

## 应变平衡超晶格改善 GaAs/Si(001) 表面研究

李家琛, 王俊\*, 肖春阳, 王海静, 贾艳星, 刘倬良, 马博杰, 明蕊, 葛庆, 翟浩, 林枫, 何玮钰, 黄永清, 任晓敏  
北京邮电大学信息光子学与光通信国家重点实验室, 北京 100876

**摘要** 本文提出了一种有效改善 GaAs/Si(001) 材料表面形貌和晶体质量的应变平衡超晶格结构及其制备方案。在无偏角 Si(001) 衬底上, 采用金属有机化学气相沉积技术生长了具有应变平衡超晶格结构的 GaAs 外延层, 并在相同条件下仅生长了 GaAs 外延层作为比较。采用原子力显微镜、光致荧光光谱仪和双晶 X 射线衍射仪对两种样品进行表征与测试。测试结果表明: 与未采用该方案生长的样品相比, 采用应变平衡超晶格结构方案生长的样品的均方根表面粗糙度由 1.92 nm ( $10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$ ) 降至 1.16 nm ( $10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$ ), 光致荧光光谱峰值强度提高 5 倍以上, 光致荧光光谱峰值半峰全宽从 31.6 nm 降为 23.4 nm, XRD 曲线峰值半峰全宽降低了 30.4%, X 射线衍射峰值强度提升了 472.2%。该方案可显著改善 GaAs/Si(001) 材料的表面形貌及晶体质量, 对制备硅基电子和光电子器件具有重要意义。

**关键词** 材料; 硅基砷化镓材料; 表面粗糙度; 应变平衡超晶格; 金属有机化学气相沉积

中图分类号 O471.4

文献标志码 A

DOI: 10.3788/CJL220798

## 1 引言

随着大数据、云计算等的发展与应用, 社会产生的信息数据量呈快速增长的趋势<sup>[1-2]</sup>。提取、处理和存储海量数据要求器件的数据中心具有更大的传输带宽和更小的功耗, 而现有数据中心用于实现短距离、大容量数据传输的器件仍为微电子器件, 显然不能满足未来大带宽和低能耗的发展要求<sup>[3]</sup>。基于硅(Si)材料的光电集成技术不仅可以通过光互连有效解决大数据时代面临的高速通信带宽不足以及海量数据存储能耗过高的问题, 还可以利用成熟的微电子工艺在硅平台上将分立光子器件集成, 进一步降低制造成本<sup>[4-6]</sup>。

为实现光源集成的硅基光子芯片, 研究人员提出了众多硅基光源制备方案。其中, 应用金属有机化学气相沉积(MOCVD)技术在硅衬底上直接外延 III-V 族材料, 进而制备硅基 III-V 族激光器的研究受到广泛关注<sup>[7]</sup>。然而, 硅与 GaAs 间存在 4.1% 的晶格失配, 导致在 GaAs/Si(001) 的初始生长阶段, 材料进行三维生长时会形成大量三维岛状结构<sup>[8]</sup>, 因此材料的表面粗糙度较高。随着外延过程的进行, 虽然材料的表面粗糙度在一定范围内会随外延层厚度的增加而下降, 但如果不采取措施加以改善, 粗糙度难以降低到理想的程度[一般情况下维持在 5 nm ( $10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$ ) 以

上]。不理想的粗糙度不仅会严重影响后续生长材料的质量, 还会导致器件的整体制备工艺流程无法正常完成。例如, 在制备硅基激光器金属电极过程中, 由于外延层表面过于粗糙, 金属电极无法牢固地附着在欧姆接触层上, 易导致电极脱落, 使得激光器芯片无法工作。此外, 硅基 III-V 族量子点激光器的光电性能也会受到 GaAs 外延层表面粗糙度的显著影响。英国伦敦大学学院(UCL)课题组<sup>[9-10]</sup>的研究显示: 在 1.3  $\mu\text{m}$  波段硅基激光器材料结构及有源区量子点密度基本相同的情况下, 粗糙度为 0.81 nm ( $5\ \mu\text{m} \times 5\ \mu\text{m}$ ) 的 GaAs/Si 上制备的量子点激光器的光功率可以达到 48 mW, 而粗糙度为 4.9 nm ( $5\ \mu\text{m} \times 5\ \mu\text{m}$ ) 的 GaAs/Si 上制备的量子点激光器的光功率仅为 2.2 mW。可见, 粗糙的 GaAs/Si 材料表面不仅会使硅基光子器件的光电性能大幅退化, 甚至还会使材料生长和器件制备无法进行, 严重阻碍了硅基光子器件的进一步发展和应用。

在降低 GaAs/Si 材料表面粗糙度方面, 目前采用的主要方法有化学机械抛光(CMP)法和生长应变超晶格(SLS)<sup>[11-12]</sup>。化学机械抛光法无法精准地控制较薄的抛光厚度, 不适合应用在 GaAs/Si 这种外延层较薄的材料上, 而且需配合清洗工艺处理抛光后的外延层表面, 使得激光器的整体制备工艺复杂度增大, 而且还会增加外延层遭受污染的可能性。因此, 生长应变

收稿日期: 2022-04-27; 修回日期: 2022-05-24; 录用日期: 2022-06-01; 网络首发日期: 2022-06-13

基金项目: 国家自然科学基金(61874148)、国家重点研发计划重点专项课题(2018YFB2200104)、北京市科技计划课题(Z191100004819012)、国家创新研究群体科学基金(62021005)、高等学校学科创新引智计划(111计划)(BP0719012)

通信作者: \*wangjun12@bupt.edu.cn

超晶格成为改善材料表面形貌的首选方案。1999年,日本丰桥大学的研究人员<sup>[13]</sup>采用分子束外延(MBE)技术,在4°偏角Si(001)衬底上采用(GaAs)<sub>m</sub>(GaP)<sub>n</sub>短周期应变超晶格结构降低了AlAs/GaAs分布式布拉格反射镜(DBR)的粗糙度,使其粗糙度达到1.5 nm(10 μm×10 μm),显著提高了DBR的反射率。2017年,Shi等<sup>[14]</sup>采用MBE技术在Si(001)衬底上直接外延GaAs材料,并应用100对5 nm Al<sub>0.4</sub>Ga<sub>0.6</sub>As/5 nm GaAs应变超晶格改善了材料的表面形貌;他们制备的波长为1278 nm的量子点激光器在8℃下成功激射。2018年,香港科技大学的研究人员<sup>[15]</sup>采用金属有机化学气相沉积(MOCVD)技术在GaAs/Si(001)上外延InP材料,并采用10对5 nm AlGaAs/5 nm GaAs应变超晶格改善外延层的表面形貌,最终得到了表面粗糙度为1.6 nm(10 μm×10 μm)的InP外延层。中国科学院物理研究所<sup>[16-18]</sup>应用MBE技术,采用5组应变超晶格降低了硅基图形衬底上生长的GaAs材料的表面粗糙度;每组应变超晶格由10对2 nm Al<sub>0.6</sub>Ga<sub>0.4</sub>As/2 nm GaAs构成,组间采用50 nm GaAs材料作为间隔层,最终使得GaAs外延层的表面粗糙度降至1.3 nm(10 μm×10 μm)。上述研究中采用的应变超晶格与外延材料晶格基本匹配,其应变远小于传统用作位错阻挡的应变超晶格<sup>[19-21]</sup>,因此其仅可改善材料表面形貌,无法减少材料缺陷和提高晶体质量。

本课题组提出了一种张应变和压应变相结合的应变平衡超晶格结构及其制备方案。此应变平衡超晶格由张应变层与压应变层交替叠加而成,相反的应变类型可以相互平衡并可以减小材料中的应变累积,从而降低整体结构的净应变,使结构中可叠加应变层的数量远远多于单一应变类型的超晶格结构,进而获得更好的表面形貌和晶体质量。实验结果显示,经所提方案改善后的GaAs/Si(001)材料表面均方根(RMS)粗糙度由改善前的1.92 nm(10 μm×10 μm)降至1.16 nm(10 μm×10 μm)。室温下,对GaAs晶体进行光致荧光光谱(PL)和双晶X射线衍射(XRD)表征,结果表明:相较于未应用此方案的GaAs/Si(001)材料,改善后的GaAs/Si(001)的PL峰值强度提升500.3%,平均PL峰值的半峰全宽(FWHM)由31.6 nm降低至23.4 nm,XRD曲线的FWHM降低了30.4%,XRD峰值强度提高了472.2%。本文所提方案既可以有效改善GaAs/Si(001)材料的表面粗糙度,又兼具传统位错阻挡结构减少材料缺陷和提升晶体质量的作用。此外,所提方案不仅简化了GaAs/Si(001)的生长工艺,还减小了外延层厚度,从而降低了由材料过厚引起的热裂纹风险,有效提高了器件的稳定性。

## 2 结构设计及材料生长

在此超晶格结构的一个周期中,张应变材料层

与压应变材料层交替叠加,张应变与压应变相互平衡,从而降低了整体结构的净应变。超晶格结构中每周期的材料、厚度、应变类型和大小如图1所示。

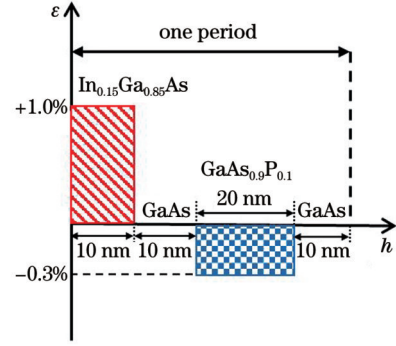


图1 超晶格每周期的材料、应变及厚度示意图

Fig. 1 Schematic diagram of material, strain and thickness of each period of periodic superlattice

图1中, $h$ 为外延层厚度, $\epsilon$ 为材料中产生的应变。本文中应变的定义为

$$\epsilon = \frac{a_f - a_s}{a_s}, \quad (1)$$

式中: $a_f$ 为外延层的晶格常数; $a_s$ 为衬底的晶格常数。若应变大于零,表示材料中的应变为压应变;若应变小于零,则表示材料中的应变为张应变。结合应变累积效应和应变弛豫的概念,可以得到应变层厚度与平均应变之间的关系为

$$\epsilon_{\text{ave}} = \left( \sum_{i=1}^N \epsilon_i t_i \right) / h, \quad (2)$$

其中,

$$\epsilon_{\text{ave}} = N(\epsilon_C t_C + \epsilon_T t_T) / h, \quad (3)$$

式中: $\epsilon_{\text{ave}}$ 为应变结构中的平均应变; $\epsilon_i$ 、 $t_i$ 分别为第*i*层的应变和厚度; $N$ 为周期数; $\epsilon_C$ 、 $t_C$ 代表压应变层的应变和厚度; $\epsilon_T$ 、 $t_T$ 代表张应变层的应变和厚度。当应变层的应变类型相反时,即 $\epsilon_C \cdot \epsilon_T < 0$ ,可通过设计应变层的应变大小及厚度,对不同应变类型的应变层进行组合,从而实现平均应变为零的结构。这种结构在理论上可以叠加无限多个应变层。本文所提方案是在张应变层和压应变层之间插入GaAs应力过渡层,可以避免应变类型不同的材料层之间因晶格常数差异过大而引起薄膜弛豫进而产生位错,从而提高了晶体质量<sup>[22-27]</sup>。

为探究应变平衡超晶格结构对GaAs/Si(001)表面形貌改善的效果,在相同条件下生长两组样品,其中一组生长具有应变平衡超晶格结构的GaAs材料,另一组作为对照组仅生长GaAs材料。此应变平衡超晶格的材料和结构如图2所示。采用2 inch(1 inch=2.54 cm)无偏角Si(001)衬底(偏角为0.37°,偏角方向为〈110〉),应用AIXTRON公司的MOCVD设备进行外

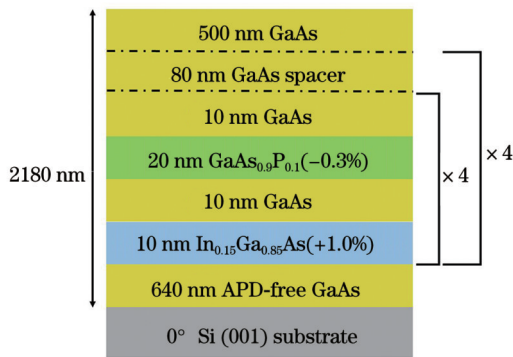


图 2 应变平衡超晶格的材料和结构示意图

Fig. 2 Schematic diagram of material and structure of strain balanced superlattice

延生长。外延生长流程如下:1)采用RCA化学清洗方法对衬底进行预处理,清除其表面的有机物、金属杂质和氧化层;2)将衬底放入MOCVD系统中,将衬底加热至 $800\text{ }^{\circ}\text{C}$ 并在 $0.08\text{ MPa}$ 的氢气氛围下进行 $10\text{ min}$ 的热退火<sup>[28-29]</sup>;3)将衬底温度降至 $390\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,生长 $20\text{ nm}$ 的GaAs低温成核层,再升温至 $570\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,生长 $100\text{ nm}$ 的中温层,接着升温至 $650\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,生长 $520\text{ nm}$ 的GaAs高温外延层;4)生长应变平衡超晶格结构,每周期结构由 $10\text{ nm In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}/10\text{ nm GaAs}/20\text{ nm GaAs}_{0.9}\text{P}_{0.1}/10\text{ nm GaAs}$ 组成,周期间是 $80\text{ nm}$ 的GaAs间隔层,每组有4个周期的上述超晶格结构,共生长4组;5)生长 $500\text{ nm GaAs}$ 材料层,样品总厚度为 $2180\text{ nm}$ 。采用原

子力显微镜(AFM)和光致荧光光谱仪对GaAs外延层的表面形貌和晶体质量进行表征。

### 3 结果与讨论

对采用不同方案生长的样品的表面形貌进行表征。将采用应变平衡超晶格结构方案的样品和未采用该方案的样品分别编号为样品A和样品B。以样品的中心点为直角坐标中心,取样品中心位置和坐标轴上距中心 $1.5\text{ cm}$ 的4个区域(共5个代表区域)进行测试。在AFM轻敲模式下进行测试,所测区域的大小均为 $10\text{ }\mu\text{m}\times 10\text{ }\mu\text{m}$ 。样品A上各代表区域的表面形貌如图3(a)~(e)所示,样品B上各代表区域的表面形貌如图3(f)~(j)所示。两样品5个代表区域粗糙度的RMS测试值、RMS均值和RMS标准差列于表1。结果表明,与样品B相比,样品A粗糙度的RMS均值降低了 $39.6\%$ ,RMS标准差降低了 $56.9\%$ 。同时,本文将采用应变平衡超晶格方案的结果与Wan等<sup>[30]</sup>的常规应变超晶格方案的结果进行了对比。在他们的方案中,每组应变超晶格由10个周期的 $10\text{ nm In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}/10\text{ nm GaAs}$ 构成。在AFM表征下,他们制备的样品的RMS粗糙度为 $2.26\text{ nm}$ ( $10\text{ }\mu\text{m}\times 10\text{ }\mu\text{m}$ )。相较于他们的应变超晶格方案,采用本文所提方案生长的样品的RMS粗糙度降低了 $48.7\%$ 。综上所述,本文所提方案可以有效改善GaAs/Si(001)的表面形貌。

表 1 样品A和B的表面粗糙度

Table 1 Surface toughness of samples A and B

Sample	Root-mean-square (RMS) of surface toughness of different locations /nm					Average of RMS /nm	Standard deviation of RMS
	Center	Upper	Right	Lower	Left		
A	1.16	1.01	1.52	0.93	1.20	1.16	0.22
B	1.81	1.36	1.69	2.02	2.73	1.92	0.51

在经典的晶体生长理论中,晶体有三种基本外延生长模式<sup>[31]</sup>,即FM生长模式、SK生长模式和VW生长模式。后来,人们在对外延生长模式进行大量观察和深入研究的基础上又进一步提出了台阶流生长模式、台阶聚并生长模式和柱状生长模式<sup>[32-33]</sup>。这六种生长模式相互独立,每种模式具有各自的特征<sup>[34]</sup>。台阶流生长模式如图4(a)所示。原子沉积到原子台阶面上,然后通过扩散作用迁移到原子台阶处并进入晶格中形成化合物。每层原子按照这样的生长方式,如同台阶水平向前流动一样进行生长。在这样的生长模式下可得到平整的表面。材料在FM模式下进行层状生长的原理如图4(b)所示。沉积原子先在台阶面上二维成核,不同的二维核之间通过合并扩展成层;随着这一过程的进行,原子台阶的数量相应增多;当二维成核层生长到临界尺寸后,新的二维核在其上形成。这时,FM生长模式由逐层生长机制过渡到多层生长机

制<sup>[31]</sup>。相较于台阶流生长模式,在此生长模式下,随着二维成核层的数量增多,台阶密度不断增大,材料的表面形貌变得复杂,表面粗糙度在一定程度上增大。

在此应变平衡超晶格结构中, $\text{InGaAs}$ 和 $\text{GaAsP}$ 应变层中的 $\text{In}$ 、 $\text{P}$ 原子的扩散距离在应力作用下增大了<sup>[35]</sup>,这使得其可以更快地迁移到台阶处进行生长,避免了在台阶面上成核,从而提供了材料在台阶流模式下生长的条件。采用AFM在 $1\text{ }\mu\text{m}\times 1\text{ }\mu\text{m}$ 范围内对样品A和B的表面进行表征,以精确观察其表面形貌的差异。样品A表面的原子台阶均匀且较为平直,如图4(c)所示,这一表面形貌与Dong等<sup>[36]</sup>得到的结果一致,表明该材料在台阶流模式下生长。如图4(d)所示,样品B进行层状生长,其表面没有平直的原子台阶。在相同的表征范围内,样品B的台阶密度远大于样品A的台阶密度,且样品B的表面形貌更加复杂,说明样品A具有更好的表面形貌。

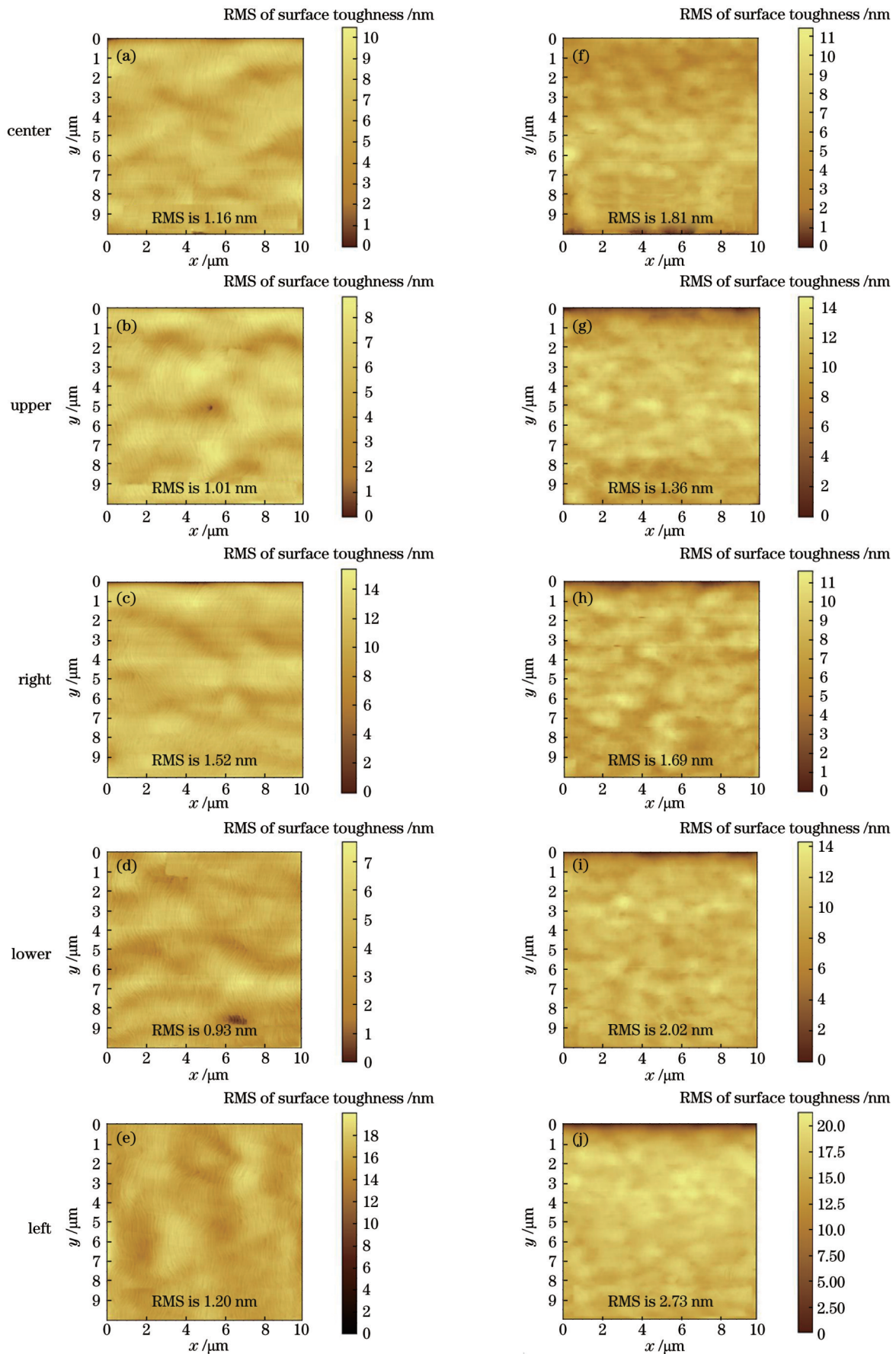


图 3 样品 A 和样品 B 的表面粗糙度测试结果(测量范围均为  $10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$ )。(a)~(e)样品 A;(f)~(j)样品 B  
 Fig. 3 Measured surface roughness of samples A and B ( measurement range is  $10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$ ). (a)~(e) Sample A; (f)~(j) sample B

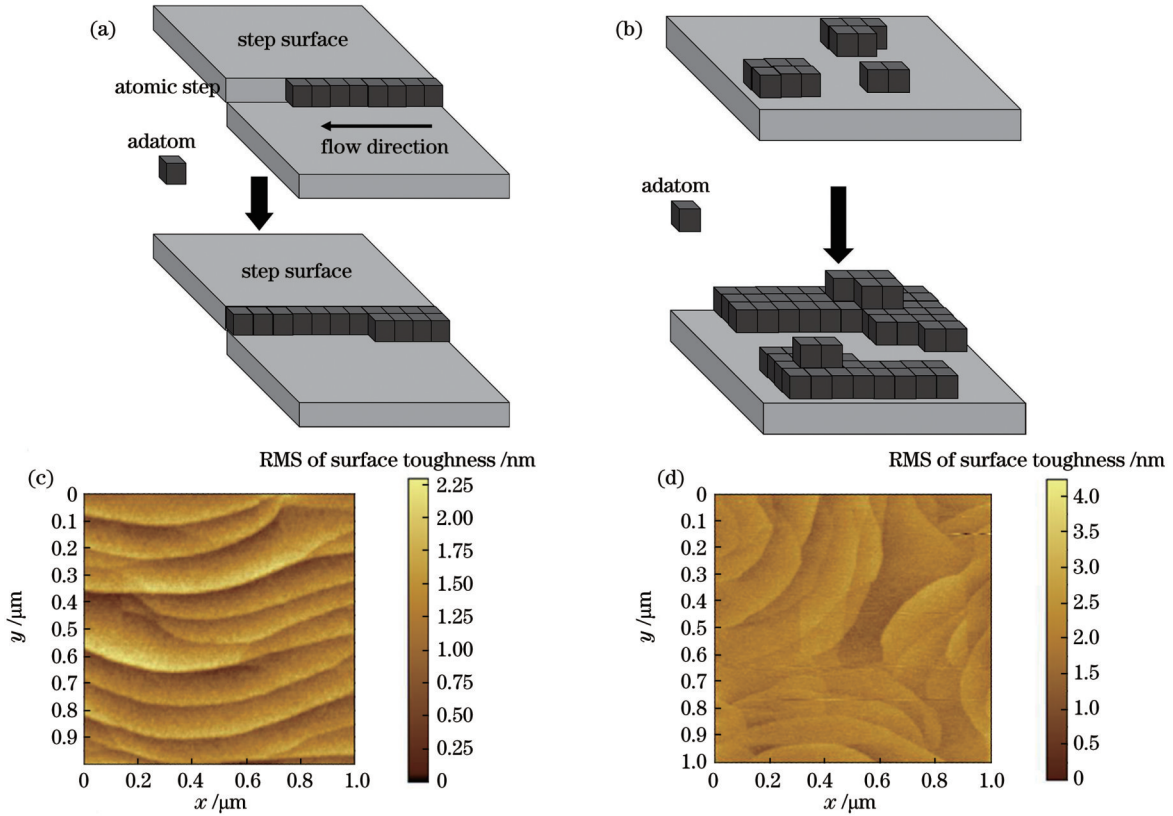


图 4 生长模式示意图以及样品 A、B 的表面形貌表征。(a) 台阶流生长模式示意图；(b) FM 生长模式示意图；(c) 样品 A 的表面形貌表征 ( $1 \mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$ )；(d) 样品 B 的表面形貌表征 ( $1 \mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$ )

Fig. 4 Schematic diagrams of growth modes and surface morphology characteristic of samples A and B. (a) Schematic diagram of step flow growth mode; (b) schematic diagram of FM growth mode; (c) surface morphology characterization of sample A ( $1 \mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$ ); (d) surface morphology characterization of sample B ( $1 \mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$ )

接下来对样品 A 和样品 B 的晶体质量进行表征。采用波长为 532 nm、激发功率为 0.2 mW 的微区光致荧光光谱仪进行晶体质量表征, 所选取的测量点的位

置、数量与 AFM 测试相同。PL 表征结果如图 5(a)~(e) 所示。为了直观地比较 PL 峰值 FWHM 的差距, 将样品 B 的 PL 峰值强度以适当比例放大。两种样品

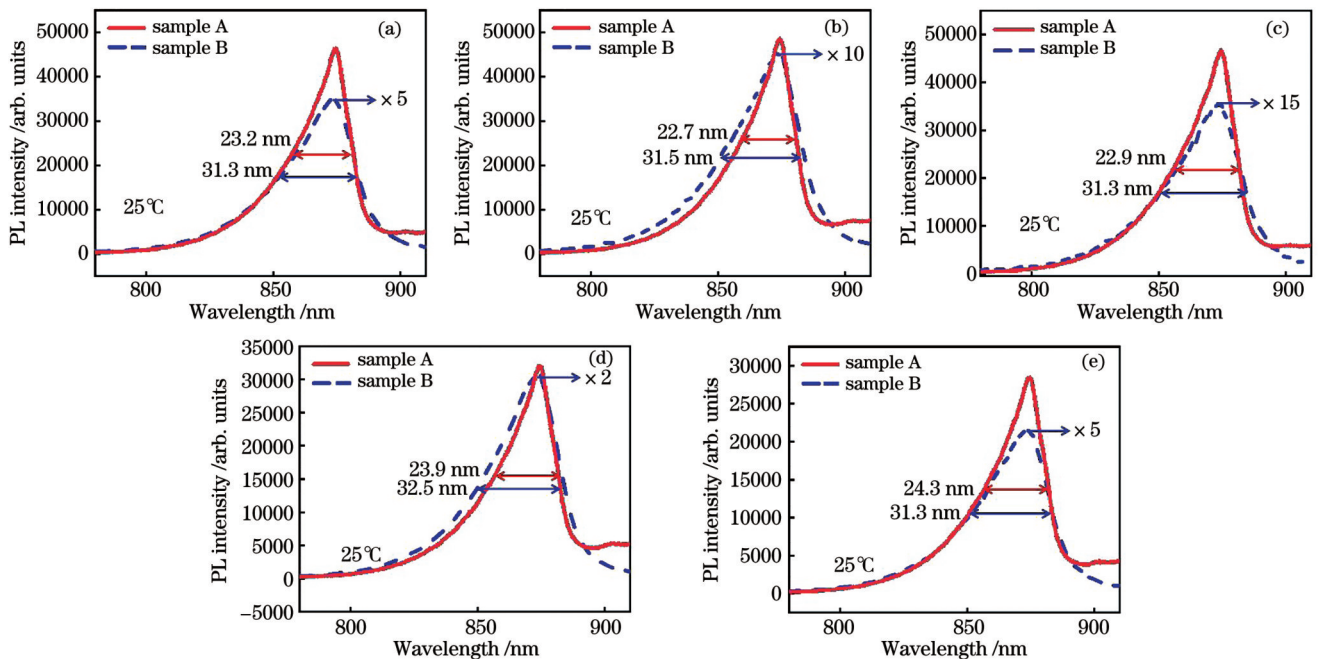


图 5 样品 A 和样品 B 外延层的 PL 表征曲线对比。(a) 中心；(b) 右侧；(c) 下侧；(d) 左侧；(e) 上侧

Fig. 5 Comparison of PL curves of GaAs epitaxial layer of samples A and B. (a) Center; (b) right; (c) lower; (d) left; (e) upper

的 PL 峰值强度和 FWHM 数据如表 2 所示。相较于样品 B, 样品 A 的平均 PL 峰值强度由 6726 提升至 40378, 提升幅度达到 500.3%, 平均 PL 峰值 FWHM 由 31.6 nm 降低至 23.4 nm, 降幅为 25.9%。同时, 本课题组采用高角分辨率双晶 X 射线衍射仪对晶体质量进行了表征, 表征结果如图 6 所示。样品 A 和样品 B 的 XRD 峰值强度分别为 15736 和 2750, 峰值 FWHM 分别为  $373''$  和  $536''$ 。这一结果表明, 经应变平衡超晶格方案改进后, XRD 曲线的 FWHM 降低了 30.4%, 峰值强度提升了 472.2%。由表征对比结果可知此应变平衡超晶格结构可以有效提升 GaAs 晶体的质量。

表 2 样品 A 和样品 B 的相对光谱强度、FWHM 及其均值  
Table 2 PL intensity, FWHM and their mean value of samples A and B

Location	PL intensity		FWHM /nm	
	Sample A	Sample B	Sample A	Sample B
Center	46200	7063	23.2	31.3
Upper	48539	4542	22.7	31.5
Right	46745	2333	22.9	31.3
Lower	31961	15378	23.9	32.5
Left	28443	4316	24.3	31.3
Average	40378	6726	23.4	31.6

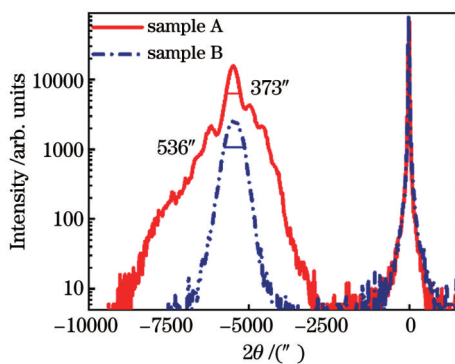


图 6 样品 A 和样品 B 外延层的 XRD 表征曲线

Fig. 6 XRD characterization curves of GaAs epitaxial layer of samples A and B

分析认为以下两方面原因共同促进了晶体质量的改善。首先, 应变平衡超晶格结构中的应变层数量远多于单一应变类型位错阻挡结构中的应变层数量, 提升了对位错的阻挡效果<sup>[37]</sup>, 从而有效改善了上层材料的晶体质量, 使 PL 峰值强度显著增大; 其次, 此应变平衡超晶格结构可使材料在台阶流模式下生长, 获得均匀且平整的表面, 有效降低了 PL 峰值 FWHM。相较于层状生长的材料, 应变平衡超晶格结构表面平整, 且没有二维成核层合并产生的小岛或小孔<sup>[38]</sup>, 有效抑制了缺陷在此表面上的形核, 提升了

基于此结构生长的材料的晶体质量和表面形貌。此结构不仅可以减少从 GaAs/Si(001)界面向上层材料传播的缺陷, 还可以使材料在台阶流模式下生长进而减少了生长过程中产生的缺陷, 因此显著提升了晶体质量。

从上述测试结果来看, 在表面形貌与晶体质量方面, 样品不同区域呈现出一定的不均匀性。分析后认为, 衬底清洗处理的非均匀性和生长设备的非理想化因素导致样品在光学性质和表面形貌上存在一定的非均匀性。

## 4 结 论

本课题组通过实验探究了应变平衡超晶格方案对 GaAs/Si(001)表面形貌和晶体质量的影响。结果表明, 采用该方案可以有效改善 GaAs/Si(001)的表面形貌。AFM 表征结果显示, 未采用该方案的 GaAs 外延层的 RMS 粗糙度为 1.92 nm ( $10 \mu\text{m} \times 10 \mu\text{m}$ ), 而采用该方案的 GaAs 外延层的 RMS 粗糙度降至 1.16 nm ( $10 \mu\text{m} \times 10 \mu\text{m}$ )。在晶体质量方面, 采用该方案的 GaAs 外延层的平均 PL 峰值强度相较于未采用该方案的 GaAs 外延层提升了 500.3%, 平均 PL 峰值 FWHM 降低了 25.9%, XRD 曲线的 FWHM 降低了 30.4%, XRD 峰值强度提升了 472.2%。

综上所述, 所提方案对 GaAs/Si(001)材料具有明显的表面改善和晶体质量提升效果。本文提出的方案为降低硅基 GaAs 材料的表面粗糙度提供了一条可行途径, 为推动大规模硅基光电集成芯片的产业化进程奠定了技术基础。

## 参 考 文 献

- [1] Liang D, Bowers J E. Recent progress in lasers on silicon[J]. Nature Photonics, 2010, 4(8): 511-517.
- [2] Kachris C, Tomkos I. Power consumption evaluation of all-optical data center networks[J]. Cluster Computing, 2013, 16(3): 611-623.
- [3] 周治平. 硅基光电子学及其应用[J]. 光学与光电技术, 2018, 16(1): 6-10.  
Zhou Z P. Silicon photonics and its applications[J]. Optics & Optoelectronic Technology, 2018, 16(1): 6-10.
- [4] 吕尊仁, 张中恺, 王虹, 等. 1.3  $\mu\text{m}$  半导体量子点激光器的研究进展[J]. 中国激光, 2020, 47(7): 0701016.  
Lü Z R, Zhang Z K, Wang H, et al. Research progress on 1.3  $\mu\text{m}$  semiconductor quantum-dot lasers[J]. Chinese Journal of Lasers, 2020, 47(7): 0701016.
- [5] 张卓, 宁永强, 张建伟, 等. 1160 nm 光泵垂直外腔面发射激光器设计及制备[J]. 中国激光, 2020, 47(7): 0701020.  
Zhang Z, Ning Y Q, Zhang J W, et al. Design and fabrication of 1160-nm optically-pumped vertical-external-cavity surface-emitting laser[J]. Chinese Journal of Lasers, 2020, 47(7): 0701020.
- [6] 宁永强, 陈泳屹, 张俊, 等. 大功率半导体激光器发展及相关技术概述[J]. 光学学报, 2021, 41(1): 0114001.  
Ning Y Q, Chen Y Y, Zhang J, et al. Brief review of development and techniques for high power semiconductor lasers[J]. Acta Optica Sinica, 2021, 41(1): 0114001.
- [7] Helkey R, Saleh A A M, Buckwalter J, et al. High-performance photonic integrated circuits on silicon[J]. IEEE Journal of Selected

- Topics in Quantum Electronics, 2019, 25(5): 8300215.
- [8] 任晓敏, 王琦. 晶体外延生长模式的完备理论描述与“后 S-K 异质兼容生长模式”的预言[J]. 北京邮电大学学报, 2014, 37(6): 1-5.
- Ren X M, Wang Q. Novel comprehensive theoretical description of epitaxial crystal-growth modes and the prediction of “post S-K compatible-heterogeneous-growth mode” [J]. Journal of Beijing University of Posts and Telecommunications, 2014, 37(6): 1-5.
- [9] Li K S, Yang J J, Lu Y, et al. Inversion boundary annihilation in GaAs monolithically grown on on-axis silicon (001)[J]. Advanced Optical Materials, 2020, 8(22): 2000970.
- [10] Li K S, Liu Z Z, Tang M C, et al. O-band InAs/GaAs quantum dot laser monolithically integrated on exact (001) Si substrate[J]. Journal of Crystal Growth, 2019, 511: 56-60.
- [11] Zhu S, Shi B, Li Q, et al. 1.5  $\mu\text{m}$  quantum-dot diode lasers directly grown on CMOS-standard (001) silicon[J]. Applied Physics Letters, 2018, 113(22): 221103.
- [12] Kunert B, Mols Y, Baryshnikova M, et al. How to control defect formation in monolithic III/V hetero-epitaxy on (100) Si? A critical review on current approaches[J]. Semiconductor Science and Technology, 2018, 33(9): 093002.
- [13] Tsuji T, Yonezu H, Ohshima N. Reduction of surface roughness of an AlAs/GaAs distributed Bragg reflector grown on Si with strained short-period superlattices[J]. Journal of Crystal Growth, 1999, 201/202: 1010-1014.
- [14] Shi B, Zhu S, Li Q, et al. 1.55  $\mu\text{m}$  room-temperature lasing from subwavelength quantum-dot microdisks directly grown on (001) Si [J]. Applied Physics Letters, 2017, 110(12): 121109.
- [15] Wei W Q, Wang J H, Zhang B, et al. InAs QDs on (111)-faceted Si (001) hollow substrates with strong emission at 1300 nm and 1550 nm[J]. Applied Physics Letters, 2018, 113(5): 053107.
- [16] Wei W Q, Feng Q, Guo J J, et al. InAs/GaAs quantum dot narrow ridge lasers epitaxially grown on SOI substrates for silicon photonic integration[J]. Optics Express, 2020, 28(18): 26555-26563.
- [17] Wei W Q, Wang J H, Zhang J Y, et al. A CMOS compatible Si template with (111) facets for direct epitaxial growth of III - V materials[J]. Chinese Physics Letters, 2020, 37(2): 024203.
- [18] Kwoen J, Jang B, Lee J, et al. All MBE grown InAs/GaAs quantum dot lasers on on-axis Si (001)[J]. Optics Express, 2018, 26(9): 11568-11576.
- [19] Wan Y T, Shang C, Norman J, et al. Low threshold quantum dot lasers directly grown on unpatterned quasi-nominal (001) Si[J]. IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, 2020, 26(2): 1900409.
- [20] Yang J J, Liu Z Z, Jurczak P, et al. All-MBE grown InAs/GaAs quantum dot lasers with thin Ge buffer layer on Si substrates[J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 2021, 54(3): 035103.
- [21] Shang C, Selvidge J, Hughes E, et al. A pathway to thin GaAs virtual substrate on on-axis Si (001) with ultralow threading dislocation density[J]. Physica Status Solidi (a), 2021, 218(3): 2000402.
- [22] Jung D, Callahan P G, Shin B, et al. Low threading dislocation density GaAs growth on on-axis GaP/Si (001) [J]. Journal of Applied Physics, 2017, 122(22): 225703.
- [23] Samonji K, Yonezu H, Takagi Y, et al. Evolution process of cross-hatch patterns and reduction of surface roughness in  $(\text{InAs})_m(\text{GaAs})_n$  strained short-period superlattices and InGaAs alloy layers grown on GaAs[J]. Journal of Applied Physics, 1999, 86(3): 1331-1339.
- [24] Matthews J W, Blakeslee A E. Defects in epitaxial multilayers: I . misfit dislocations[J]. Journal of Crystal Growth, 1974, 27: 118-125.
- [25] Matthews J W, Blakeslee A E. Defects in epitaxial multilayers: II . dislocation pile-ups, threading dislocations, slip lines and cracks[J]. Journal of Crystal Growth, 1975, 29(3): 273-280.
- [26] Matthews J W, Blakeslee A E. Defects in epitaxial multilayers: III . preparation of almost perfect multilayers[J]. Journal of Crystal Growth, 1976, 32(2): 265-273.
- [27] Dunstan D J. Strain and strain relaxation in semiconductors[J]. Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 1997, 8(6): 337-375.
- [28] Wang J, Liu Z L, Liu H, et al. High slope-efficiency quantum-dot lasers grown on planar exact silicon (001) with asymmetric waveguide structures[J]. Optics Express, 2022, 30(7): 11563-11571.
- [29] Chen W R, Wang J, Zhu L N, et al. Theoretical and experimental study on epitaxial growth of antiphase boundary free GaAs on hydrogenated on-axis Si(001) surfaces[J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 2021, 54(44): 445102.
- [30] Wan Y, Shang C, Norman J, et al. Low threshold quantum dot lasers directly grown on unpatterned quasi-nominal (001) Si[J]. IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, 2020, 26(2): 1-9.
- [31] Dubrovskii V G. Nucleation theory and growth of nanostructures [M]. Berlin: Springer, 2014.
- [32] 陆大成, 段树坤. 金属有机化合物气相外延基础及应用[M]. 北京: 科学出版社, 2009: 125-126.
- Lu D C, Duan S K. Fundamentals and applications of metal organic compounds vapor phase epitaxy[M]. Beijing: Science Press, 2009: 125-126.
- [33] Scheel H J. Historical aspects of crystal growth technology[J]. Journal of Crystal Growth, 2000, 211(1/2/3/4): 1-12.
- [34] Hong W, Lee H N, Yoon M, et al. Persistent step-flow growth of strained films on vicinal substrates[J]. Physical Review Letters, 2005, 95(9): 095501.
- [35] Markov I V. Crystal growth for beginners: fundamentals of nucleation, crystal growth and epitaxy[M]. Singapore: World Scientific, 2016.
- [36] Dong H L, Sun J, Ma S F, et al. Interfacial relaxation analysis of InGaAs/GaAsP strain-compensated multiple quantum wells and its optical property[J]. Superlattices and Microstructures, 2018, 114: 331-339.
- [37] George I, Becagli F, Liu H Y, et al. Dislocation filters in GaAs on Si[J]. Semiconductor Science and Technology, 2015, 30(11): 114004.
- [38] Ratsch C, Garcia J, Caflisch R E. Influence of edge diffusion on the growth mode on vicinal surfaces[J]. Applied Physics Letters, 2005, 87(14): 141901.

# Investigation of Surface Improvement of GaAs/Si(001) with Strain Balanced Superlattice

Li Jiachen, Wang Jun\*, Xiao Chunyang, Wang Haijing, Jia Yanxing, Liu Zhuoliang, Ma Bojie, Ming Rui, Ge Qing, Zhai Hao, Lin Feng, He Weiyu, Huang Yongqing, Ren Xiaomin  
*State Key Laboratory of Information Photonics and Optical Communications, Beijing University of Posts and Telecommunications, Beijing 100876, China*

## Abstract

**Objective** To realize a silicon-based photonic integrated chip circuit, we perform epitaxial deposition of GaAs material on a silicon substrate and subsequently prepare a silicon-based light source. However, there is a 4.1% lattice mismatch between Si and GaAs, resulting in three-dimensional (3D) growth of the material and formation of several 3D island structures in the initial growth stage of GaAs/Si (001), deteriorating its surface morphology. The roughness in the initial growth stage is difficult to reduce to an ideal level, which significantly affects the crystal quality of subsequent growth materials and leads to the failure of the overall preparation process of the device. Currently, the main solutions for reducing the surface roughness of GaAs/Si(001) materials are chemical mechanical polishing (CMP) and the growth of strained-layer superlattice (SLS). Because the epitaxial layer is too thin to be cleaned using the CMP technology, the possibility of polishing the epitaxial layer cannot be increased because of the complexity of epitaxial layer preparation. Therefore, the SLS growth technology has become the primary choice for improving the surface morphology of epitaxial materials. Generally, the SLS growth technology used in previous study matches the lattice of epitaxial materials, and its strain is significantly less than that of the SLS used as a dislocation filter layer. Therefore, it can only improve the surface morphology; however, it cannot reduce the material defects and improve the crystal quality. Therefore, it is necessary to use a dislocation filter layer to improve the crystal quality of GaAs/Si (001). In this study, the preparation technology of a strain-balanced superlattice structure that combines tensile and compressive strains is proposed. This technique can not only effectively improve the surface roughness of GaAs/Si (001) materials but also reduce material defects and enhance the crystal quality in the traditional dislocation filter layer. This not only simplifies the growth and preparation process of GaAs/Si (001) but also reduces the thickness of the epitaxial layer, thereby reducing the risk of thermal cracking caused by excessive material thickness.

**Methods** GaAs epitaxial layers with strain-balanced superlattices were grown through metal organic chemical vapor deposition on exact planar silicon (001), and pure GaAs epitaxial layers were grown under the same conditions. The surface morphology and crystal quality of the two samples were characterized by atomic force microscopy (AFM), photoluminescence (PL), and double crystal X-ray diffraction (XRD).

**Results and Discussions** The implementation of the strain-balanced superlattice technique changes the growth mode of the GaAs/Si(001) material from layer-by-layer growth to step-flow growth. As demonstrated in the AFM characterization, the average surface root mean square (RMS) roughness decreases from 1.92 nm ( $10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$ ) to 1.16 nm ( $10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$ ) (Fig. 3 and Table 1). The quality of the GaAs crystals is characterized by PL and XRD at room temperature. In comparison with the GaAs/Si(001) material without a superlattice, the PL peak intensity of the GaAs/Si(001) material with a superlattice increases by 500.3%, whereas the average PL peak full width at half maximum (FWHM) reduces from 31.6 nm to 23.4 nm (Fig. 5 and Table 2). The FWHM of the XRD curve decreases by 30.4%, whereas its peak intensity increases by 472.2% (Fig. 6).

**Conclusions** In this study, the effects of strain-balanced superlattice on the surface morphology and crystal quality of GaAs/Si(001) are experimentally investigated. The results indicate that this scheme can effectively improve the surface morphology of GaAs/Si(001). Compared with the GaAs epitaxial layer without the application of this technique, the average RMS roughness of the prepared sample decreases from 1.92 nm ( $10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$ ) to 1.16 nm ( $10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$ ). In terms of crystal quality, compared with GaAs epitaxial layer prepared without this technique, the average PL peak intensity under room temperature characterization increases by 500.3%, whereas the average PL peak FWHM decreases from 31.6 nm to 23.4 nm. The FWHM of the XRD curve decreases by 30.4%, whereas its peak intensity increases by 472.2%. In conclusion, this scheme effectively improves the surface morphology and crystal quality of GaAs/Si(001) materials. The scheme proposed in this paper provides a feasible way to improve the surface morphology of silicon-based GaAs materials and lays a technical foundation for promoting the industrialization of large-scale silicon-based photoelectric integrated circuits.

**Key words** materials; GaAs/Si(001); surface roughness; strain-balanced superlattice; metal organic chemical vapor deposition