

# Defectes en capes epitaxials d'arseniür de galli sobre silici

Anna Vilà, Atilà Herms, Albert Cornet i Joan R. Morante

Laboratori de Caracterització de Materials per a la Microelectrònica. Departament de Física Aplicada i Electrònica. Universitat de Barcelona

## Introducció

Un dels principals objectius de la recerca en electrònica és millorar les prestacions de velocitat dels equips. Als circuits basats en dispositius fabricats amb silici, l'augment de la velocitat de funcionament s'ha aconseguit mitjançant la reducció de les dimensions dels dispositius, és a dir, la disminució del camí que han de recórrer els portadors. Aquesta reducció ha estat possible gràcies als avenços en les tecnologies de creixement i processament dels materials, però encara que el ritme de progrés en aquestes àrees ha estat constant en els darrers anys, en algunes àrees està proper a la saturació imposada per les pròpies limitacions intrínseques del material. En conseqüència, per tal de fer un salt qualitatiu en l'augment de velocitat, s'ha enfocat la recerca darrerament a aconseguir materials amb majors velocitats inherents de portadors. Els portadors en els semiconductors compostos dels grups III-V tenen, en general, mobilitats més altes que en el silici i germani, i es poden obtenir així dispositius més ràpids. A més, l'amplada de la seva banda prohibida d'energia, és a dir, l'energia emesa o captada en una transició radiativa, pot ser modificada amb la formació de compostos ternaris del tipus  $A_xB_{1-x}C$ , o quaternaris,  $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ . Avui en dia es pot obtenir un gran ventall de semiconductors compostos amb bones propietats elèctriques i òptiques, que a més de les millores en velocitat obre grans perspectives en el camp de l'optoelectrònica: possibilitat d'obtenció de díodes làser semiconductors, guies d'ona, cavitats òptiques integrades, etc. L'optoelectrònica conjuga les àmplies possibilitats que s'han assolit en el control i tractament dels senyals a l'electrònica amb el camp de les comunicacions òptiques, amb les quals es pot transmetre molta més densitat d'informació i a molta més velocitat que en les comunicacions elèctriques.

Des dels inicis de l'electrònica una quantitat ingent d'esforços esmerçats ha portat el silici a un estat de gran maduresa tecnològica. El silici és l'estàndard indiscutible a la indústria a causa de la molt bona relació característiques/cost i no es preveu que sigui totalment substituït per l'arseniür de galli, d'altra banda el més madur dels semiconductors compostos. Una proposta millor que la substitució és intentar integrar les excel·lents propietats dels semiconductors compostos amb la

ben coneguda tecnologia de silici. Per això cal aconseguir fer créixer capes de compostos sobre substrats de silici utilitzant sofisticades tècniques de creixement de cristalls com l'epitàxia de feixos moleculars (MBE). El terme *Epitàxia* prové de dues paraules gregues: *epi* que significa sobre i *taxis* que vol dir ordenat, i s'aplica a processos utilitzats per fer créixer, sobre substrats cristallins, capes amb la mateixa ordenació atòmica. Dins d'una àmplia gamma de processos epitaxials l'MBE consisteix en la deposició per condensació sobre un substrat a temperatura baixa (200-500°C, és a dir, molt inferior a la temperatura de fusió del material) d'un element, o diversos en el cas de capes de materials compostos, evaporats en uns gresols anomenats cel·les d'efusió sota condicions de buit ultra alt. El creixement epitaxial d'arseniür de galli sobre silici ja s'empra usualment i s'ha aconseguit fer créixer altres compostos com fosfur de galli, arseniür d'indi, antimoniür d'indi, fosfur d'indi, o compostos ternaris i quaternaris com el fosfur-arseniür de galli-indi sobre silici, amb força bons resultats (Fang et al., (1990)).

L'epitàxia d'arseniür de galli sobre silici té actualment tres objectius principals:

- i) Servir com a material en si per integrar dispositius electro-òptics de GaAs amb elements de procés basats en silici. Per exemple, poden emprar-se làsers i fotodetectors de GaAs/AlGaAs per a comunicacions interxip en sistemes d'escala d'integració ultra gran.
- ii) Servir de substrat per integrar altres semiconductors compostos en silici, que poden créixer sobre una capa també de GaAs i permetre així una millor adaptació del paràmetre de xarxa i evitar alguns problemes de diferència de polaritat. Per exemple, integrar monolíticament detectors d'infraroig d'InSb en sistemes de processament d'imatges constituïts per dispositius de càrrega acoblada basats en silici.
- iii) Entendre les qüestions fonamentals implicades en el creixement d'un semiconductor polar sobre un que no ho és. Mentre que en el creixement homoepitaxial (silici sobre silici) l'estructura atòmica

i les propietats de l'epicapa segueixen perfectament les del substrat, en el creixement heteroepitaxial, l'estructura atòmica de l'epicapa depèn de la manera en què els àtoms constituents de la capa reaccionen amb la superfície del substrat i entre ells. Per assegurar el creixement de capes heteroepitaxials d'alta qualitat cal aprofundir en la comprensió de l'estructura de la superfície, la cinètica de nucleació inicial, l'energia superficial, de com les diferències entre les propietats inherents dels materials són acomodades, etc. En general els problemes associats amb el creixement d'arseniür de galli sobre silici són bastant representatius de les dificultats associades amb el creixement d'heteroestructures semiconductoras amb materials polars i no polars o amb paràmetres de xarxa diferents. El coneixement assolit en l'estudi d'aquest sistema ajudarà a la concepció i optimització d'altres sistemes heteroepitaxials.

A part de permetre processos d'integració monolítica, l'epitàxia de GaAs sobre silici té altres avantatges:

- i) Els diàmetres més grans aconseguits en oblies de semiconductors compostos són de 3 polzades, molt inferiors als assolits en silici (8 a 10"). La producció d'oblies de gran diàmetre requereix d'una tecnologia altament desenvolupada. Així el creixement de GaAs sobre Si permetria aprofitar el desenvolupament de la tecnologia de silici per produir epicapes de GaAs de gran diàmetre per actuar com a substrats.
- ii) El silici presenta millors propietats tèrmiques i mecàniques que l'arseniür de galli. El sistema heteroepitaxial explota les propietats individuals dels constituents per assolir un sistema complet altament optimitat. Els circuits de GaAs fabricats sobre Si poden presentar una major resistència a les fallades tèrmiques que els fabricats sobre substrats de GaAs.
- iii) El silici també presenta millors propietats mecàniques. Per assolir la mateixa resistència mecànica que el GaAs sobre Si, el GaAs sobre GaAs requereix substrats més gruixuts amb el corresponent increment en el cost.
- iv) El cost de les oblies de Si és molt inferior al de les de GaAs. El procés del creixement epitaxial és costós, però per estructures que inherentment requereixen d'un procés de creixement epitaxial, com són les heteroestructures, MODFET, pous quàntics, etc., el cost extra del creixement del GaAs sobre el Si és insignificant.

Malgrat tot, el creixement de GaAs sobre Si no està desproveït de problemes, entre els quals els més impor-

tants són: l'inici del creixement d'un semiconductor polar (GaAs) sobre un no polar (Si), el 4,1% de desajustament de les dues xarxes cristallines, i el 60% de diferència en els coeficients d'expansió tèrmica.

L'acomodament d'aquestes diferències dóna lloc a una important energia elàstica que se sol alliberar mitjançant dislocacions, defectes d'apilament, etc. És important que aquests defectes romanguin a la interfície i no es propaguin cap a la superfície, que és on es realitzaran els dispositius. En aquest camí s'han presentat diverses propostes, com són el creixement previ de capes tampó de InGaAs, creixement de precapes d'arsènic o de galli, l'ús de substrats de silici inclinats i l'intent d'assegurar que el creixement de les primeres capes sigui bidimensional.

En aquest treball presentem una descripció dels defectes usualment presents a les capes epitaxials i un estudi de diferents propostes amb vista a la reducció dels defectes presents en capes de GaAs sobre Si fetes créixer per ALMBE —*atomic layer molecular beam epitaxy*— un dels nous mètodes proposats per afavorir el creixement bidimensional de la capa (Briones et al., 1987). La tècnica emprada per a la caracterització dels defectes ha estat la microscòpia electrònica de transmissió.

Per a la caracterització dels defectes presents a les capes epitaxials la tècnica més adient és la microscòpia electrònica de transmissió (TEM). Com que interessa observar l'estructura dels materials a nivell atòmic, és necessària una resolució molt més elevada de la que s'obté amb la microscòpia convencional limitada per la longitud d'ona de la llum visible ( $> 3.000 \text{ \AA}$ ). Les longituds d'ona menors que l'àngstrom (de l'ordre de  $10^{-2} \text{ \AA}$ ) es poden obtenir amb un feix d'electrons a una energia adient ( $> 100 \text{ keV}$ ). Els microscopis electrònics estan constituïts de manera similar als òptics però la font de llum és un filament emissor d'electrons, les lents estan constituïdes per bobines magnètiques i la imatge es visualitza en una pantalla fluorescent o en una placa fotogràfica. En la microscòpia electrònica de transmissió la imatge es forma a partir dels electrons que travessen la mostra, suficientment prima, és a dir, electrons difractats per l'estructura del material. Aleshores, a més de la possibilitat d'obtenir la imatge directa, fent coincidir el pla focal amb la pantalla es pot visualitzar el diagrama de difracció del material, que conté informació important sobre l'estructura cristallina.

## Defectes a les capes epitaxiades

Primerament, abans de l'estudi experimental sobre la qualitat de les capes epitaxiades de GaAs sobre Si, cal fer una descripció dels defectes més usuals en aquestes capes, classificats segons la seva dimensionalitat.

### Defectes planars

Els defectes planars més usuals són: (i) defectes d'apilament, constituïts pels plans límit entre dos

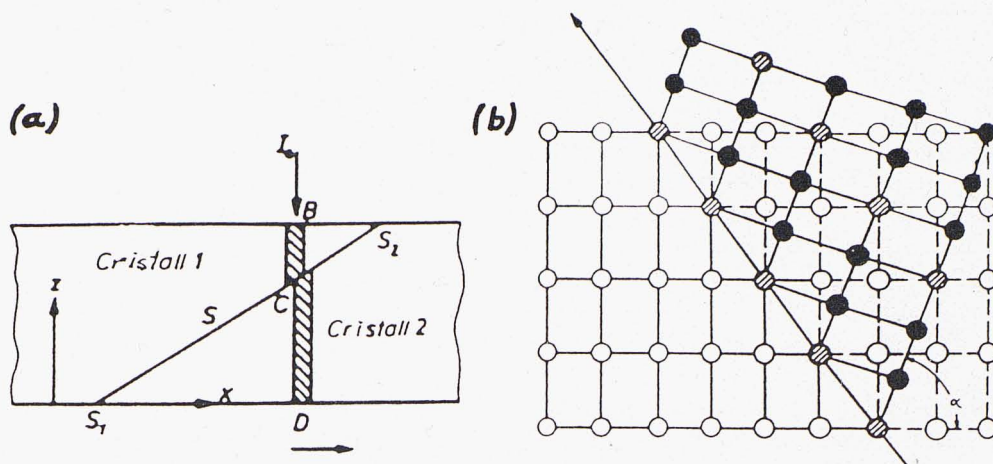


Figura 1: (a) Defecte d'apilament i (b) Twin

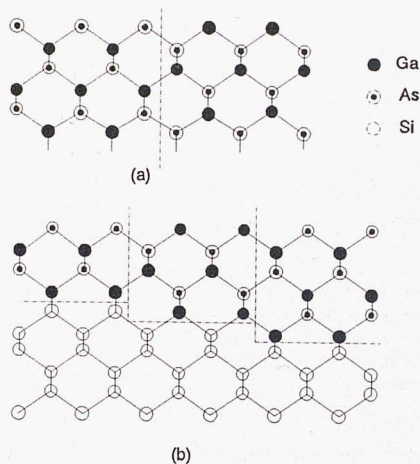


Figura 2: Formació de fronteres d'antifase (a) sense esglaons i (b) en superfícies amb esglaons d'una monocapa d'altura

cristalls amb un desplaçament relatiu (figura 1a); (ii) *twins* consistents en l'aparició d'un pla addicional de simetria (figura 1b); (iii) fronteres de dominis d'antifase, on els àtoms constituents ocupen subxarxes incorrectes (figura 2), d'aquests en parlarem més endavant.

L'estat de la superfície del substrat és bastant determinant sobre el tipus i la densitat de defectes a la capa crescuda. La presència de contaminants a la superfície afecta l'estructura química i la seva topologia, que, evidentment, influeixen sobre el subsegüent creixement epitaxial de dues maneres: interferència amb el procés inicial de nucleació i possible contaminació de les capes epitaxials. Per al GaAs sobre Si és crític aconseguir una superfície neta, perquè la presència de fins petites quantitats de contaminants empitjora fortament la qualitat de l'epicapa. Els àtoms de Ga o As, en primer ordre, no tenen llocs preferencials de nucleació sobre la superfície de Si i la presència de contaminants pot al-

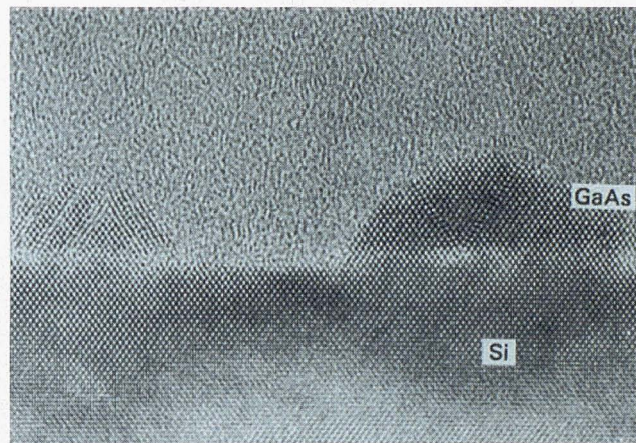


Figura 3: Illes tridimensionals en les primeres etapes de creixement de capes epitaxials per MBE convencional

terar aquesta indiferència fent que el Ga o l'As s'apilin a sobre o al voltant del contaminant. Aquest efecte dona lloc a illes de creixement tridimensional que, en entrar en contacte, poden no tenir la mateixa estructura cristal·lina i originar defectes planars a les superfícies que les limiten (figura 3).

Hi ha diversos procediments de neteja, que acaben generalment amb la formació d'una capa prima d'òxid per protegir la superfície neta en el transport del banc d'atac químic a la cambra de MBE. Aquest òxid és eliminat just abans del començament del creixement. Cal tenir present que aquests procediments produeixen una superfície neta però amb una certa rugositat; els esglaons són inherents a les superfícies cristal·lines. Aquests esglaons tenen efectes importants en la qualitat de l'epicapa, en la nucleació de dislocacions (com es veurà més endavant), i especialment en l'aparició de dominis d'antifase. L'estructura cristal·lina del Si i

del GaAs consisteix en dues xarxes de Bravais cúbiques amb cara centrada (fcc) interpenetrades. En el cas del Si les dues xarxes fcc són iguals i l'estructura és invariant sota rotacions  $\pi/2$ , sent les direccions  $[011]$  i  $[01\bar{1}]$  equivalents. En canvi, en el cas del GaAs una xarxa fcc és ocupada per l'As i l'altra pel Ga (també anomenada estructura zinc blenda) i les direccions esmentades ja no són equivalents. Aquesta distinció es fa més palesa en els plans (001), que consisteixen en capes alternes de Ga i As. Quan fem créixer GaAs sobre GaAs els àtoms de Ga i As no tenen cap ambigüitat per escollir els llocs a la xarxa i l'epicapa reproduceix exactament l'estructura cristal·lina del substrat. En canvi, quan creix sobre Si els llocs en els plans (100) són indistingibles i no hi ha llocs de nucleació preferent, a més el silici s'enllaça igual de bé amb els dos elements. Si el creixement és iniciat amb l'exposició simultània als feixos moleculars de Ga i As, en algunes àrees el galli pot formar la capa inicial i l'arsènic la resta de la superfície, fent que la primera monocapa sigui part arsènic i part galli. Així es produeixen enllaços As-As o Ga-Ga, que constitueixen les fronteres dels dominis d'antifase. La presència d'esglaons d'una monocapa (o un nombre senar de monocapes) d'alçada afavoreix la formació d'aquests dominis (figura 2). Malgrat tot, la formació dels dominis requereix d'una gran quantitat d'energia i pot ser que la cinètica inherent de creixement no n'afavoreixi la formació. Així és possible d'obtenir epicapes que, àdhuc amb esglaons de monocapa, estiguin lliures de fronteres de dominis d'antifase.

Les fronteres d'antifase constitueixen defectes planars estructurals carregats elèctricament. Com que els enllaços Ga-Ga tenen deficiència d'electrons i per tant actuen com a acceptadors, mentre que els As-As actuen com a donadors d'electrons, en general es pot preveure que hi haurà un nombre igual d'enllaços As-As i Ga-Ga. Així l'epicapa es comporta com un semiconductor altament compensat i degrada considerablement les prestacions dels dispositius que s'hi han fabricat (Fang et al, 1990). Hi han diverses solucions per evitar la formació dels dominis, com són el creixement de pre-capes d'arsènic o de galli amb diferents temperatures de substrat. Per detectar els dominis es poden utilitzar diverses tècniques, com gravat anisotròpic, difracció de raigs X, Raman, microscòpia electrònica de transmissió (TEM), RHEED i mètodes de caracterització elèctrica de les junctons p-n GaAs-Si.

### Dislocacions degudes al desaparellament de xarxes

La constant de xarxa de l'arseniür de galli és un 4,1% més gran que la del silici, i això ocasiona una tensió a la capa. L'energia associada amb aquesta deformació és proporcional al gruix de la capa. Si el gruix és petit (menor que l'anomenat *gruix crític*) el desaparellament és acomodat per la deformació elàstica de la xarxa, és

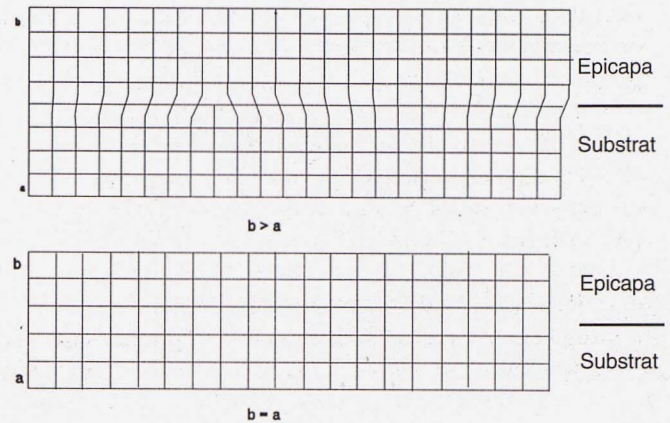


Figura 4: Xarxa d'una epicapa sobre un substrat: (a) gran desaparellament de xarxes (4%) i (b) xarxes idèntiques

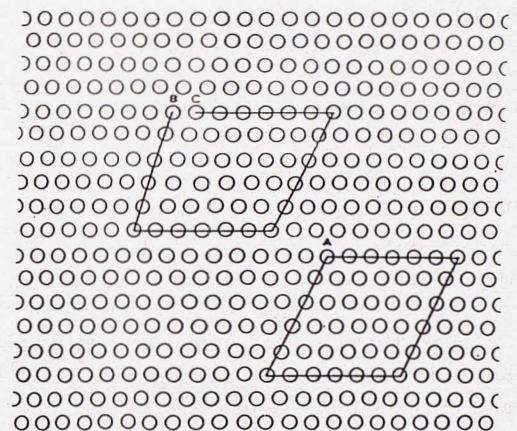


Figura 5: Il·lustració del concepte de vector de Burgers. El vector de Burgers uneix el punt inicial (B) i el final (C)

a dir, la xarxa de GaAs es comprimeix en el pla del creixement i s'expandeix en la direcció perpendicular. Quan les capes són gruixudes l'energia de deformació associada és major que l'energia de dislocació. Així és energèticament favorable alliberar la tensió de desadaptació mitjançant la creació de dislocacions, que són defectes unidimensionals que es poden entendre com la desaparició d'un pla atòmic a l'epicapa. A la figura 4 se'n presenta un exemple simplificat. En el primer cas (figura 4a) el desaparellament és del 4% i l'esforç el pren la dislocació, en canvi en el segon cas (figura 4b), on les xarxes tenen gairebé el mateix paràmetre, apareix un esforç coherent a tota la capa.

És important establir els paràmetres que ajudin a identificar les dislocacions. En general les dislocacions estan especificades en termes del vector de Burgers. El vector de Burgers es forma en intentar descriure un camí

tancat en una sèrie de desplaçaments iguals de la xarxa de Bravais en les quatre direccions (figura 5), i està constituït pel vector de la xarxa de Bravais que uneix el punt inicial (B) i el punt final del cicle (C) (Ashcroft et al., 1976). El vector de Burgers no depèn del camí escollit. A la figura 5 es mostren dos cicles per trobar els vectors de Burgers: on el cristall és perfecte el cicle es tanca (A), mentre que quan a dins del cicle hi ha un defecte, aquest no es tanca en tornar al punt de partida. El desaparellament acomodat per una dislocació és igual a la projecció del vector de Burgers en el pla del substrat. Així, una dislocació amb el seu vector de Burgers paral·lel al pla del substrat és preferible a una amb el vector inclinat perquè l'acomodament és més efectiu.

Les dislocacions més comunes als semiconductors amb estructura de diamant o de zinc blenda poden classificar-se en dos tipus: (1) aquells en què el vector de Burgers és paral·lel al pla de creixement, també anomenades dislocacions Lomer i (2) aquelles en què el vector de Burgers forma un angle de  $45^\circ$  amb la interfície. A les primeres el vector de Burgers és del tipus  $1/2\langle 011 \rangle$  i a les altres,  $1/2\langle 110 \rangle$ . Cal tenir en compte que en material crescut amb l'orientació  $[100]$  el símbol  $\langle 011 \rangle$  es refereix a les quatre direccions equivalents  $\pm[011]$  i  $\pm[0\bar{1}1]$ , que són perpendiculars a l'eix de creixement. De la mateixa manera, el símbol  $\langle 110 \rangle$  indica les vuit direccions equivalents que no són perpendiculars a l'esmentat eix, és a dir,  $\pm[110]$ ,  $\pm[1\bar{1}0]$ ,  $\pm[101]$  i  $\pm[10\bar{1}]$ .

Alguns autors postulen que les dislocacions Lomer es generen al cantó de l'esglaó de la superfície de silici. El seu vector de Burgers és normal a la línia de dislocació i estan ambdós continguts en el pla (100). Són molt eficients en l'acomodació del desaparellament i en les imatges de TEM s'observen franges extra en els plans (111) i ( $1\bar{1}\bar{1}$ ) (figura 6a).

En les del segon tipus el vector de Burgers forma un angle de  $45^\circ$  amb el pla del substrat i de  $60^\circ$  amb la línia de dislocació, no solen generar-se en els esglaons i presenten una franja extra només al llarg de la direcció (111) en les imatges TEM (figura 6b). A causa del fet que llur vector de Burgers està inclinat es necessiten més dislocacions d'aquest tipus per acomodar el mateix desaparellament que en les Lomer, tal com s'ha esmentat anteriorment, per això no són tan eficients.

Les dislocacions llisquen generalment al llarg de plans cristal·logràfics que continguin a la vegada el seu vector de Burgers i la línia de dislocació, per exemple les dislocacions Lomer poden desplaçar-se en el pla (100) i les de  $60^\circ$ , en el (111). En tots els cristalls d'estructura zinc blenda els plans (111) presenten més facilitat al lliscament, les dislocacions de  $60^\circ$  poden moure's fàcilment a través de la capa cap a la superfície. Aquesta propagació, a causa del seu aspecte, rep el nom de dislocació filiforme. A la figura 7 s'observen imatges de capes de GaAs sobre Si amb la presència de dislocacions filiformes

que es propaguen des de la interfície.

## Estudi de la reducció de dislocacions

Com hem dit anteriorment, en aquest treball ens proposem analitzar la reducció en la densitat de defectes produïda per la desorientació dels substrats i per l'aplicació d'un nou desenvolupament de la tècnica clàssica de creixement de capes anomenada ALMBE (Briones et al., 1987), que explicarem més endavant.

## Detalls experimentals

Les mostres estudiades estan constituïdes per un substrat de Si (001) amb la superfície de creixement inclinada  $0^\circ$ ,  $2^\circ$  i  $4^\circ$  cap a la direcció  $[110]$ . En un primer pas s'hi ha dipositat una capa de GaAs de 2.000 Å de gruix fet créixer per ALMBE a una temperatura de  $350^\circ\text{C}$ , posteriorment s'ha continuat el creixement de la capa de GaAs per MBE convencional a una temperatura de  $580^\circ\text{C}$ , en ambdós processos el ritme de creixement ha estat de  $0,8\mu/\text{m}$ .

La caracterització s'ha realitzat per TEM utilitzant un microscopi electrònic de transmissió HITACHI H-800 operant a 200 keV i un PHILIPS MT-430 ST operant a 300 keV. Les mostres han estat preparades de dues formes: (i) en vista plana, mitjançant atac químic i acabant amb un bombardeig iònic i (ii) en secció transversal, preparades amb poliment mecànic i bombardeig iònic.

## Resultats experimentals i discussió

Hi ha diversos mètodes per intentar reduir la densitat de dislocacions amb un èxit relatiu. Generalment tots es proposen, o bé induir preferentment la formació de dislocacions Lomer, o bé frenar la propagació cap a la superfície de les dislocacions generades a la interfície. Amb aquest darrer propòsit, una tècnica proposada consisteix en el dipòsit de capes tensionades.

Tota dislocació té un camp d'esforços associat; si hi introduïm camps d'esforços addicionals, aquests poden interactuar amb el de la dislocació i ser utilitzats per corbar la seva línia. Tant pot ser corbar la línia cap a una altra dislocació de forma que s'aniquilin mútuament, com corbar-la cap a la interfície, l'objectiu és que no arribin a la superfície (figures 7 i 8). Un material amb un paràmetre de xarxa major que el del substrat introdueix un esforç compressiu que repelleix la dislocació de la font de l'esforç. Aquesta força, anomenada força Peach-Koehler, depèn de la tensió deguda a la deformació de la xarxa,  $\epsilon$ , i del gruix de la capa,  $h$ . No sols s'han utilitzat capes simples tensionades sinó també superxarxes de capes tensionades, InGaAs/GaAs, GaAsP/GaAs, etc.. La força requerida per corbar les dislocacions imposa restriccions en el gruix mínim de la capa, ja que una capa massa prima pot ser que no introdueixi un esforç suficient per corbar les dislocacions. Cal tenir en compte, però, a l'hora de dipositar capes tensionades (capes amb

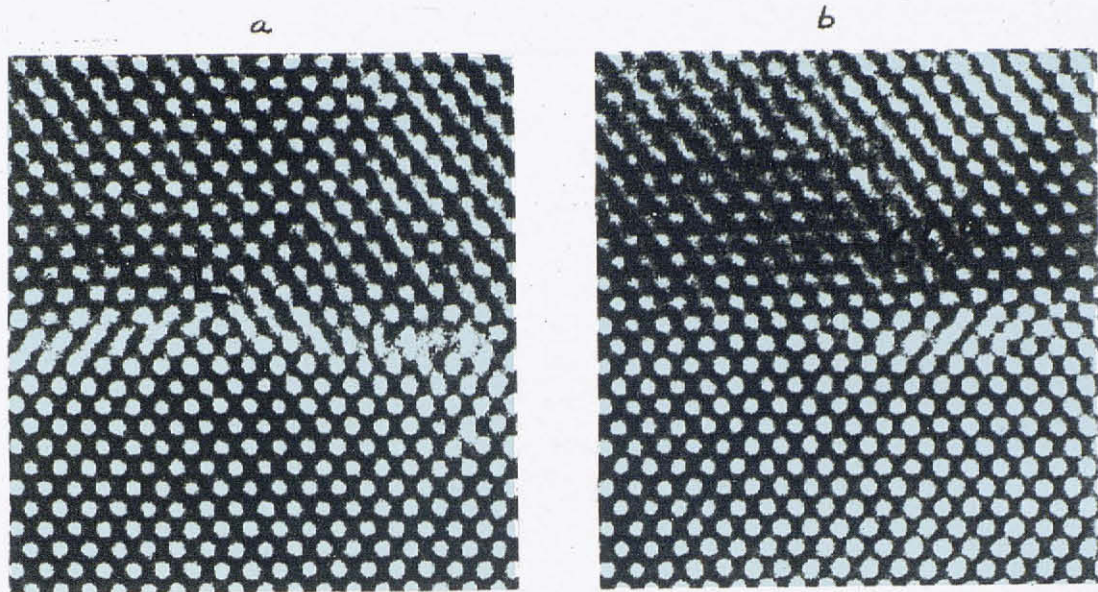


Figura 6: Micrografies d'alta resolució (a) d'una dislocació de tipus Lomer i (b) d'una dislocació de  $60^\circ$

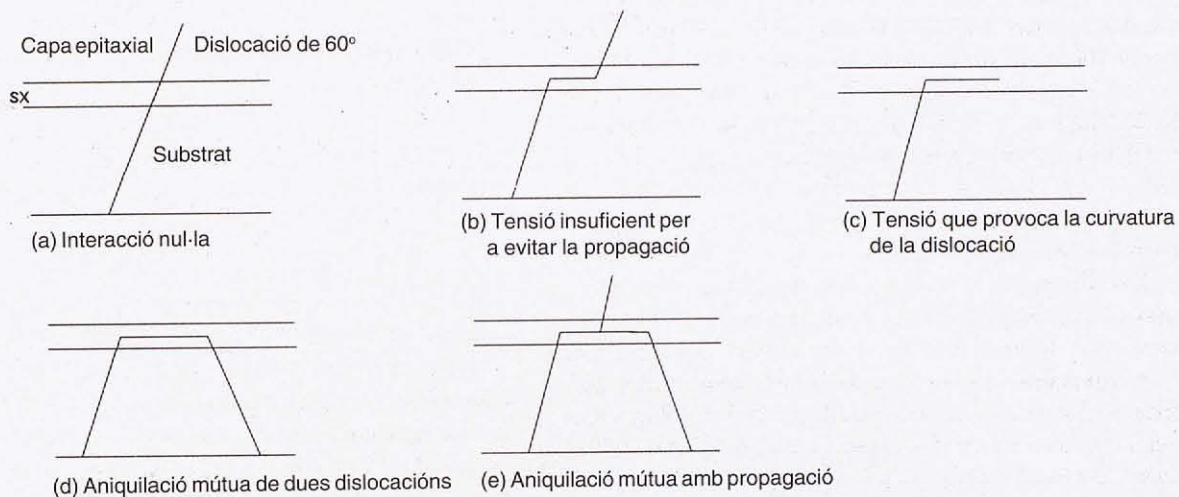


Figura 8: Interacció entre la tensió induïda per una superxarxa (SX) de capes tensionades i una dislocació filiforme

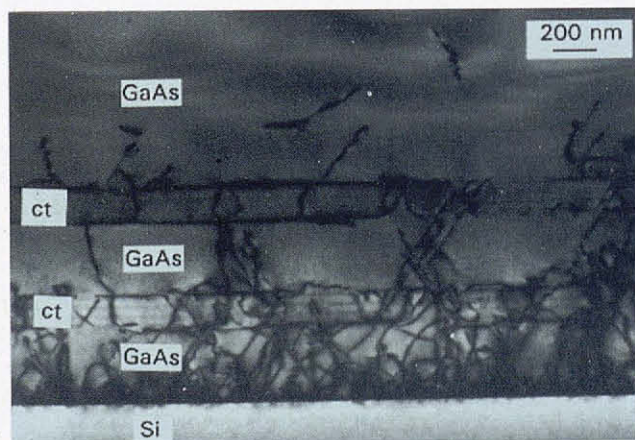


Figura 7: Propagació de dislocacions filiformes cap a la superfície. La presència de capes tensionades (ct) atura la propagació d'un bon nombre d'elles

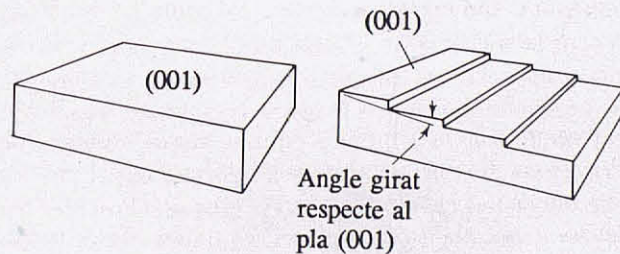


Figura 9: (a) Substrat amb orientació (001) i (b) substrat desorientat respecte al pla (001)

paràmetre de xarxa diferent del GaAs), que el seu gruix no pot ultrapassar l'anomenat *gruix crític*, d'altra forma introduiríem dislocacions addicionals.

Altres sistemes de reducció de dislocacions consisteixen a aplicar processos de recuita a alta temperatura durant un període de temps apropiat, que originen una relaxació de la tensió que produeix una reordenació de les dislocacions, per tal de disminuir l'energia del sistema; així la recuita ajuda a la conversió de dislocacions de  $60^\circ$  en dislocacions Lomer, menys perniciosos, i millora la qualitat de l'epicapa (Houdre et al., 1990).

### Desorientació del substrat

S'ha observat que les dislocacions Lomer solen donar-se allà on hi ha un esglaó a diferència de les de  $60^\circ$ , és a dir, que els esglaons redueixen el nombre de fonts actives per a la generació de dislocacions de  $60^\circ$ . Cal tenir en compte que el 4,1% de desajustament de xarxa provoca una dislocació cada 25 plans atòmics. Tal com podem veure a la figura 9, quan volem obtenir un substrat amb una inclinació determinada respecte a la seva orientació nominal (001) produïm esglaons a la superfície. Si podem aconseguir una superfície que presenti un esglaó cada 25 plans atòmics podrem induir el nombre de dislocacions Lomer adient per acomodar el desajustament de les xarxes. L'angle de desorientació per produir un esglaó cada 25 plans atòmics és  $1,6^\circ$ ; generalment, però, es requereix un angle superior, ja que els esglaons a la superfície de Si no es produeixen a intervals regulars.

Estudis sobre l'efectivitat de la desorientació de substrats en la reducció de dislocacions han obtingut que les capes fetes créixer per MBE sobre substrats desorientats  $4^\circ$  cap a la direcció [110] presenten menys dislocacions filiformes que les mostres amb orientació (001) exacta, i a més les dislocacions estan confinades en una regió d'aproximadament  $1 \mu\text{m}$  de gruix a partir de la interfície GaAs/Si, en conseqüència la densitat de dislocacions a prop de la superfície és uns 2 o 3 ordres de magnitud més petita que en la mostra (001). Més darrerament s'ha trobat que la desorientació de  $2^\circ$  és més adient perquè una densitat més gran d'esglaons pot produir un augment de la proporció de les dislocacions de  $60^\circ$  (Vilà et al., 1991).

### Creixement bidimensional

Tal com hem esmentat, el desajustament de xarxa entre una capa heteroepitaxial i el substrat és acomodat per la tensió elàstica i/o per dislocacions. L'estabilitat ideal requeriria la generació d'una xarxa creuada de dislocacions Lomer a prop de la interfície. Però les dades experimentals indiquen la presència d'estructures aleatòries de dislocacions més que un únic tipus. L'origen d'aquesta configuració pot ser un mecanisme de creixement tridimensional d'illes a les primeres etapes del creixement de la capa. A causa del fet que les zones coalescents entre grans poden originar una xarxa de dislocacions de frontera, fóra interessant aconseguir les

condicions d'un creixement bidimensional. Una de les alternatives proposades consisteix en un nou desenvolupament de la tècnica MBE, anomenada MBE de capa atòmica (ALMBE), basada en la pertorbació cíclica del front de creixement a la capa atòmica per alternança o interrupció dels feixos moleculars procedents de les cel·les d'efusió (Briones et al., 1987). En enriquir la nucleació de capes successives, la modificació del mecanisme de creixement causat per aquestes pertorbacions afavoreix el creixement bidimensional. A la figura 3 es mostrava una capa feta créixer per MBE convencional, i s'hi observava la presència d'illes, mentre que a la figura 10, corresponent a capes ALMBE, el creixement és efectivament bidimensional.

A la figura 11 es presenta una micrografia general en vista plana de la interfície GaAs/Si obtinguda amb el feix d'electrons paral·lel a la direcció [001]. S'hi observa un patró d'interferència degut a la superposició de dues xarxes periòdiques amb període diferent (franges de Moiré). Les franges són paral·leles a les direccions [110] i  $[\bar{1}10]$  i estan separades  $4,9 \text{ nm}$ ; tenint en compte que la distància entre aquestes franges,  $D$ , és:

$$D = \frac{d_1 d_2}{d_1 - d_2} \quad (1)$$

on  $d_1$  i  $d_2$  són els espais interplanars dels materials de substrat i de capa, respectivament, el valor trobat correspon a la interferència entre les reflexions del GaAs i del Si. Les no uniformitats en l'estructura de franges són degudes a la presència de defectes i variacions locals de la tensió. En les nostres mostres s'observa que els defectes presents són dislocacions filiformes i defectes planars, com són els defectes d'apilament, que, d'altra banda, són els defectes més comunament trobats al GaAs sobre Si obtingut per MBE convencional.

A la figura 12 es mostra una micrografia de la secció transversal de la capa de GaAs (ALMBE). Comparant amb altres imatges de mostres fetes créixer per MBE convencional, s'hi observa una disminució important de defectes bidimensionals, en concret la densitat de defectes d'apilament és de l'ordre del límit de detectabilitat del TEM ( $1 \times 10^4 \text{ cm}^{-2}$ ), a més, la densitat de dislocacions, que calculada a prop de la interfície ha resultat ser de  $10^9 \text{ cm}^{-2}$ , s'observa que disminueix notablement cap a la part superior de la capa fins a valors de l'ordre de  $10^7 \text{ cm}^{-2}$  a les darreres  $0,5 \mu\text{m}$ . Aquesta important reducció de la densitat de dislocacions filiformes és deguda al confinament efectiu de dislocacions de desajustament a la interfície.

Les imatges de secció transversal en alta resolució de la interfície, com la de la figura 13, ens confirmen la presència majoritària de dislocacions de tipus Lomer i alguna de  $60^\circ$ . Tal com s'ha comentat abans, el tipus de dislocació pot ser identificat per la presència de plans extra (111) i  $(11\bar{1})$  en les primeres i només (111) per a les de  $60^\circ$ , en el cantó del Si.

En les observacions de mostres en vista planar les dislocacions poden també distingir-se a partir de les franges de Moiré perquè les de  $60^\circ$  mostren un contrast molt fort a la condició exacta de Bragg, el qual disminueix molt ràpidament quan es desvia d'aquesta condició, mentre que les altres mostren un bon contrast fins i tot en condicions de feix dèbil. A les imatges d'aquest tipus (figures 14 i 15), quan només la reflexió 220 (orientació que és perpendicular al vector  $[1\bar{1}0]$ ) és difractada, el conjunt de dislocacions que corren al llarg d'aquesta direcció està fora de contrast (figura 14), mentre que usant la reflexió 20 (perpendicular al  $[110]$ ) el grup de dislocacions en aquesta direcció és el que s'exhaureix (figura 15). Això confirma que aquesta xarxa és deguda a la distribució més o menys periòdica de dislocacions de tipus Lomer i algunes de  $60^\circ$  on es produeix una pèrdua de contrast. Així l'acomodació de la tensió deguda al desparellament de les dues xarxes cristal·lines es produeix majoritàriament per les dislocacions, diguem, més favorables fent que disminueixi considerablement la propagació de dislocacions filiformes cap a la superfície de la capa.

La perfecció de la xarxa creuada de dislocacions es fa evident per la presència de *spots* (satèl·lits de difracció), tal com es mostra a la figura 16. Apareixen a causa de la modulació periòdica de la tensió introduïda pel conjunt de dislocacions que actua com una xarxa bidimensional; la mesura del seu període resulta ser 9,4 nm en la direcció  $[1\bar{1}0]$  i 8,5 nm en la  $[110]$ . Per tal de comprovar la mesura d'aquesta periodicitat hem aplicat la transformada òptica de Fourier a les imatges corresponents a les figures 14 i 15. La transformada presenta feixos ben determinats que assegurin una regularitat remarkable a la xarxa creuada, i obté valors en bona concordança amb els anteriors. El fet d'obtenir diferents valors per a les direccions  $[1\bar{1}0]$  i  $[110]$  corrobora la influència de la desorientació de la superfície en la densitat de dislocacions, ja que en el primer cas la desorientació provoca la presència d'esglaons que afavoreixen la nucleació de dislocacions de tipus Lomer, en canvi en el segon cas l'absència d'esglaons provoca un augment de la proporció de dislocacions de  $60^\circ$ , menys eficients en l'acomodació del desparellament de xarxa i, per tant, se'n necessita una densitat més alta.

## Conclusions

La densitat de defectes d'apilament en les mostres ALMBE està gairebé al límit de detectabilitat del TEM ( $1 \times 10^4 \text{ cm}^{-2}$ ). En comparació amb mostres fetes créixer per MBE convencional, aquesta gran reducció de la densitat de defectes planars associats generalment a mecanismes de creixement tridimensional a les primeres etapes de creixement, i la uniformitat de la xarxa de dislocacions de tipus Lomer confirma que el creixement d'epicapes per ALMBE tendeix a ser bidimensional.

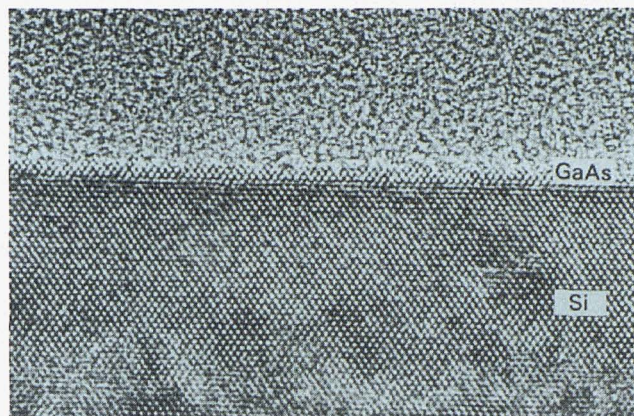


Figura 10: Capa de GaAs crescuda sobre Si per ALMBE en les primeres etapes de creixement. S'observa un creixement de tipus bidimensional



Figura 11: Micrografia en vista planar d'una interfície GaAs/Si on s'observa una malla creuada de franges de Moiré



Figura 12: Micrografia en secció transversal on s'observen alguns defectes d'apilament i dislocacions filiformes



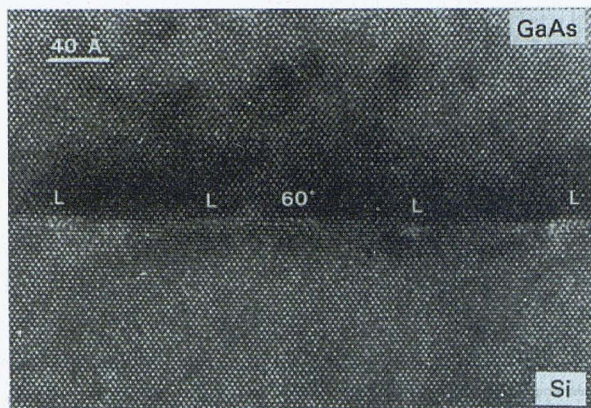


Figura 13: Imatge d'alta resolució de la interfície GaAs/Si que mostra la presència majoritària de dislocacions Lomer i alguna de  $60^\circ$

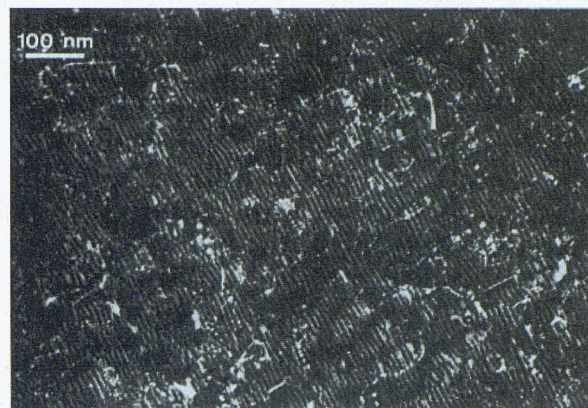


Figura 15: Micrografia semblant a la de la figura 14 en la que s'ha usat la reflexió  $2\bar{2}0$ . S'observa el conjunt de dislocacions perpendicular al de la figura anterior



Figura 14: Micrografia en vista planar de la interfície GaAs/Si en la que s'ha usat la reflexió 220. S'observa un conjunt de dislocacions perpendiculars a aquesta direcció

La densitat de dislocacions, a prop de la interfície és de  $10^9 \text{ cm}^{-2}$ . Aquesta densitat disminueix considerablement cap a la part superior de la capa fins a valors de l'ordre de  $10^7 \text{ cm}^{-2}$  a les darreres  $0,5\mu$ . Aquesta important reducció de la densitat de dislocacions filiformes és deguda al confinament efectiu de dislocacions de desaparellament a la interfície. Aquest fet, juntament amb el fet que la densitat de dislocacions en les direccions paral·leles i perpendiculars a la d'inclinació és diferent, confirma que el grau d'inclinació del substrat

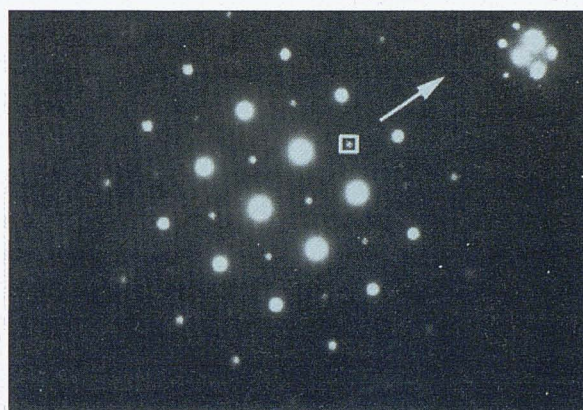


Figura 16: Diagrama que mostra les difraccions de Si i GaAs. Els 'spots' satèl·lits es deuen a la modulació periòdica de la tensió induïda per la xarxa de dislocacions

( $2^\circ$ ) és l'adient per a un alliberament de la tensió majoritàriament mitjançant dislocacions de tipus Lomer.

### Agraïments

Agraïm als serveis científic-tècnics de la Universitat de Barcelona per la seva col·laboració i suport en la microscòpia electrònica; al Dr. P.Ruterana, de l'École Polytechnique de Lausanne, la seva col·laboració, i a Y.González, L.González i F.Briones, del CNM de Madrid, la fabricació de les mostres.

### Bibliografia

- FANG, S.F.; ADOMI, K.; IYER, S.; MORKOÇ, H.; ZABEL, H.; CHOI, C. i OTSUKA, N., *J. Appl. Phys.*, **68**, R31 (1990).  
 BRIONES, F.; GONZALEZ, L. i RUIZ, A., *Appl. Phys.*, **A 49**, 729 (1987).  
 ASHCROFT, N.W. and MERMIN, N.D., *Solid State Physics*, (Holt, Rinehart and Winston, 1976).  
 HOUDRE, R. I MORKOÇ, H., *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*, **16**, 91 (1990).  
 VILÀ, A.; CORNET, A.; MORANTE, J.R.; GONZALEZ, Y.; GONZALEZ, L. i BRIONES, F., *Materials Letters*, **11**, 155 (1991).