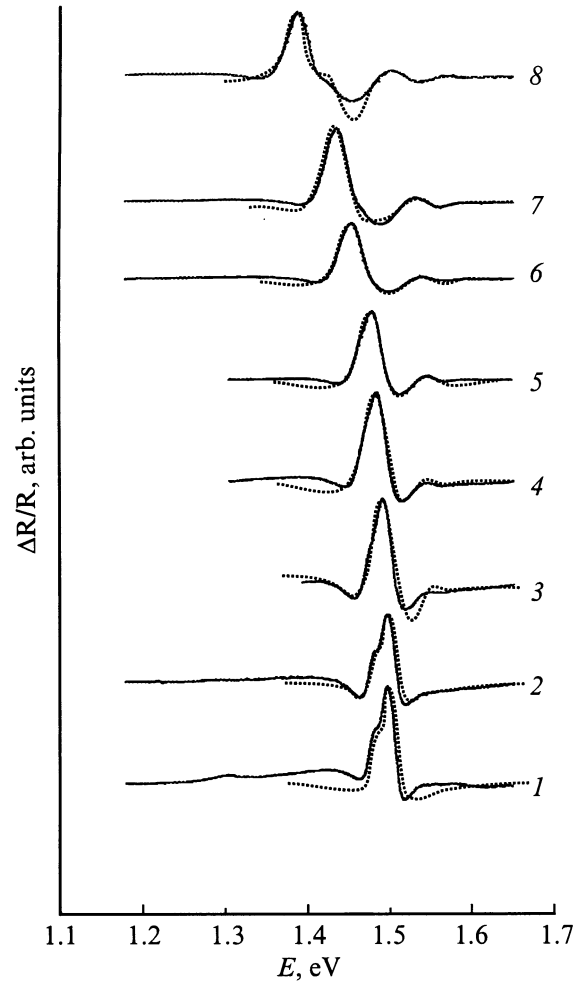


Рис. 5. Экспериментальная температурная зависимость спектра ФО образца GaAs/Si (толщина слоя GaAs $d = 2.5$ мкм) (сплошные линии) и его моделирование (пунктирные). T, K : 1 — 13, 2 — 20, 3 — 60, 4 — 80, 5 — 100, 6 — 160, 7 — 200, 8 — 296.

няет свой двухкомпонентный характер во всем интервале температур, однако из-за уменьшения темнового поверхностного электрического поля, вызванного понижением температуры, "межзонная" электро-модуляционная $E_0^{[3/2; \pm 1/2]}$ -компонента измеряется при низких температурах не в среднеполевом, а в низкополевом режиме. Таким образом, моделирование спектров в области температур $T \geq 80$ К было проведено путем использования одной среднеполевой и одной экситонной компонент, а в области низких температур — одной низкополевой и одной экситонной компонент. Характерно, что, хотя понижение температуры и ведет к изменению энергий переходов обеих компонент, энергетическое расстояние между их энергиями переходов остается практически постоянным.

Также необходимо отметить, что в спектрах исследованных образцов GaAs/Si даже в области низких температур наблюдается большее энергетическое ушире-

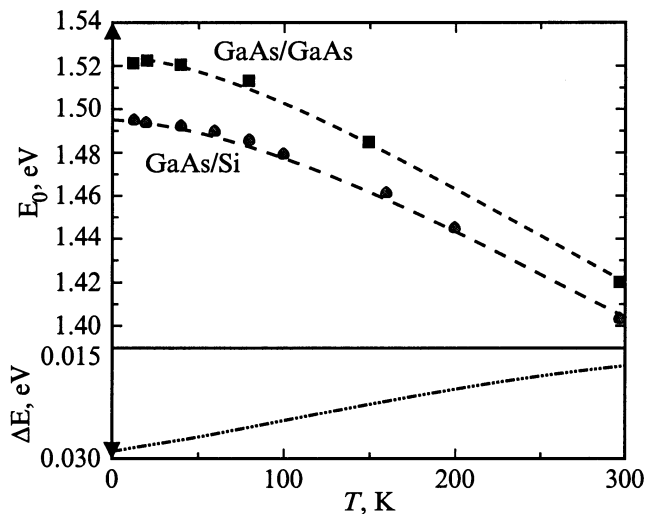


Рис. 6. Зависимости $E_0(T)$ для гомоэпитаксиального и гетероэпитаксиального GaAs (вверху) и сдвиг $\Delta E(T) = E_0(T) - E_0^{[3/2;\pm 1/2]}(T)$ (внизу).

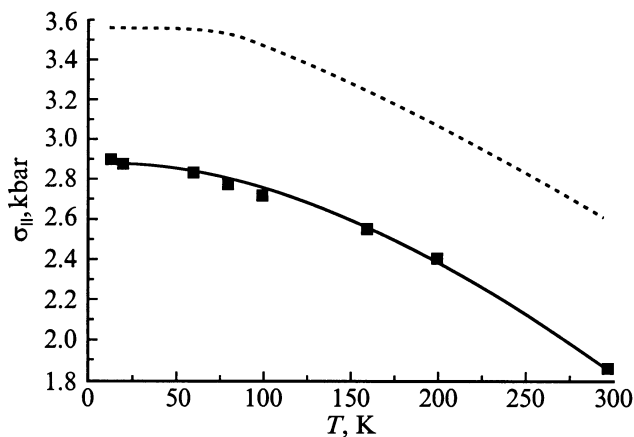


Рис. 7. Теоретическая (штриховая линия) и полученная из количественного анализа спектров ФО (сплошная линия) температурные зависимости остаточного механического напряжения $\sigma_{||}$ в эпитаксиальных пленках GaAs/Si (100).

ние спектральных структур, чем в гомоэпитаксиальных образцах, что, по-видимому, обусловлено повышенной концентрацией дефектов кристаллической структуры.

Полученные из многокомпонентного количественного анализа спектров ФО гомоэпитаксиальных и гетероэпитаксиальных образцов температурные зависимости $E_0(T)$ и $E_0^{[3/2;\pm 1/2]}(T)$ представлены на рис. 6. Температурная зависимость $E_0(T)$ хорошо описывается зависимостью Варшни. Обнаруженный сдвиг $\Delta E(T) = E_0(T) - E_0^{[3/2;\pm 1/2]}(T)$ представлен в нижней части рисунка. Из рисунка видно, что понижение температуры приводит к увеличению ΔE , однако практически линейный рост ΔE в интервале температур 300 ÷ 100 К при переходе в область низких температур замедляется

и ΔE стремится к насыщению. Причина этого эффекта, по-видимому, заключается в уменьшении разности в значениях коэффициентов теплового расширения GaAs и Si в области низких температур [3].

Из величины сдвига $\Delta E = E_0(T) - E_0^{[3/2;\pm 1/2]}(T)$ путем использования выражения (4) может быть проведена оценка температурной зависимости остаточных механических напряжений в эпитаксиальных слоях GaAs. Полученная для исследованных образцов зависимость $\sigma_{||}(T)$ представлена на рис. 7. Усреднение проводилось по результатам измерений на 10 образцах. Зависимость величины биаксиального напряжения от толщины эпитаксиального слоя для исследованных образцов не была обнаружена. Хотя ход полученной температурной зависимости качественно и соответствует ожидаемому из теории поведению остаточных механических напряжений в системе GaAs/Si, рассчитанному из температурной зависимости коэффициентов теплового расширения материалов [14] (см. рис. 7), наблюдается отклонение полученных величин в сторону меньших значений. Причиной такого расхождения является использование в теоретических расчетах в качестве исходной температуры — температуры роста пленки, с которой начинается возникновение напряжений. Таким образом, полученный результат подтверждает высказанное в литературе предположение о том, что при охлаждении в области температур, превышающих некую критическую температуру T_c , напряжение растяжения в пленках снимается путем генерации дислокаций, и только при достижении температуры T_c процесс снятия напряжений прекращается. Полученная зависимость хорошо согласуется с известными из литературы [14,25] экспериментальными данными.

Заключение

В работе исследовалась структура деформационно-индуцированных E_0 -спектров ФО полупроводниковой системы GaAs/Si, полученных в интервале температур 10 ÷ 300 К. Анализ экспериментальных спектров проведен в рамках модели, учитывающей возможную многокомпонентность спектров. Результаты анализа показывают, что спектры ФО во всем интервале температур являются двухкомпонентными и представляют собой спектральное наложение электромодуляционной межзонной компоненты и низкоэнергетической экситонной компоненты. Путем анализа экспериментальных данных показано, что обе компоненты формируются при участии электронных оптических переходов из подзоны $|3/2; \pm 1/2\rangle$. Наблюдаемый при понижении температуры переход от среднеполювого к низкополювому режиму для электромодуляционной межзонной компоненты обусловлен понижением напряженности поверхностного электрического поля.

Зависимость биаксиального механического напряжения от температуры $\sigma_{||}(T)$ в эпитаксиальных пленках GaAs установлена из величины деформационно-индуцированного сдвига $E_0 - E_0^{[3/2;\pm 1/2]}$, найденного как результат количественного анализа спектров ФО гетероэпитаксиальных и гомоэпитаксиальных образцов. Обнаруженное расхождение между теоретической и экспериментальной зависимостями $\sigma_{||}(T)$ подтверждает высказанное в литературе предположение о генерации дислокаций, снимающих напряжение растяжения в области высоких температур.

Авторы глубоко признательны немецкому исследовательскому обществу (Deutsche Forschungsgemeinschaft) за финансовую поддержку работы в рамках гранта Schl 9/25-1, 2, Schr 428/3-1, 2 и Российскому фонду фундаментальных исследований за финансовую поддержку работы в рамках гранта РФФИ 96-15-96496.

Список литературы

- [1] S.F. Fang, K. Adomi, S. Iyer, H. Morkoc, H. Zabel. J. Appl. Phys., **68**, R31 (1990).
- [2] J.P. van der Ziel, R.D. Dupuis, R.A. Logan, C.J. Pinzone. Appl. Phys. Lett., **51**, 89 (1987).
- [3] *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, Landolt-Börnstein, ed. by K.-H. Hellwege, O. Madelung (Springer Verlag, Heidelberg, 1984).
- [4] M. Sugo, N. Uchida, A. Yamamoto, T. Nishoka, M. Yamaguchi. J. Appl. Phys., **65**, 591 (1992).
- [5] H.-H. Wehmann, G.-P. Tang, A. Schlachetzki. Sol. St. Phenomena, **32-33**, 445 (1993).
- [6] G. Landa, R. Carles, C. Fontaine, E. Bedel, A. Munoz-Yague. J. Appl. Phys., **66**, 196 (1989).
- [7] F.H. Pollak. *Annual Reports, Mater. Res. Soc. Fall Meeting* (Boston, 1995).
- [8] T. Kanata, H. Suzawa, M. Matsunaga, T. Takakura, Y. Hamakawa, H. Kato, T. Nishino. Phys. Rev. B, **41**, 2936 (1990).
- [9] N. Bottka, D.K. Gaskill, R.J.M. Griffiths, R.R. Bradley, T.B. Joyce, C. Ito, D. McIntyre. J. Cryst. Growth, **93**, 481 (1988).
- [10] A. Dimoulas, P. Tzanetakis, A. Georgakilas, O.J. Glemboki, A. Christou. J. Appl. Phys., **67**, 4389 (1990).
- [11] M. Dutta, H. Shen, S.M. Vernon, T.M. Dixon. Appl. Phys. Lett., **57**, 1775 (1990).
- [12] S. Mo, E. Peiner, A. Bartels, G.-P. Tang, A. Schlachetzki, R. Kusmenko, S. Hildebrandt, J. Schreiber. Japan. J. Appl. Phys., **35**, 4238 (1996).
- [13] Р.В. Кузьменко, А.В. Ганжа, О.В. Бочурова, Э.П. Домашевская, Й. Шрайбер, С. Хильдебрандт, Ш. Мо, Э. Пайнер. ФТТ, **41**, 725 (1999).
- [14] *Abschlußbericht zum Forschungsvorhaben "Optimierung von II/V-Si-Heterostrukturen"*, Schl 9/25-1, 2, Schr 428/2-1, 2 (DFG, März 1997).
- [15] А.В. Ганжа, В. Кирхер, Р.В. Кузьменко, Й. Шрайбер, С. Хильдебрандт. ФТП, **32**, 272 (1998).
- [16] S. Hildebrandt, M. Murtagh, R. Kusmenko, W. Kircher, G.M. Crean, J. Schreiber. Phys. St. Sol. (a), **152**, 147 (1995).
- [17] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М., Наука, 1972).
- [18] H. Shen, M. Dutta. J. Appl. Phys., **78**, 2151 (1995).
- [19] D.E. Aspnes. Surf. Sci., **37**, 418 (1973).
- [20] H. Asai, K. Oe. J. Appl. Phys., **54**, 45 (1983).
- [21] R.A. Batchelor, A.C. Brown, A. Hamnett. Phys. Rev. B, **41**, 1401 (1990).
- [22] J.P. Estrera, W.M. Duncan, R. Glosser. Phys. Rev. B, **49**, 1781 (1994).
- [23] Р. Кузьменко, А. Ганжа, Й. Шрайбер, С. Хильдебрандт. ФТТ, **39**, 2123 (1997).
- [24] C.R. Lu, J.R. Anderson, D.R. Stone, W.T. Beard, R.A. Wilson, T.F. Kuech, S.L. Wright. Phys. Rev. B, **43**, 11791 (1991).
- [25] H. Shen, M. Dutta, D.W. Eckart, K.A. Jones, S.M. Vernon, T.M. Dixon. J. Appl. Phys., **68**, 369 (1990).

Редактор Л.В. Шаронова

Temperature dependent investigations of the residual stresses in epitaxial layers GaAs/Si (100) on the photoreflectance spectroscopy data

R.V. Kusmenko, A.V. Gansha, O.V. Bochurova, E.P. Domashevskaya, J. Schreiber[†], S. Hildebrandt[†], S. Mo*, E. Peiner*, A. Schlachetzki*

Voronezh State University,
394693 Voronezh, Russia

[†]Fachbereich Physik

der Martin-Luther-Universität Halle-Witteberg,
D-06108 Halle/Saale, Bundesrepublik Deutschland

*Institut für Halbleitertechnik

der Technischen Universität Braunschweig,
D-38106 Braunschweig, Bundesrepublik Deutschland

Abstract In the temperature range of 10–300 K the dependence of the residual stresses in epitaxial n -GaAs ($d = 1 \div 5 \mu\text{m}$, $n = 10^{16} \div 10^{17} \text{cm}^{-3}$) grown on the substrate of Si (100) has been investigated by means of photoreflectance spectroscopy. A quantitative analysis of the photoreflection spectra for GaAs/Si semiconductor structures in the E_0 fundamental gap region of GaAs reveals that they prove to be two-component. The contribution of "valence subband $|3/2; \pm 1/2\rangle$ -conduction band transitions" and the low-field excitonic components have been determined. The values of the residual stresses in the whole temperature range were calculated by a deformation-induced shift of the fundamental subband $|3/2; \pm 1/2\rangle$ transition energy in relation to the band gap of the unstrained material: $E_0(T) - E_0^{[3/2;\pm 1/2]}(T)$. The determined increase in the energy shift $E_0 - E_0^{[3/2;\pm 1/2]}$ from $22 \pm 3 \text{ meV}$ at 296 K to $29 \pm 3 \text{ meV}$ at 10 K indicates an increment of tensile stress with the decrease of temperature.