

密级：公开      保密期限：

# 北京邮电大学

## 硕士研究生学位论文



题目： Si基GaAs异变外延及Si基异变量子点的研究

学    号： 2011111735

姓    名： 王一帆

专    业： 电子科学与技术

导    师： 任晓敏

学    院： 信息光子学与光通信研究院

二〇一三年十二月



## 独创性（或创新性）声明

本人声明所呈交的论文是本人在导师指导下进行的研究工作及取得的研究成果。尽我所知，除了文中特别加以标注和致谢中所罗列的内容以外，论文中不包含其他人已经发表或撰写过的研究成果，也不包含为获得北京邮电大学或其他教育机构的学位或证书而使用过的材料。与我一同工作的同志对本研究所做的任何贡献均已在论文中作了明确的说明并表示了谢意。

申请学位论文与资料若有不实之处，本人承担一切相关责任。

本人签名：\_\_\_\_\_ 日期：\_\_\_\_\_

## 关于论文使用授权的说明

学位论文作者完全了解北京邮电大学有关保留和使用学位论文的规定，即：研究生在校攻读学位期间论文工作的知识产权单位属北京邮电大学。学校有权保留并向国家有关部门或机构送交论文的复印件和磁盘，允许学位论文被查阅和借阅；学校可以公布学位论文的全部或部分内容，可以允许采用影印、缩印或其它复制手段保存、汇编学位论文。（保密的学位论文在解密后遵守此规定）

本学位论文不属于保密范围，适用本授权书。

本人签名：\_\_\_\_\_ 日期：\_\_\_\_\_

导师签名：\_\_\_\_\_ 日期：\_\_\_\_\_





## Si基GaAs异变外延及Si基异变量子点的研究

### 摘 要

本文介绍北京邮电大学研究生学位论文  $\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  模板的使用方法。本模板基本符合北京邮电大学研究生院培养与学位办公室于 2004 年 1 月 6 日颁布的《北京邮电大学关于研究生学位论文各式的统一要求》。

中、英文摘要位于声明的次页，摘要应简明表达学位论文的内容要点，体现研究工作的核心思想。重点说明本项科研的目的和意义、研究方法、研究成果、结论，注意突出具有创新性的成果和新见解的部分。

关键词是为文献标引工作而从论文中选取出来的、用以表示全文主题内容信息的术语。关键词排列在摘要内容的左下方，具体关键词之间以均匀间隔分开排列，无需其它符号。

关键词： $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ ， $\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ ，CJK，模板，排版，论文



## ABSTRACT

This article presents, the  $\text{\LaTeX}$  thesis template for doctor/master thesis of Beijing University of Posts and Telecommunications, and briefly introduces the usage. The template fulfills the corresponding format requirements issued by academic administration of Beijing University of Posts and Telecommunications Graduate School on January 6, 2004.

The Chinese and English abstract should appear after the declaration page. The abstract should present the core of the research work, especially the purpose and importance of the research, the method adopted, the results, and the conclusion.

Key words are terms selected for documentation indexing, which should present the main contributions of the thesis. Key words are aligned at the bottom left side of the abstract content. Key words should be separated by spaces but not any other symbols.

**KEY WORDS:**  $\text{\TeX}$ ,  $\text{\LaTeX}$ , CJK , template , typesetting , thesis





# 目 录

第一章 绪论 .....	1
1.1 研究背景 .....	1
1.2 技术难点 .....	2
1.3 研究现状 .....	2
参考文献 .....	2
第二章 实验技术及设备简介 .....	3
2.1 生长设备 .....	3
2.2 表征设备 .....	6
参考文献 .....	9
第三章 GaAs/Si异变外延两步法生长 .....	11
3.1 GaAs/Si异变外延两步法生长，问题，目标 .....	11
3.2 衬底处理 .....	14
3.3 分项优化 .....	15
3.3.1 低温缓冲层温度的优化 .....	15
3.3.2 低温缓冲层厚度的优化 .....	16
3.3.3 低温缓冲层种类的优化 .....	16
3.4 结论 .....	17
参考文献 .....	17
第四章 GaAs/Si异变外延三步法生长 .....	19
4.1 三步法动机+存在的问题+所以我们优化了+我们对比了+可能可以做的更好+怎么做了+对比 .....	19
4.2 三步法优化方法 .....	19
4.3 两步法与三步法的比较 .....	19
4.3.1 中间温度层温度的优化 .....	19
4.3.2 插入循环退火 .....	19
4.4 InGaAs/GaAs应变超晶格的优化 .....	19
4.5 InGaAs/GaAs、AlGaAs/GaAs、GaAsP/GaAs应变超晶格的比较 .....	19

4.6 结论 .....	19
参考文献 .....	19
<b>第五章 GaAs/Si异变外延插入量子点位错阻挡层 .....</b>	<b>21</b>
5.1 背景 .....	21
5.2 量子点生长.....	21
5.2.1 单层量子点的生长 .....	21
5.2.2 多层量子点的生长 .....	21
5.2.3 与GaAs基量子点对比 .....	21
5.3 量子点做位错阻挡层的GaAs/Si异变外延生长 .....	21
参考文献 .....	21
<b>第六章 绪论 .....</b>	<b>23</b>
6.1 中文信息处理软件的国内外发展现状 .....	23
6.2 本说明的主要内容 .....	25
参考文献 .....	25
<b>附录 A 不定型 (0/0) 极限的计算 .....</b>	<b>27</b>
<b>附录 B 缩略语表 .....</b>	<b>29</b>
<b>致 谢 .....</b>	<b>31</b>
<b>攻读学位期间发表的学术论文目录 .....</b>	<b>33</b>

## 符号对照表

$(\cdot)^*$	复共轭
$(\cdot)^T$	矩阵转置
$(\cdot)^H$	矩阵共轭转置
$\mathbf{X}$	矩阵或向量
$\mathcal{A}$	集合
$\mathcal{A} \times \mathcal{B}$	集合 $\mathcal{A}$ 与集合 $\mathcal{B}$ 的 Cartesian 积, 即 $\mathcal{A} \times \mathcal{B} = \{(a, b) : a \in \mathcal{A}, b \in \mathcal{B}\}$



# 第一章 绪论

## 1.1 研究背景

随着社会的发展与科学技术的进步，人们对信息服务的需求量与日俱增，信息产业已经成为关系国计民生的支柱性产业。世界各国纷纷投入大量的资金、人力、物力，致力于发展本国的信息产业，美国“信息高速公路”，韩国“IT大运河”，欧盟“宽带战略”等等，信息产业已经成为体现一个国家综合国力的重要指标。为了适应全球信息产业革命的进程，《国家中长期科学和技术发展规划纲要》明确提出：到2020年，我国要“掌握一批事关国家竞争力的装备制造业和信息产业核心技术，使制造业和信息产业技术水平进入世界先进行列。”作为现代信息技术的主要载体，光传输网络的发展在我国信息产业建设中起着举足轻重的作用。所以，光网络的发展就成为我国信息产业建设的首要任务。同时，这种战略上的重大需求也给人们带来了各种技术上的挑战。如何建设功能更强、可靠性更好，功耗及成本更低、体积更小、使用维护更方便的光通信网络，成为信息技术研究人员所关注的热点。

显然，为了实现以上研究目标，单纯地依靠网络层面的优化是远远不够的，基础器件层面的进展更能够带动光通信网络的重大发展。目前，光通信器件还大多是相互独立，依靠传统的技术手段将其连接，组合成光网络。为了进一步降低成本，减小器件体积，光电子集成(即光电子器件之间，光电子与微电子器件之间的集成)就成为光通信器件的大势所趋。我们知道，制备光电子器件(如激光器，探测器，放大器等等)的基本材料都是半导体材料，尤其是III-V族半导体材料，为了实现不同器件之间的集成，不同的半导体材料之间的异质兼容就成为一个重要的研究方向。目前，光电子器件主要是GaAs基与InP基器件，微电子器件则是以Si基为主，而且，Si基造价低廉，应用广泛，且对于1.3-1.6  $\mu\text{m}$ 的通信波长范围，Si是透明的，所以，Si基与GaAs基器件的异质兼容，一方面对光电子集成具有重大意义，另一方面能够有效地降低器件的制作成本。

自1963年阿尔费洛夫和克罗默两位科学家提出了半导体双异质结构以来，光电子器件经过了将近半个世纪的发展，已经取得了丰硕的成果，为光通信产业的快速发展起到了不可替代的推动作用。然而，相对于目前已经发展成熟的Si基大规模集成电路而言，光电子器件的集成度还不可同日而语。因此，将Si与III-V族材料集成

成为了长期以来一个重要的研究方向。

## 1.2 技术难点

## 1.3 研究现状

我来占个位置。 [1]

## 参考文献

- [1] 北京邮电大学研究生院培养与学位办公室. 关于研究生学位论文格式的统一要求 [EB/OL]. 2004 [2008-08-06]. <http://www.bupt.edu.cn/>.

## 第二章 实验技术及设备简介

### 2.1 生长设备

现代半导体材料科学重点研究基于各种半导体微结构的光电信息功能材料，与之相对应，半导体材料主流制备技术也由拉单晶、液相外延等体材料、厚膜材料生长技术转向气相外延、真空淀积等超薄层、低维量子结构材料生长技术。现有的外延生长技术手段主要有液相外延、气相外延、分子束外延、金属有机物化学气相沉积，表2-1将这几种技术做了详尽的比较。

表 2-1 外延生长技术手段

外延生长方法	发明时间	特点	优势	劣势
液相外延 (Liquid Phase Epitaxy)	1963	从过饱和溶液中析出固相物质并沉积在衬底上	简单；纯度高	扩展性和均匀性差
气相外延 (Vapor Phase Epitaxy)	1958	采用金属卤化物运输	简单；纯度高	不能外延所有合金；没有突变界面；外延层较厚
分子束外延 (Molecular Beam Epitaxy)	1958-1967	在超高真空条件下沉积外延层	过程简单；外延薄膜纯度高；生长速率缓慢	很难生长As/P合金；不利于批量生长
金属有机物化学气相沉积 (MOCVD)	1968	用金属有机物作为源	几乎可生长任意化合物；反应室简单；可批量生长	反应物价格高；参数控制严格；源毒性大

分子束外延（MBE）技术和金属有机物化学气相沉积（MOCVD）技术是其中两项最具有代表性的超薄层、低维量子结构材料生长技术，可以用来制备最小厚度达到亚纳米量级的、高质量的半导体超薄层、二维量子阱、超晶格材料。采用应变自组装技术，还可以利用MBE和MOCVD技术获得高质量的一维量子线材料和零维量子点材料。

在本研究中我们采用MOCVD技术生长所需要的外延材料。MOCVD技术始于1968年Manasevi的早期工作，他在蓝宝石上进行了多种III-V族半导体材料的异质外延生长<sup>[1][2][3]</sup>。随着能带工程、量子效应等半导体物理的进展以及对器件



速度、频率、功率等性能的不断追求，使得MOCVD取得了令人瞩目的进展。今天MOCVD已经成为研究与制备化合物半导体异质结、超晶格材料、量子点等低维结构以及生产化合物半导体光电子、微电子器件的重要方法。MOCVD方法的优点是具有生长多种高纯化合物半导体材料的灵活性，能够生长大面积、均匀的外延层，并可精确控制极薄层材料的厚度、组分、掺杂和界面。因此，MOCVD技术不但用于化合物半导体材料和器件的研发，还适用于生产。MOCVD方法的主要缺点是需要使用大量的有毒气体（诸如 $AsH_3$ 、 $PH_3$ 、 $H_2Se$ 等）和在空气中自然的金属有机化合物，以及与空气能形成易爆混合物的氢气。下面我们主要介绍一下MOCVD的生长机理。

**金属有机化合物化学气相沉积** 金属有机化合物化学气相沉积（MOCVD），又称金属有机化合物气相外延（MOVPE）、有机金属化合物气相外延（OMVPE），他是利用金属有机化合物进行金属运输的一种气相外延生长技术<sup>[4]</sup>。

MOCVD技术现已获得广泛应用，成为制备化合物半导体异质结、低维结构材料，以及生产化合物半导体光电子、微电子器件的重要方法。用MOCVD技术生产半导体激光器、发光管、太阳能电池和高频、高速电子器件等都已形成产业。

MOCVD通常采用Ⅲ族、Ⅱ族元素的金属有机化合物和Ⅴ族、Ⅵ族的气态氮化物等作为Ⅲ-V族或Ⅱ-VI族晶体生长的反应源。在MOCVD外延生长中，载气( $H_2$ 或 $N_2$ )把金属有机化合物和非金属氢化物的蒸汽输运到高温反应的区域，即携带到反应室中加热的衬底上方，随着温度的升高在气相和气相-固相界面发生一系列的化学和物理变化，最终在衬底表面生成外延层。

以三甲基镓（TMGa）和砷化氢（ $AsH_3$ ）生长GaAs为例，化学反应可简化表示为：



其中GaAs沉积到晶体表面， $CH_4$ 挥发到气相中，离开反应室。图2-1是GaAs外延的示意图。

整个MOCVD外延生长过程，如上图所示，具体可分为如下步骤：

- (1) Ⅲ族源(MO源)和Ⅴ族源(如HydrideGas)注入到反应室中；
- (2) 反应源混合均匀后，被载气(一般是 $H_2$ )输运到沉积区域；

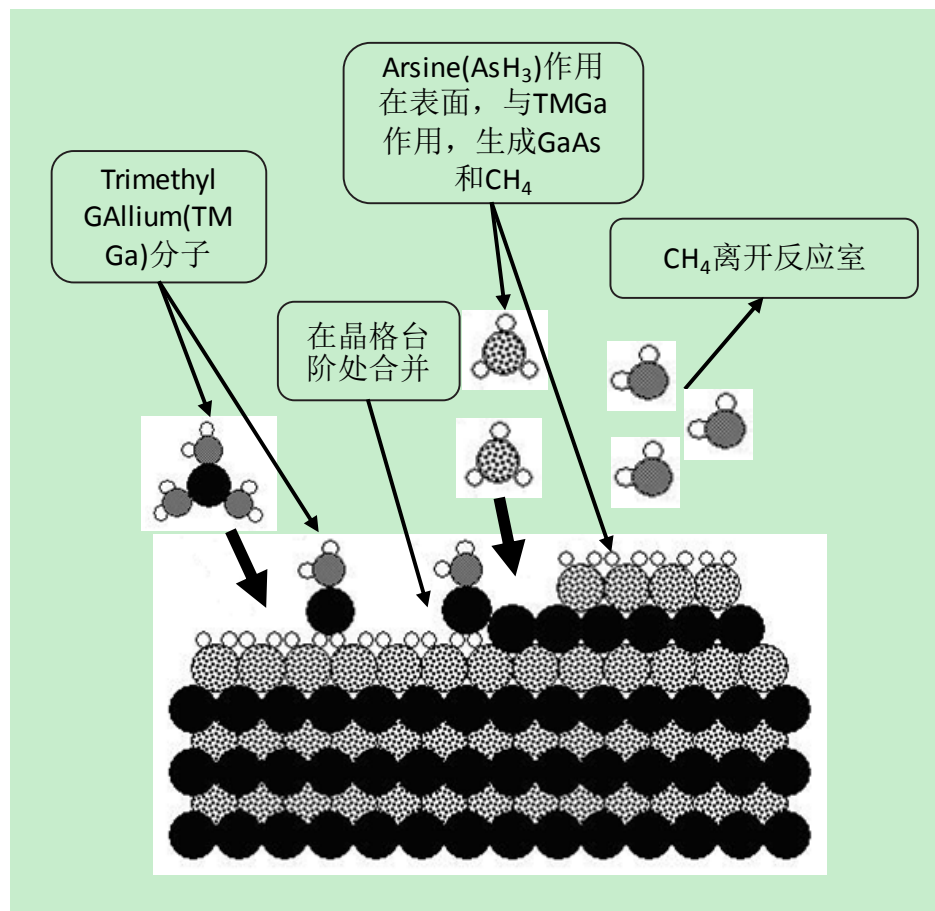


图 2-1 MOCVD

- (3) 在沉积区域, 高温导致反应源的分解及其它气相反应, 生成了薄膜生长所需的源(Film Precursors)及一定的副产物;
- (4) Film Precursors通过扩散输运到晶体生长表面;
- (5) Film Precursors被表面吸附;
- (6) Film Precursors扩散到生长位置;
- (7) 通过表面反应, 薄膜生长所需的原子并入到外延薄膜中, 而表面反应的副产物则从晶体表面脱附;
- (8) 表面反应的副产物输运回远离沉积区域的主气流中, 进而通过尾气管道排出反应室。

在实验过程中我们所采用的是从英国Thomas Swan Scientific Equipment Limited(TSSEL是德国Aixtron集团的子公司)公司购置的3X2" CCS InP型LP-MOCVD设备。该MOCVD设备可以分为5个主要的子系统: 源输送系统(Gas Delivery System)、

反应室与加热系统、低压系统(Low Pressure Exhaust System)、尾气处理系统(Scrubbing System)及安全与控制单元(Safety&ControlUnit)。

## 2.2 表征设备

半导体材料的应用主要取决于材料的光学和电学性能，而后者又完全取决于材料的电子能带结构、化学成分、晶体结构以及可能存在的各种缺陷等。为了掌握材料的光电性能极其影响因素，人们开发出了各种各样的材料表征技术。这些技术提供了关于半导体的物理性能、结构性能和器件性能的互补信息。在本研究中我们主要关注半导体材料的表面形貌和结构特性，因此我们主要采用的半导体材料表征技术包括（如图2-2）：原子力显微镜（AFM）、X射线衍射仪（XRD）、透射电子显微镜（TEM）、扫描电子显微镜（SEM）和腐蚀坑设备等。

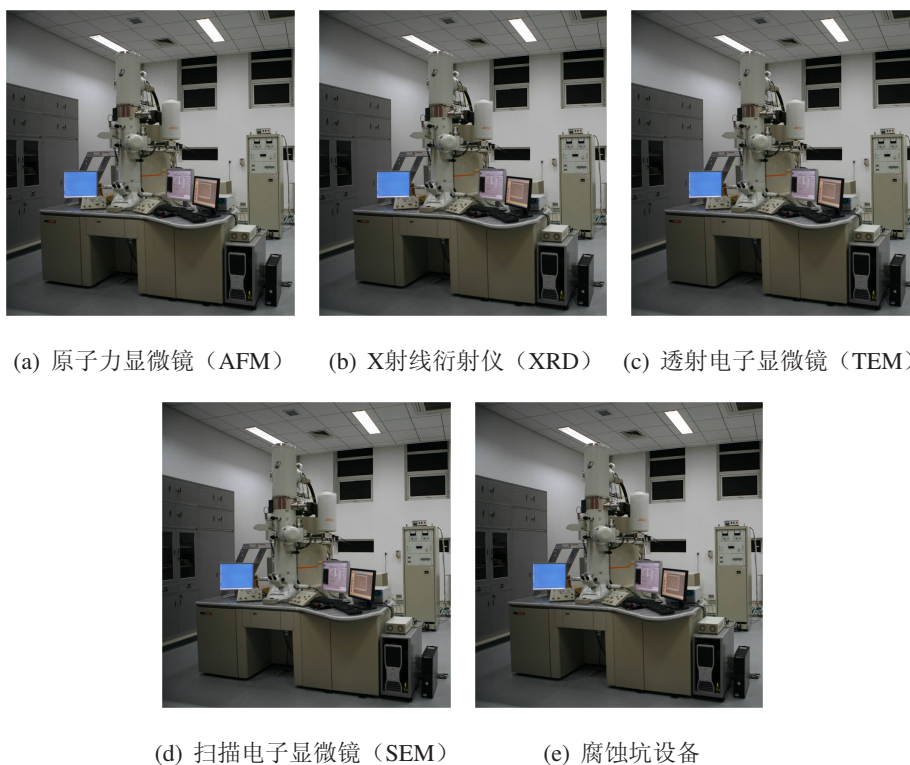


图 2-2 表征设备

**原子力显微镜** 原子力显微镜是一种超高分辨率的扫描探针显微镜，它所具有的纳米级分辨率超过了光学衍射极限的1000倍。1986年binning, Calvin Quate和Gerber在扫描隧道显微镜的基础上发明了第一台原子力显微镜。AFM成像是通过探针在样品



图 2-3 透射电子显微镜(TEM)



图 2-4 扫描电子显微镜(SEM)

表面扫描移动来实现的，通过探针受力的变化来获取表面形貌的信息，可以在不同的模式下运行，包括接触模式、非接触模式和轻敲模式。接触模式：接触模式是指在AFM扫描的整个过程中，探针的针尖切入样品表面，两者始终紧密接触，探针与样品表面的作用力是排斥力，并保持很定，该模式对探针和样品表面都有损伤。非接触模式：在非接触模式下，探针与样品表面并不接触，而是以高于两者的共振频率的频率振动，通过控制探针与样品表面的平均距离，维持不变的振动频率和振幅，测量每个数据点上两者之间的距离即可构建出样品表面形貌，该模式中两者之间的作用力是范德华力，并且不会对探针和样品表面造成损伤。轻敲模式轻敲模式是指探针周期性地短暂德敲击样品表面，其中探针是以两者的共振频率振荡，通过控制探针与样品表面的距离，保持振动振幅，成像两者之间的相互作用力得到样品表面形貌图像，改模式不会对探针和样品表面造成损伤。我们所使用的AFM设备是

**X-射线衍射仪** X射线技术是半导体薄膜材料结构性质研究中最常用的一种手段，利用X射线技术可以精确地获得半导体外延层的成分、厚度、应变等结构信息。XRD是利用X射线衍射原理研究物质内部结构的大型分析仪器，由于其测试方法简单且精度高，常用于晶体质量的测试。1912年，劳厄预想：由于X射线的波长和晶体原子之间距离相近，所以可以把晶体作为X射线的衍射光栅，当X射线照到晶体上时，原子发生散射，并产生衍射波，这些波互相干涉，产生衍射。衍射波相互叠加，使得射线在某些方向上加强，而在其他方向上减弱，分析衍射结果，就能够得到晶体结构，这一预想后被实验证实。1913年，Bragg父子在这基础上成功测得了NaCl、KCl等晶体结构，并提出了布拉尔方程： $2d\sin\theta = n\lambda$ 。XRD便是利用这一原理测定物质的晶体结构，它主要由高稳定度X射线源、样品及样品位置取向的调整机构系统、射线检测器和衍射图的处理分析系统组成。在本研究中，我们使用XRD来表征晶体质量，所使用的XRD设备是

**透射电子显微镜** 透射电子显微镜（Transmission electron microscope，缩写TEM），是利用电子的波动性原理直接观察固体材料的原子结构和各种缺陷的仪器，通过把



经过加速和聚集的电子束投射到非常薄的样品上，经过与原子碰撞，电子改变方向产生了立体角散射。由于散射角的大小和样品的厚度、密度相关，从而形成了明暗不同的影像。1931年，克诺尔和鲁斯卡研制出了第一台透射电子显微镜。与光学显微镜相比，透射电子显微镜的分辨率要高很多，能够达到0.1 0.2nm，可以放大几百万倍。所以，利用透射电子显微镜可以观察到样品的精细结构，甚至是一列原子的结构。在本研究中，我们采用TEM来观察外延片的厚度和位错形成，我们使用的是北京大学物理学院电子显微镜专业实验室的JEM-2100F场发射透射电子显微镜，设备如Figure 1所示。该设备的最小分辨率可达到0.2nm。

**扫描电子显微镜** 扫描电子显微镜（scanning electron microscope，简称SEM）是利用二次电子信号成像来观察样品的表面形态。利用高能的入射电子轰击物质表面，被激发区域将产生二次电子、俄歇电子、X射线、电磁辐射等，同时也会产生电子-空穴对、声子等，根据电子与物质所产生的相互作用，便能够获取被测样品的形貌、组成、晶体结构等信息。扫描电子显微镜就是利用电子束扫描样品，激发出二次电子，由于二次电子的数量与电子束入射角即样品表面结构有关，通过探测器收集二次电子，将其转变为光信号，便能扫描出样品表面结构的图像。它主要由三大部分组成：真空系统、电子束系统及成像系统。我们使用SEM主要观察外延片厚度和腐蚀坑形貌，我们选用的是清华大学电子工程系的HITACHI S-5500场发射扫描电子显微镜，其分辨率可达到0.4nm。

**腐蚀坑设备** 在GaAs/Si异变外延材料中，由于GaAs与Si之间的晶格失配与热失配，导致产生了大量位错，这些位错极大的限制了材料的应用，因此对于材料位错特性的表征显得尤为重要，在本研究中，我们除采用XRD、TEM之外表征材料质量之外，还采用了腐蚀坑密度来表征位错密度。通过腐蚀坑表征位错密度有以下几种方法：熔融KOH法<sup>[5]</sup>，阳极腐蚀法<sup>[6]</sup>，AB腐蚀法<sup>[7]</sup>等，我们采用的是已经形成国家标准方法的KOH腐蚀法。GaAs/Si外延片经熔融KOH腐蚀后，晶体表面的位错露头处，腐蚀速度较快，而没有位错的表面腐蚀速度较慢，这就形成了带棱角的具有特定形状的腐蚀坑。而GaAs单晶的腐蚀条件比较宽松，当熔化的KOH呈现澄清状态时，选择适当的腐蚀时间，就能够得到清晰的腐蚀坑形貌。通过扫描电子显微镜观察这些腐蚀坑的形貌，这些腐蚀坑的密度便在一定程度上表征了外延片的位错密度。在腐蚀坑测试过程中，由于两个或更多的位错线会交错到一起形成一个大坑，所以并不是每条位错线都能够形成腐蚀坑，这就导致了腐蚀坑密度要小于外延片实际的位错密度<sup>[8]</sup>。

## 参考文献

- [1] M M H, I S Q. Use of metal-organics in preparation of semiconductor materials: 1. Epitaxial gallium-V compounds [J]. J.Electrochem. Soc., 1969, 116 (12): 1725–1732.
- [2] M M H. Use of metal-organics in preparation of semiconductor materials: 2. Epitaxial 3-v aluminum compounds using trimethyl aluminum [J]. J. Electrochem. Soc, 1969, 116 (7): C250.
- [3] M M H, I S W. Use of metal-organics in preparation of semiconductor materials on insulating substrates: 1. Epitaxial 3-5 gallium compounds [J]. J.Electrochem. Soc., 1968, 115 (3): C66.
- [4] 王占国, 陈立泉, 屠海令. 信息功能材料工程 [M]. 北京: 化学工业出版社, 2005.
- [5] Grabmaier JG, Watson CB. Status Solid [J], 1969 (32): 13.
- [6] 曹福年. 一种显示N<sup>+</sup>-GaAs多种缺陷的阳极腐蚀法 [J]. 半导体学报, 1980, 1 (1): 37.
- [7] Abrahams MS, Buicchi CJ. Etching of dislocations on the low-index faces of GaAs [J]. J Appl Phys, 1965, 36: 2855.





### 第三章 GaAs/Si异变外延两步法生长

#### 3.1 GaAs/Si异变外延两步法生长，问题，目标

GaAs与Si之间4%的晶格失配对于在Si衬底上生长高质量GaAs外延片是最大的阻碍，Si衬底上最初的GaAs成核是生长过程中的关键步骤，并且在一定程度上决定着上面GaAs的质量。

晶片生长的成核有三种生长模式：层状生长（FM），岛状生长（VM）和SK模式生长，其中SK模式生长即是先岛状生长，接着是浸润层状生长。前两种生长模式（FM和VM）可以用衬底表面能（ $\gamma_s$ ）、外延层表面能（ $\gamma_f$ ）和两者之间的界面能（ $\gamma_i$ ）之间的关系来区分，如果衬底表面能远大于其他两者之和，则浸润机制发生，即是FM生长机制：

$$\gamma_s > \gamma_f + \gamma_i \quad (3-1)$$

若相反

$$\gamma_s < \gamma_f + \gamma_i \quad (3-2)$$

则无浸润发生，也就是VM生长机制。

对于SK生长模式，在开始生长阶段，表面能之间的关系是3-1，而在生长几个原子层之后表面能之间的关系则转换为3-2。

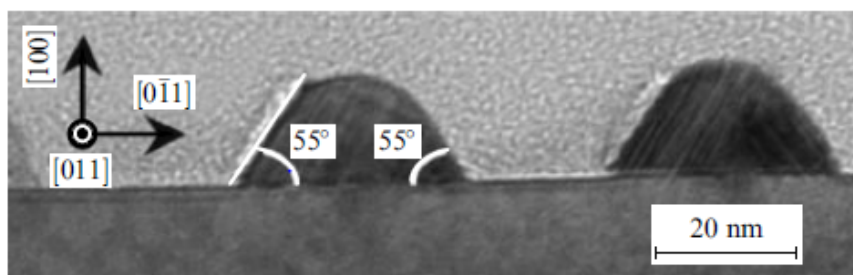
GaAs/Si外延生长不包括浸润层，GaAs岛直接在Si衬底上形成，因此GaAs/Si最初的生长机制是VM。Adomi 等阐述了衬底表面能的减少在GaAs/Si生长的过程中所起到的重要作用。他们在GaAs衬底上生长了0.9nm的Si薄膜（Si是层状生长），然后再外延GaAs，则GaAs最初是岛状生长。以此推出，在Si表面用As或Ga钝化，减少其化学活性，有助于在最初的GaAs/Si外延生长过程中GaAs的岛状生长。从GaP/Si的生长中也可以推出该观点，GaP和Si的晶格失配很小，GaP/Si的最初生长也是岛状生长。

自从意识到用III族或V族元素钝化Si表面——在Si衬底上生长III-V族化合物的必要条件——导致了GaAs的最初生长是岛状生长，人们采取了许多不同的方法在Si衬



图 3-1 TwoStep Growth

底上沉积GaAs。包括：使用外延衬底，例如先在Si衬底上沉积一层Si薄膜；低温生长最初的GaAs原子层；用MEE外延方法分别外延Ga或As；生长无定形的Si或GaAs层。到目前为止，应用最广泛的生长机制：两步法生长。如图3-1所示，包括低温生长的GaAs缓冲层和最主要的高温生长的GaAs层。用这个生长顺序外延的原因是在结构位错产生之前低温生长的GaAs层是连续的。



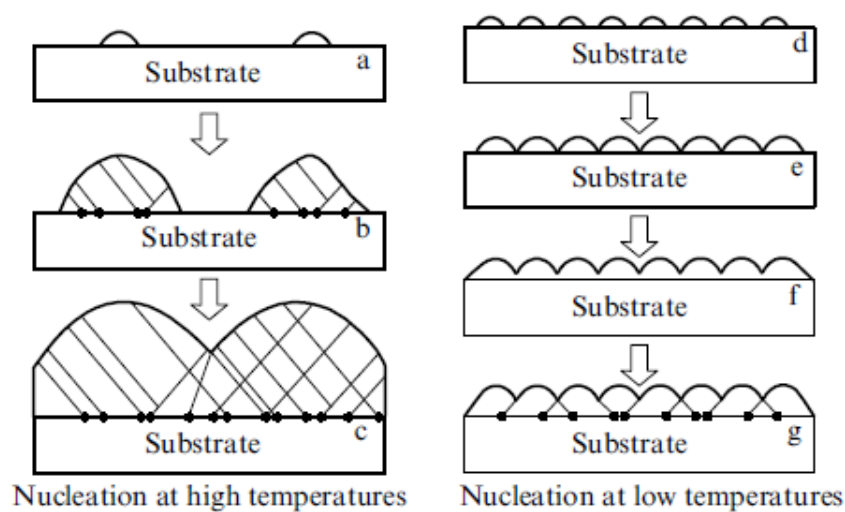
**Figure 8.** Electron microscope cross section image after the deposition of four GaAs monolayers onto an Si substrate. Temperature 400°C. (Courtesy of the authors of Ref. [68].)

图 3-2 GaAs Islands

在最初的生长阶段，GaAs岛的高度与横向宽度的比是1/2，而在Si衬底上生长的Ge的岛的高度与横向（{105}面）宽度的比是1/10。GaAs岛的高宽比远大于Ge岛，

这表明Si基上GaAs成岛更加不可避免。图3-2是Si基上的GaAs岛的截面图。这些岛是在400°C的条件下沉积几个原子层的GaAs形成的，从图3-2中可以看出，这些岛是半球形的并且已经形成位错。

Si基上的GaAs岛可以看做是半球形，基于初期赝形生长的岛应力和形变计算，岛与衬底的界面是弯曲的，应力集中在岛的边缘，并且容易形成失配位错和其他的位错。在1975年，Stowell详细地描述了在最初的薄膜沉积过程中，3D岛的合并导致了大量穿透位错的产生。因此，人们需要研究在怎样的生长条件下失配位错能够产生在连续生长的薄膜中。



**Figure 9.** Two approaches to introducing misfit dislocations. Left: dislocations and other structural defects are introduced before the islands coalesce. Right: MDs are introduced into a continuous pseudomorphic film.

图 3-3 Islands Growth Procedure

最初的生长温度越低，成岛的原子扩散区域越小，因此岛的密度就越大。图3-3中是GaAs通过岛的合并形成层状的两种方式：一种是高温生长，另一种是低温生长。以GaAs的生长温度为550°C-600°C为标准，当生长温度为400°C时，GaAs岛在合并之前就已经形成位错（图3-3b），当这些岛开始合并时（图3-3c），大量移动位错产生，这些位错用退火、高温生长厚外延层等方法都很难消除。

如果赝型生长的GaAs岛的合并方式如图3-3e和图3-3f，粗糙的表面会产生很多位错，这些位错会引入到连续生长的GaAs薄膜中（图3-3g）。因为低温生长的岛的密度比高温生长的岛的密度至少要高一个数量级，所以会导致表面形成的位错密度也

较高（图3-3f和图3-3g）。然而经实验表明，最初的GaAs薄膜用低温生长的GaAs外延层会降低XRD摇摆曲线的FWHM，表明提高了外延片的晶体质量。这应该怎么解释呢？一个可能的答案就是在GaAs合并时形成的失配位错变化较少，移动能力较强，所以在生长过程中，许多位错都能够消失。

据我们所知，到目前为止，对于初期的GaAs/Si的生长并没有详细的纳米级研究，因此不能直接观察到岛状生长到连续生长之间的变化。但是大量实验表明最初的GaAs用低温生长可以极大地改善GaAs外延层的晶体质量，但是这种生长方式的机制需要进一步的研究。

### 3.2 衬底处理

我们所使用的Si (001) 衬底是由天津通美公司提供的，偏角为偏向 $\langle 011 \rangle 4^\circ$ 。

对于Si衬底，表面常常有O，C杂质污染，在空气中极易形成Si-O键，而作为外延薄膜衬底，它必须是完整，清洁并具有特定晶向，其中 $SiO_x$ 可在超高真空中加热至 $1000^\circ\text{C}$ 把它除掉，但对于C污染，去除比较困难，表面上的SiC小团对外延层又非常有害，因此，必须寻找化学方法对Si表面进行处理。由于Si-O键的键能（ $439\text{kJ/mol}$ ）比较大，而Si-H键的键能（ $222\text{kJ/mol}$ ）比较小，因此Si表面极易被氧化，形成的氧化膜很稳定，要打开Si-O键所需的温度高于 $1000^\circ\text{C}$ ，而打开Si-H键所需的温度低于 $800^\circ\text{C}$ 。而MOCVD生长的温控平台一般为电热石墨舟结构，温度不宜长时间过高（ $>900^\circ\text{C}$ ）。如果不能在生长前断开所有的Si-O键去氧化，GaAs原子就很难与Si表面原子成键，导致外延质量急剧下降，因此Si片的氢化是非常重要的步骤，另外Si表面一般还会吸附C等杂质，必须进行化学清洗。

1. 首先预处理Si衬底，包括清洗、氢化、甩干。

第一步，用丙酮进行超声清洗，去除表面油脂等有机物。第二步，在 $H_2SO_4 : H_2O_2 = 3 : 1$ 溶液里煮洗至 $H_2O_2$ 完全挥发冒白烟，去除大部分有机物。第三步，在 $NH_3OH : H_2O_2 : H_2O = 1 : 1 : 6$ 溶液中，加热至 $75^\circ\text{C}$   $85^\circ\text{C}$  10min（由于氨水对硅有腐蚀作用，所以时间不能太长），去除金属杂质。第四步，在 $HCl : H_2O_2 : H_2O = 1 : 1 : 6$ ，加热至 $75^\circ\text{C}$   $85^\circ\text{C}$ ，盐酸对硅无腐蚀作用，可加热使得 $H_2O_2$ 完全挥发，去除表面金属离子。第五步，用HF漂洗5-10s，去除表面氧化层。第六步，用甩干机甩干并置入手套箱，尽量减少Si衬底与空气的接触时间。

2. 高温烘烤、As钝化

经预处理的Si衬底送入反应室后，升温至 $750^\circ\text{C}$ 烘烤15min，烘烤的目的是使Si-

H键脱离，然后在此温度下通入 $AH_3$ 钝化3min，目的是使生长时先形成Si-As键，它相比Si-Ga更易成键。如前所述，这样可以减少反相畴和进一步清洁Si表面，以便为下一步生长做准备。基于低温缓冲层的GaAs/Si直接外延的基本生长条件为：

- (1) 反应室压力为100Torr；
- (2) 石墨舟转速为100rpm；
- (3) III族源和V族源的载气（H<sub>2</sub>）总流量为12L/min；
- (4) 三区石墨加热器的Zone A/B/C Ratio分别设定为39%、45%和80%；

### 3.3 分项优化

#### 3.3.1 低温缓冲层温度的优化

大量实验表明，最优的低温缓冲层的生长温度在400-450°C之间，当第一步低温GaAs的生长温度高于450°C时，第二步高温GaAs的表面将变得粗糙；当第一步低温GaAs的生长温度低于400°C时，GaAs沉积可能不会发生。因此我们对低温缓冲层的温度进行了优化。

表 3-1 低温缓冲层温度的优化

Sample no.	LT buffer growth temperature(°C)	DCXRD FWHM (arcsec)
A1	450	470.9
A2	460	501.3
A3	440	462.2
A4	420	462.6

这一系列的样品低温缓冲层的温度分别为460、450、440和420°C，其他生长条件都是完全一样的：高温层的生长温度为630°C，生长速率为，生长厚度为900nm，且这些样品的表面都是光亮的。上图给出了不同低温缓冲层的生长温度对于外延片XRD半高宽的影响，可以看出当低温缓冲层的温度为440°C和420°C时，测得的XRD半高宽基本相同（462arcsec），我们选取了420°C作为后续低温缓冲层的生长温度。



图 3-4 fig1



图 3-5 fig2



图 3-6 fig2



(a)



(b)



(c)

图 3-7 Two Subfigures

### 3.3.2 低温缓冲层厚度的优化

当高温层生长温度和厚度固定（温度：685℃，厚度：900nm），低温缓冲层生长温度为420℃时，优化低温缓冲层的生长时间，即优化低温缓冲层的厚度。当低温缓冲层生长时间为600s（后经TEM测试，此时厚度为70nm）时，外延片的XRD半高宽最窄，晶体质量最好，所以选取低温缓冲层厚度70nm作为后续外延片生长的低温缓冲层厚度。

### 3.3.3 低温缓冲层种类的优化

仅仅依靠高温生长并不能满足整个异质结构对于GaAs/Si外延片的要求，当最初的生长层的厚度、掺杂浓度和掺杂类型不同的时候，接下来的生长温度就不能超过一个固定的限制。由于这个原因，人们在GaAs和Si衬底之间采用不同材料的低温缓冲层，

在固定的低温缓冲层生长温度和厚度（温度：420℃，厚度：70nm）、固定的高

表 3-2 低温缓冲层厚度的优化

Sample no.	LT buffer growth time(s)	DCXRD FWHM (arcsec)	RMS roughness (nm) in 10 μ m×10 μ m
A1	400	431.1	6.991
A2	600	412.9	3.641
A3	800	447.6	3.23

表 3-3 低温缓冲层种类的优化

Sample no.	Growth procedure	DCXRD FWHM (arcsec)	RMS roughness (nm) in $10\ \mu\text{m}\times 10\ \mu\text{m}$
A1	GaAs buffer layer	412	3.6
A2	AlAs buffer layer	401	3.4
A3	AlGaAs/GaAs buffer layer	447	6.3

温层生长温度和厚度（温度：685°C，厚度：900nm）下，当低温缓冲层为AlAs时，XRD半高宽最窄，晶体质量最好。但是由于Al易氧化，后续的生长没有采用AlAs缓冲层。

### 3.4 结论

我来占个位置。 [1]

### 参考文献

- [1] 北京邮电大学研究生院培养与学位办公室. 关于研究生学位论文格式的统一要求 [EB/OL]. 2004 [2008-08-06]. <http://www.bupt.edu.cn/>.





## 第四章 GaAs/Si异变外延三步法生长

**4.1** 三步法动机+存在的问题+所以我们优化了+我们对比了+可能可以做的更好+怎么做了+对比

**4.2** 三步法优化方法

**4.3** 两步法与三步法的比较

**4.3.1** 中间温度层温度的优化

**4.3.2** 插入循环退火

**4.4** InGaAs/GaAs应变超晶格的优化

**4.5** InGaAs/GaAs、AlGaAs/GaAs、GaAsP/GaAs应变超晶格的比较

**4.6** 结论

三步法好处三步法到头了，另选其他方案，量子点方案解决我来占个位置。<sup>[1]</sup>

## 参考文献

- [1] 北京邮电大学研究生院培养与学位办公室. 关于研究生学位论文格式的统一要求 [EB/OL]. 2004 [2008-08-06]. <http://www.bupt.edu.cn/>.



## 第五章 GaAs/Si异变外延插入量子点位错阻挡层

### 5.1 背景

量子点，为啥能解决方案概要，量子点异变外延生长

### 5.2 量子点生长

#### 5.2.1 单层量子点的生长

#### 5.2.2 多层量子点的生长

#### 5.2.3 与GaAs基量子点对比

### 5.3 量子点做位错阻挡层的GaAs/Si异变外延生长

我来占个位置。<sup>[1]</sup>

### 参考文献

- [1] 北京邮电大学研究生院培养与学位办公室. 关于研究生学位论文格式的统一要求 [EB/OL]. 2004 [2008-08-06]. <http://www.bupt.edu.cn/>.



## 第六章 绪论

北京邮电大学 (Beijing University of Posts and Telecommunications, BUPT) 研究生院培养与学位办公室于2004年1月6日颁布了《北京邮电大学关于研究生学位论文格式的统一要求》(下简称“要求”)<sup>[1]</sup>, 对研究生学位论文的格式要求做出了文字性的描述和说明。但是迄今为止, 研究生院尚未发布统一的论文模板。对于已经、正在或者即将撰写学位论文的同学都只能按照该要求的规定自行调整其学位论文的格式, 一方面给大家增加了繁重的排版工作, 另一方面也不利于统一全校的论文格式。

2007年9月, 北京邮电大学无线新技术研究所 (Wireless Technology Innovation Institute, WTI) 的王旭博士制作并发布了 latex-bupt —— 北京邮电大学博士毕业论文 L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 模板 (非官方版)<sup>[2]</sup>。该模板可以满足官方论文格式要求<sup>[1]</sup>, 但是在一些细节上的处理还有待改进, 例如:

- 参考文献不能分列在各章末尾;
- 不能利用 BiBTeX 处理发表学术论文列表;
- 参考文献的格式上赏不能完全满足学校要求等。

本模板在清华大学学位论文 L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 模板<sup>[3]</sup>的基础上, 根据<sup>[1]</sup>的要求进行了改写, 除符合具备<sup>[1]</sup>的全部要求, 还根据国家标准进行了适当的扩充和完善。

### 6.1 中文信息处理软件的国内外发展现状

中文信息处理软件可以分为字处理软件和排版软件两大类。字处理软件包括以下功能: 字体、字号设定, 英文断字, 拼写和语法检查等。通常字处理软件处理文档的规模比较小, 一般是作为办公自动化套件的一个重要组成部分, 目前广泛使用的中文字处理软件主要包括微软 Office 套件中的 Word、金山公司的 WPS, 以及开源社区的 OpenOffice 等。排版软件则是针对大规模专业出版印刷而设计的一类软件, 其主要功能是文字图像定位, 基本图形绘制等。排版软件相对于字处理软件其专业针对性更强, 目前广泛使用的中文排版软件主要包括北大方正的书版系列软件, 飞腾系列软件, 蒙泰桌面出版系统, Adobe 公司的 PageMaker, FrameMaker, 以及

QuarkPress 公司的 PassPort 等。除此而外，由 D. E. Knuth 编写的  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  和由 L. Lamport 编写的  $\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  也是学术界广泛的应用排版软件。

微软公司的 Word 是目前国内最为普及的字处理软件之一，也是大多数学校规定的学位论文编辑排版工具。不容否认，Word 在简单文书（例如：通知、简报等）编辑排版方面具有方便快捷的优势，而且其对多人协同编辑的支持也给文字修订工作带来了极佳的用户体验。但是从实际使用的情况看，尽管 Word 已经经历了第 12 个版本的改进，但是其对于处理大型文书文稿（例如：书籍、学位论文等）的能力仍然有待进一步完善和提高。由于 Word 版本不兼容造成的来回反复，也是使用 Word 编辑文字稿件的烦事之一。另外，由于 Word 对数学公式编辑的支持一直延续其“对象链接与嵌入”（Object Linking and Embedding, OLE）的设计理念，这也使得每位使用 Word 排版过理工类的文字资料的人都有一段或多段刻骨铭心的痛苦经历，往往花在调整格式这种 dirty work 上的时间和花在编写文章内容上的时间差不多或者甚至更多。

北大方正的书版系列软件是专业中文出版领域的权威，国内几乎所有的大型出版社、报社、政府机关几乎都使用书版系列软件对其出版的书籍、报纸和公文进行编辑排版。但是，书版软件作为方正电子出版流程中的一个主要组成部分，主要定位于印前排版环节，面向专业排版工作人员。因此，学习和使用使用书版软件需要花费较长的时间来熟悉复杂的排版命令，发排后需要使用专用的 RIP 软件或者方正的专用打印机才能输出样张等。

美国 Stanford 大学的荣誉退休教授 D. E. Knuth 在 197x 年独自一人开发了  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  排版系统，随后，L. Lamport 为  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  编写了一系列的宏包使得  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  的使用更加方便，这些宏包被称为  $\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ 。自从  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}/\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  问世以来它们就受到了学术界的青睐，目前几乎所有的国外出版社都接受或指定使用  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}/\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  对稿件进行排版编辑。19xx 年，中国科学院的张林波研究员开发了 CCT 使得  $\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  可以用于中文文稿的处理。德国的 W. Lemberg，编写了 CJK 宏包为  $\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  提供了中日韩三国语言的解决方案。使用  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}/\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  排版学术论文的最大优势在于，它让作者可以不用为排版输出的具体格式操心，而全心投入文章、书稿内容的编写上，最大程度的降低作者从事排版 dirty work 的工作量。

目前，我国的清华大学、哈尔滨工业大学、西安电子科技大学、西安交通大学等都已经纷纷制作了本校学位论文的  $\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  模板，并接受使用  $\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  排版的学位论文。



## 6.2 本说明的主要内容

本说明全面介绍了如何使用 BUPTTHESIS 来排版符合[1]规定的北京邮电大学学位论文。全文内容安排如下：

1. 第二章介绍……
2. ……

北京邮电大学

图 6-1 中科院数学与系统科学研究院院徽（在页面中间）

我来占个位置。 [1]

## 参考文献

- [1] 北京邮电大学研究生院培养与学位办公室. 关于研究生学位论文格式的统一要求 [EB/OL]. 2004 [2008-08-06]. <http://www.bupt.edu.cn/>.
- [2] 王旭. latex-bupt: L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X style for BUPT thesis [EB/OL]. 2007 [2009-01-14]. <http://code.google.com/p/latex-bupt/>.
- [3] 薛瑞尼. 清华大学学位论文 L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 模板 [EB/OL]. 2006 [2009-01-14]. <http://sourceforge.net/projects/thuthesis/>.



## 附录 A 不定型 (0/0) 极限的计算

**定理 A.1 (L'Hospital法则)** 若

1. 当  $x \rightarrow a$  时, 函数  $f(x)$  和  $g(x)$  都趋于零;
2. 在点  $a$  某去心邻域内,  $f'(x)$  和  $g'(x)$  都存在, 且  $g'(x) \neq 0$ ;
3.  $\lim_{x \rightarrow a} \frac{f'(x)}{g'(x)}$  存在 (或为无穷大),

那么

$$\lim_{x \rightarrow a} \frac{f(x)}{g(x)} = \lim_{x \rightarrow a} \frac{f'(x)}{g'(x)}. \quad (\text{A-1})$$

**证明:** 以下只证明两函数  $f(x)$  和  $g(x)$  在  $x = a$  为光滑函数的情形。由于  $f(a) = g(a) = 0$ , 原极限可以重写为

$$\lim_{x \rightarrow a} \frac{f(x) - f(a)}{g(x) - g(a)}.$$

对分子分母同时除以  $(x - a)$ , 得到

$$\lim_{x \rightarrow a} \frac{\frac{f(x) - f(a)}{x - a}}{\frac{g(x) - g(a)}{x - a}} = \frac{\lim_{x \rightarrow a} \frac{f(x) - f(a)}{x - a}}{\lim_{x \rightarrow a} \frac{g(x) - g(a)}{x - a}}.$$

分子分母各得一差商极限, 即函数  $f(x)$  和  $g(x)$  分别在  $x = a$  处的导数

$$\lim_{x \rightarrow a} \frac{f(x)}{g(x)} = \frac{f'(a)}{g'(a)}.$$

由光滑函数的导函数必为一光滑函数, 故 (A-1) 得证。□



## 附录 B 缩略语表

BUPT Beijing University of Posts and Telecommunications, 北京邮电大学

WTI Wireless Technology Innovation Institute, 无线新技术研究所



## 致 谢

感谢Donald Ervin Knuth.





## 攻读学位期间发表的学术论文目录

### 期刊论文

- [1] **Wang Yifan**, Qi W, Zhigang J. Three-step growth of metamorphic GaAs on Si(001) by LP-MOCVD [J]. Journal Vac. Sci. Technol., 2013: 567–890. (051211-1), SCI.
- [2] Jia Z, Wang Q, Ren X, et al. Effects of the Boron Incorporation on the Strain and Photoluminescence properties of the GaAsSb/GaAs Quantum Wells [J]. Mat.Sci. Semicon.Proc, 2013: 1713–1717. (051211-1), SCI.

### 会议论文

- [1] **Wang Yifan**, Qi W, Zhigang J. The effect of different buffer layers and superlattice intermediate layers on GaAs/Si [C]. In ACP Conference, Beijing, China, September 21–24, 2013: 123–456. (EI 源刊) .
- [2] Xiaoyi L, Qi W, **Wang Yifan**. The Effect of InGaAs/GaAs Superlattices on GaAs Epilayer Grown on Si (100) Substrate [C]. In ACP Conference, Beijing, China, September 21–24, 2013: 123–456. (EI 源刊) .





