

COMPHETI

Compliance des hétérointerfaces
semiconducteurs/oxydes pour
l'intégration monolithique d'InP sur
silicium

INL (G. Saint-Girons *et al.*)

LPN (L. Largeau, G. Patriarche *et al.*)

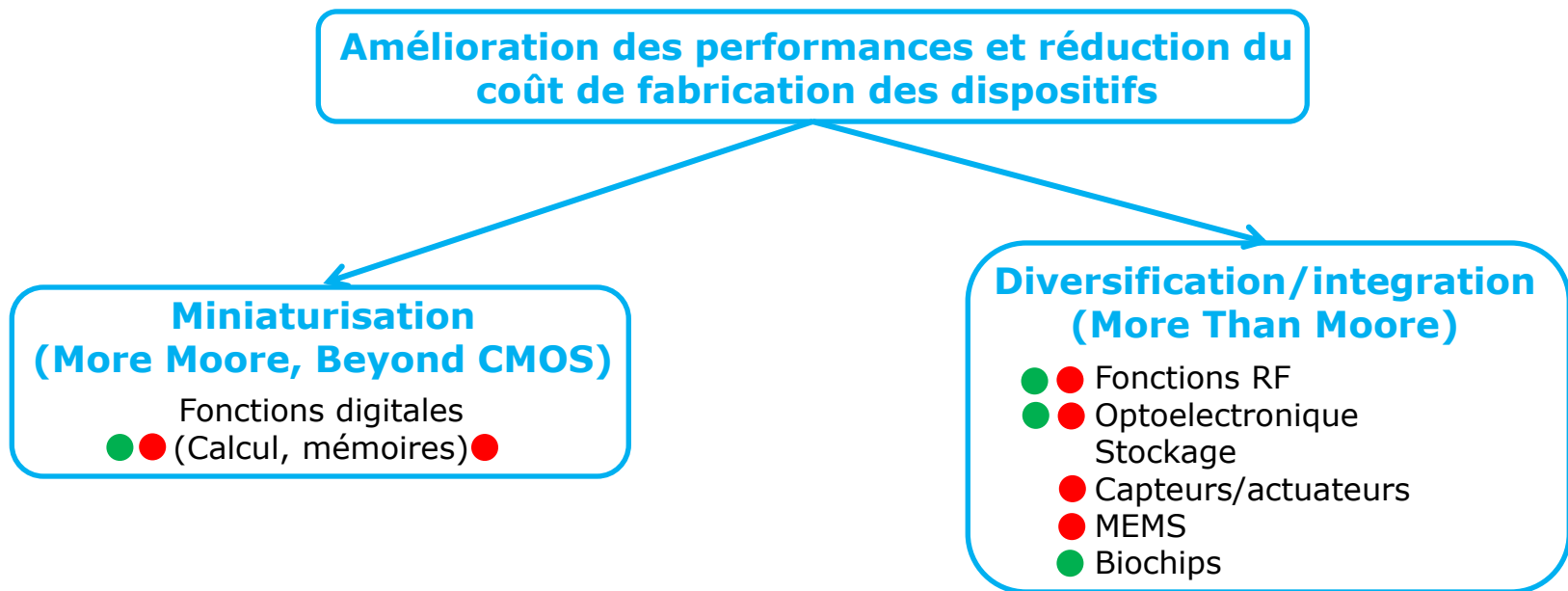
IEMN (I. Lefebvre *et al.*)

INAC (G. Renaud, V. Favre-Nicolin *et al.*)

Journées Nationales Nanosciences et
Nanotechnologies 2012



Les enjeux de l'intégration en micro-optoélectronique



Diversification/integration : à l'échelle

- du circuit imprimé
- du circuit intégré : report/vignetage
- du composant: vignetage ou **épitaxie**
- de l'hétérostructure : **épitaxie**

● Oxydes cristallins/Si

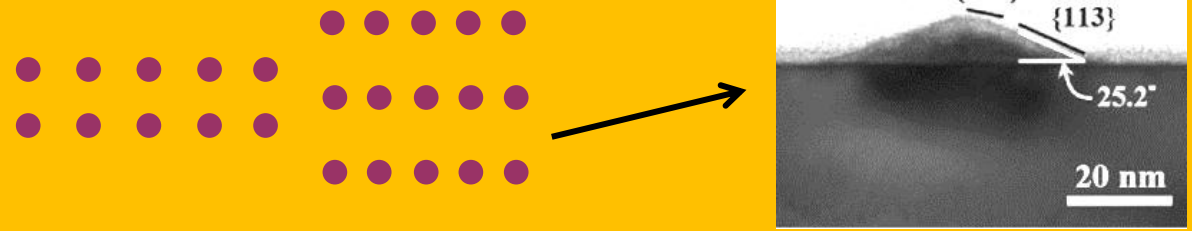
● III-V/Si

Le paradigme de la croissance contrainte

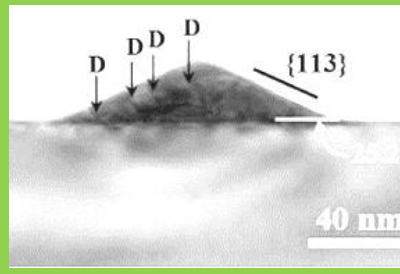
Relaxation plastique

« Un matériau désaccordé est initialement contraint sur son substrat »

Elastic regime

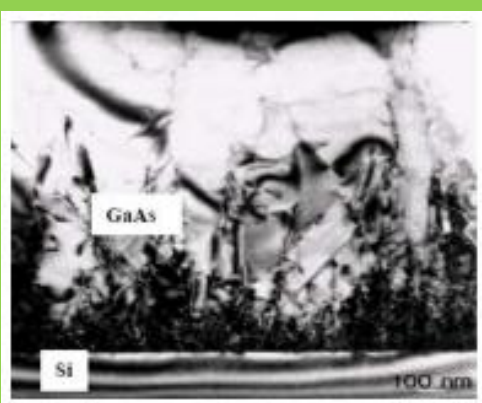


The diagram shows two lattice structures: a smaller one (teal dots) and a larger one (purple dots). An arrow points from the larger lattice to an XRD pattern showing a peak at 25.2° with labels for $\{105\}$ and $\{113\}$ planes. A scale bar of 20 nm is shown.



The XRD pattern shows a peak at 25.2° with labels for $\{113\}$ planes and several 'D' labels indicating dislocations. A scale bar of 40 nm is shown.

Plastic regime



The micrograph shows a GaAs layer on a Si substrate. The GaAs layer is fractured, indicating plastic relaxation. Labels 'GaAs' and 'Si' are present. A scale bar of 100 nm is shown.

$$E \propto \frac{1+\nu}{1-\nu} \times \left(\frac{\Delta a}{a}\right)^2 \times e$$

Critical thickness
(A few ML for $\Delta a/a = \text{a few \%}$)

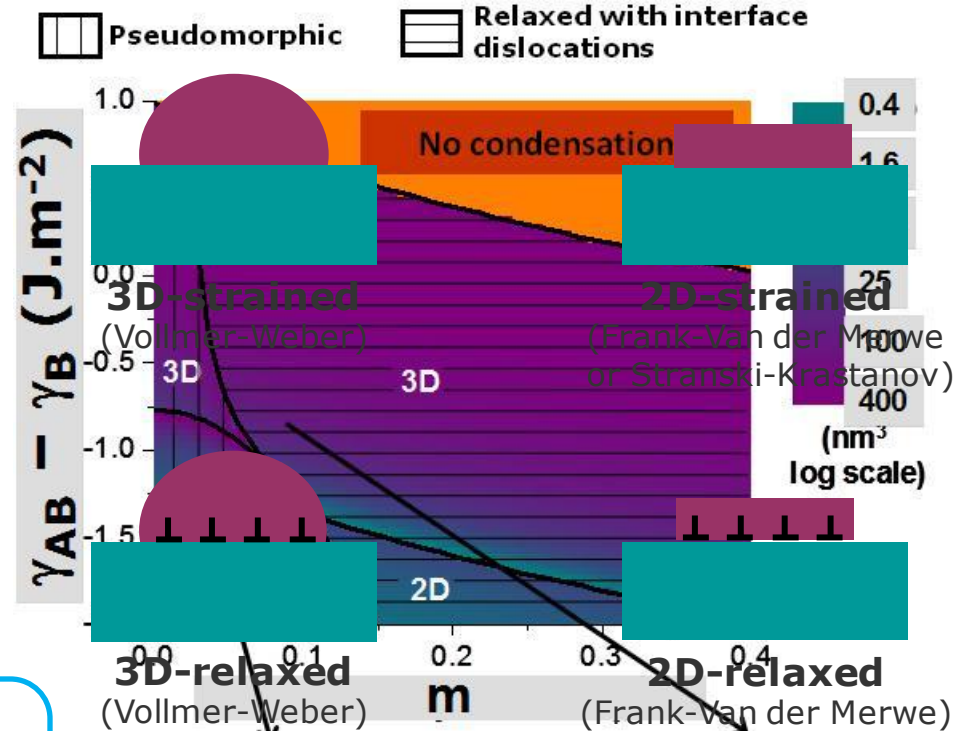
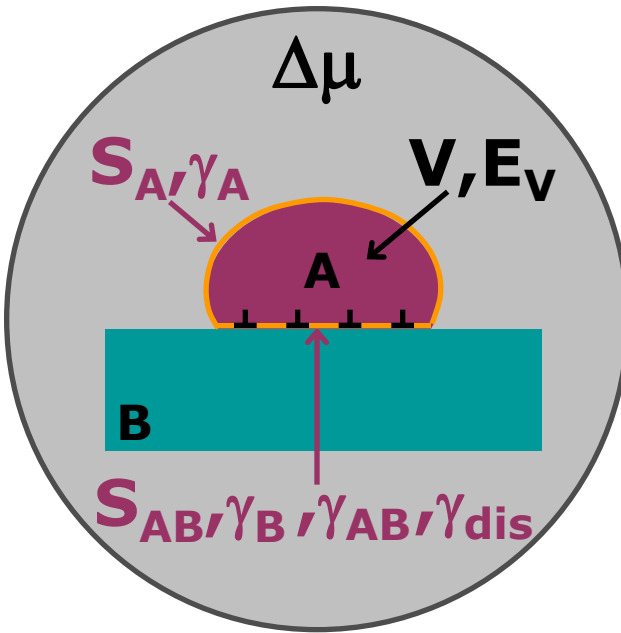
→ Limitation importante de l'épitaxie

La croissance directe de GaAs/Si ($\Delta a/a = 4\%$) ou d'InP/Si ($\Delta a/a = 8\%$) est impossible

Adhesion, désaccord et accommodation

Un diagramme de phase pour l'hétéroépitaxie

$$\Delta G = -V \cdot \Delta\mu + S_A \cdot \gamma_A + S_{AB} \cdot (\gamma_{AB} - \gamma_B) + V \cdot E_V$$



Les dislocations d'interface se forment quand m est grand et quand l'adhésion est faible

☺ : pas de défauts traversant → intégration?

Paradigme de la croissance contrainte

Dislocations d'interface

Saint-Girons et al. PRB **80**, 155308, (2009)

COMPHEITI : exploiter les spécificités du système faiblement lié InP/STO pour l'intégration monolithique de III-V/STO/Si

01 : comprendre la physique des interfaces semiconducteur/oxyde

02 : fabriquer et caractériser des hétérostructures à puits quantiques d'InAsP/InP/STO/Si (lasers)

Partenaires et moyens mis en oeuvre

INL :

- Epitaxie :
oxydes/Si et III-V/oxyde/Si
- Caractérisations structurales :
RX, TEM, XPS, synchrotron, AFM
- Fabrication et caractérisation des composants
- Modèles « empiriques »



LPN :

- Caractérisations structurales :
TEM et RX



INAC :

- Caractérisations synchrotron



IEMN :

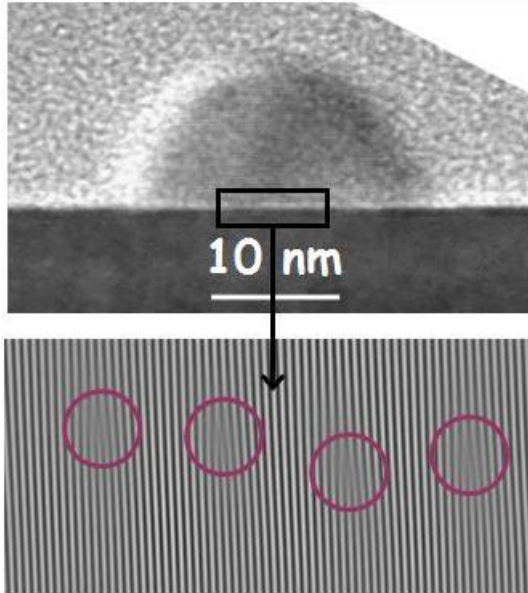
- Modèles ab-initio des interfaces : *DFT+MD*



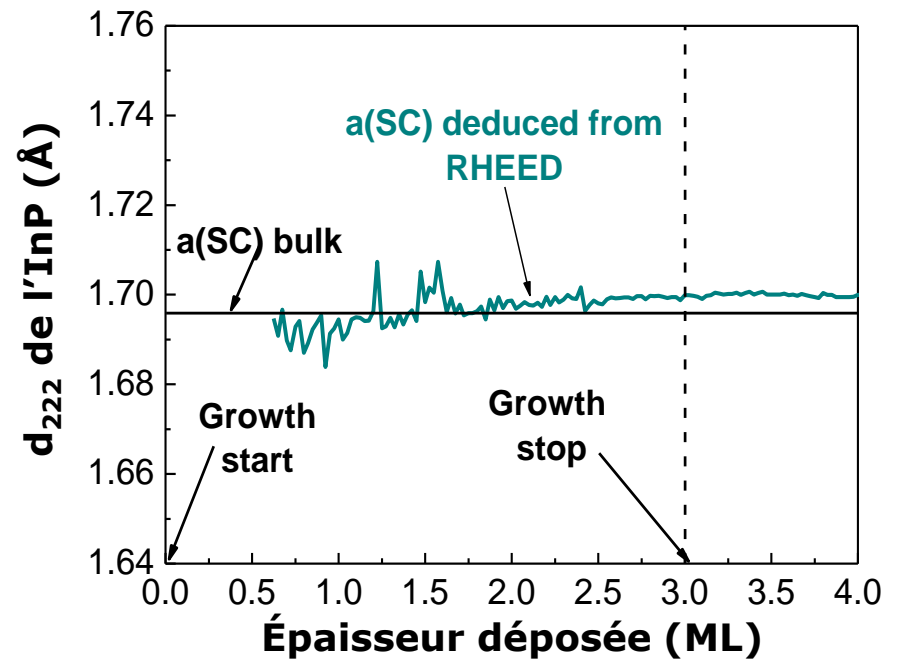
194.4 pm, dont 125 pm permanents

Les premiers stades de la croissance d'InP/STO

Relation d'épitaxie indirecte : $\langle 110 \rangle \text{InP}(001) // \langle 100 \rangle \text{STO}(001)$
 $\Delta a/a = 6.3\%$



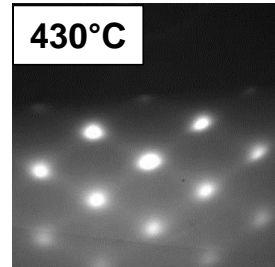
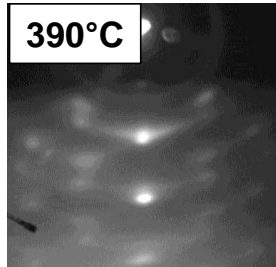
1 dislo tous les 16/17 STO $\langle 200 \rangle$



Croissance 3D sans CM (VW), InP non contraint
Dislocations géométriques d'interface

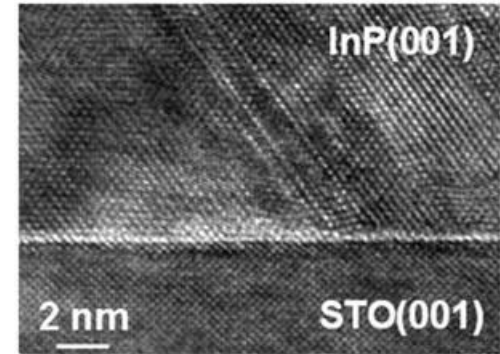
Difficultés associées à la faible adhésion

L'orientation de l'InP dépend des conditions de croissance

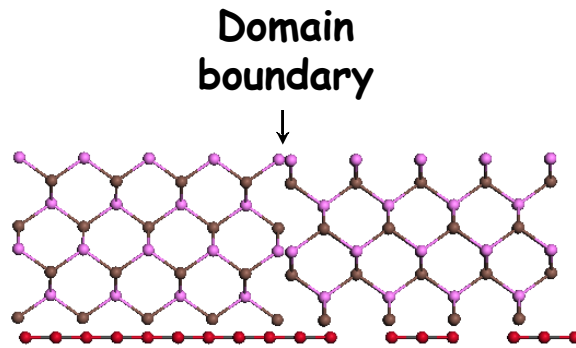


InP(111) / STO(001) InP(001) / STO(001)

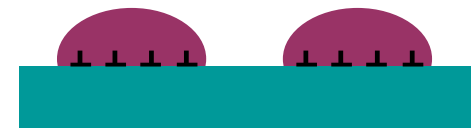
Fort démouillage de l'InP → macles



Domaines d'antiphase



Commensurabilité des réseaux de dislocations d'interface



→ Formations de défauts pendant la coalescence?

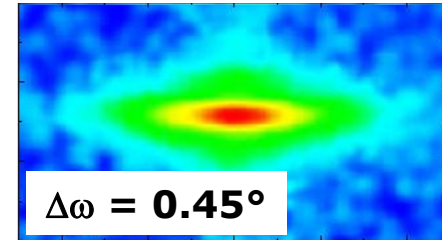
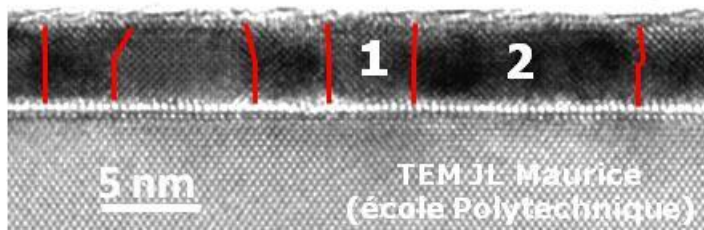
Il faut :

- contrôler l'orientation
- augmenter le mouillage pour réduire la densité de macles
- comprendre la formation des dislocations
- limiter l'impact des parois d'antiphase

Les templates de STO/Si

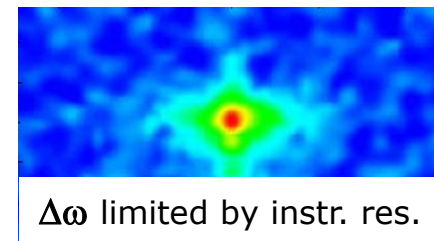
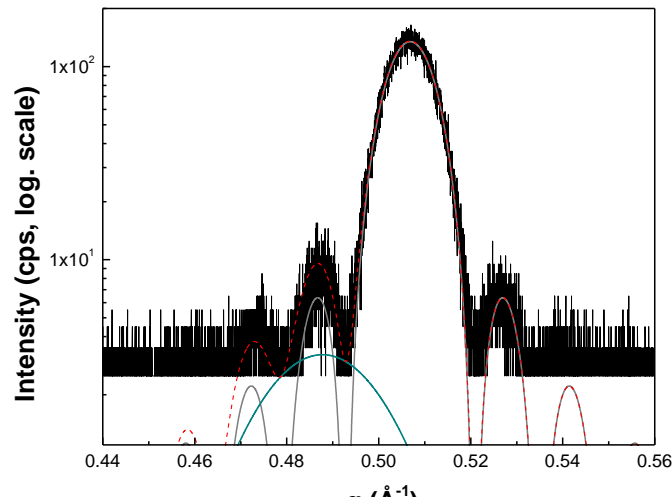
Leur qualité est critique pour éviter le transfert des défauts vers l'InP

En début de projet



- 1 : STO stoechiométrique ($a_{\text{bulk}} = 3.905 \text{ \AA}$)
- 2 : STO lacunaire ($a_{\text{bulk}} = 3.95 \text{ \AA}$)

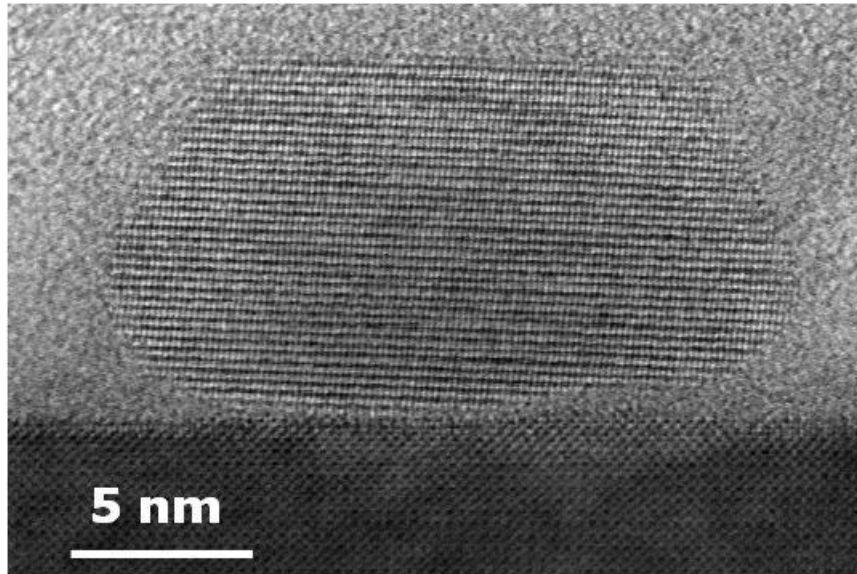
Après optimisation (quasi-suppression de la phase lacunaire)



Développement de templates $\text{LaAlO}_3/\text{STO}/\text{Si}$ et de $\text{BaTiO}_3/\text{STO}/\text{Si}$

Etude des premiers stades de la croissance de Ge sur SrTiO₃

Photoémission et diffraction de rayonnement synchrotron in situ
→ Ge/STO comme système modèle (InP non disponible)



Le Ge se comporte de manière similaire à l'InP sur STO :

- Ge prend son paramètre de maille aux tous premiers stades de la croissance
- Aucun défaut traversant détecté avant la coalescence
- Compétition entre Ge(111) et Ge(001)
- Fort démouillage (plus fort que pour l'InP)
- Ge/STO : $\Delta a/a = 2.43\%$

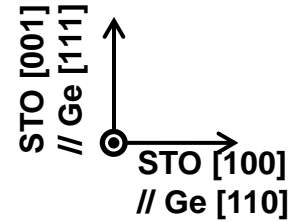
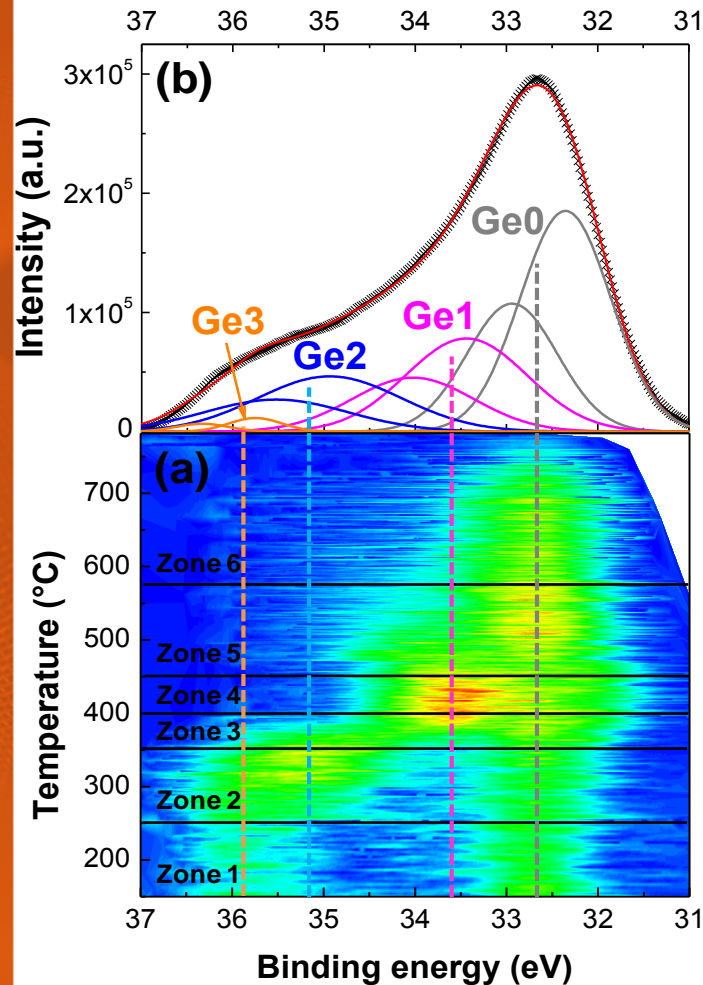
Photoémission (synchrotron SOLEIL, ligne TEMPO, M. El-Kazzi, F. Sirotti, M. Silly)

Mesure pendant la désorption de 0.5 MC de Ge/STO du niveau de cœur Ge3d (chimie de l'interface) et du RHEED (orientation des îlots)

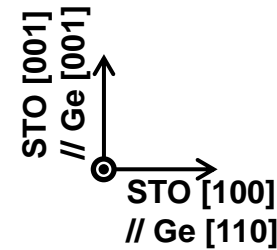
Diffraction en incidence rasante (synchrotron ESRF, ligne BM32)

Mesure pendant la croissance du Ge/STO de l'évolution du paramètre de maille du Ge et de la taille des îlots par diffraction en incidence rasante

Spectroscopie de photoémission



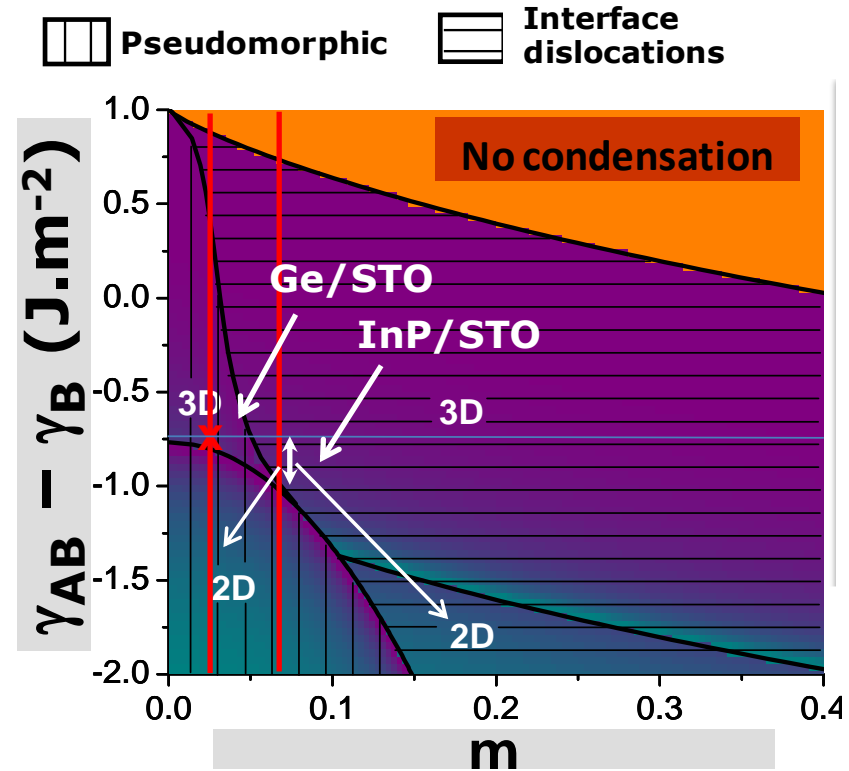
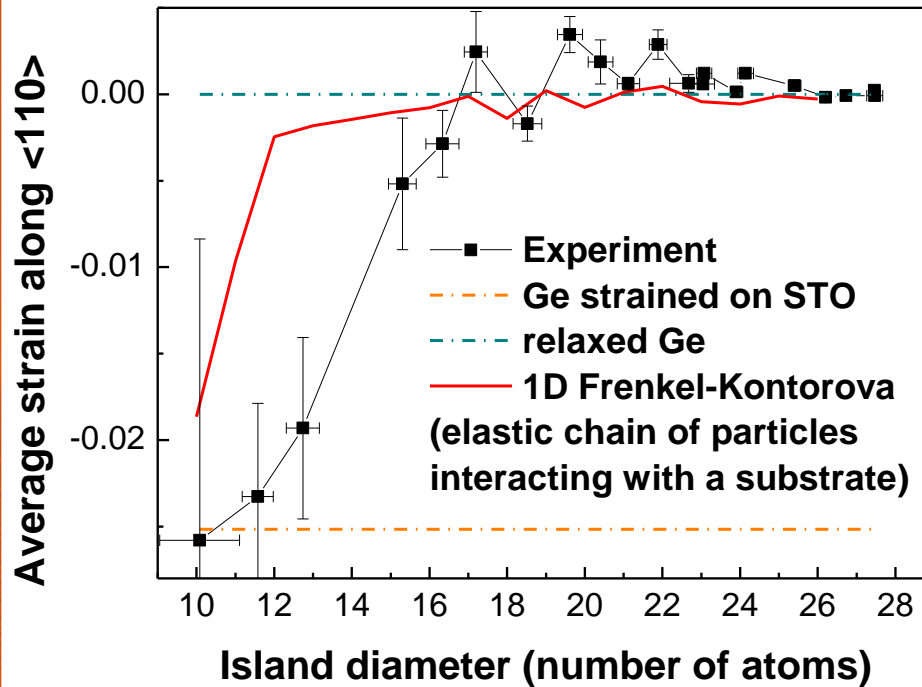
Ge1-(111) : 1 liaison Ge-O / atome d'interface
Îlots stabilisés par leur faible énergie de surface



Ge2-(001) : 2 liaisons Ge-O / atome d'interface
Îlots stabilisés par leur « forte » adhésion

Il faut augmenter l'adhésion pour stabiliser les îlots (001)

Diffraction de rayons X en incidence rasante



« Nouveau » mode de relaxation lié à la faible adhésion

- Ge initialement contraint (3D VW)
- La 1^{ère} dislocation entre très tôt ($d_{\text{crit}}=10$ atomes)
- Relaxation « oscillante » liée à la parité du nombre d'atomes à l'interface
- Energie d'adhésion : $\gamma_{AB} - \gamma_B \sim 0.7 \text{ J/m}^2$

L'InP est peut-être initialement relaxé?

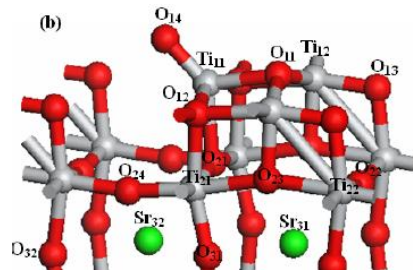
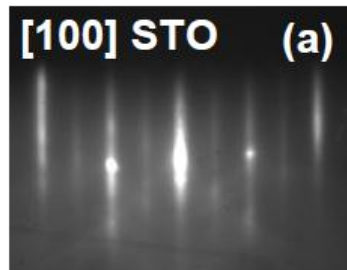
Vers le régime 2D relaxé :
augmenter m et l'adhésion

Vers le régime 2D contraint :
augmenter l'adhésion, réduire m

Germination d'InP/STO

1-Maximisation de la réactivité de la surface de STO

Surface terminée TiO_2 reconstruite (2x1)



→ Maximise l'adhésion donc le mouillage, favorise l'orientation (001)

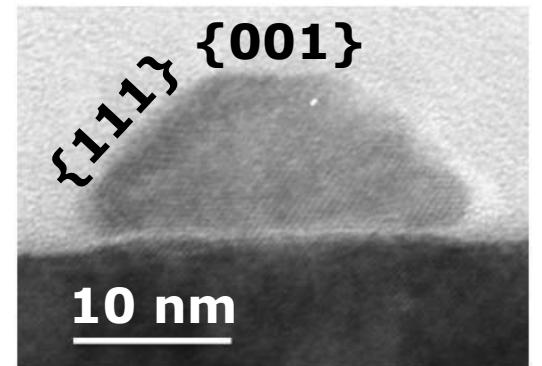
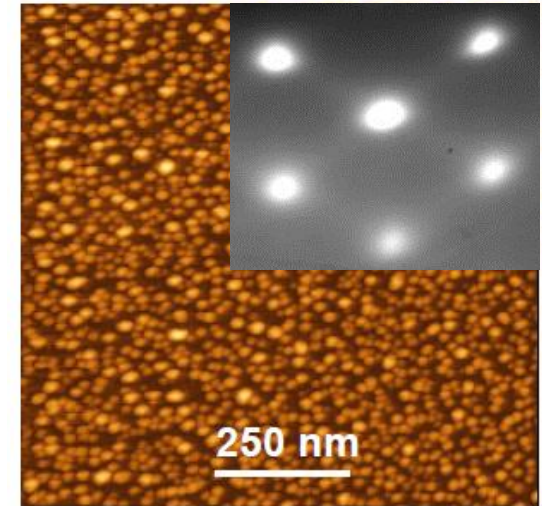
2-Minimisation du rapport V/III

Jusqu'en limite de désorption

→ Favorise In-O/InP donc favorise l'orientation (001) et le mouillage

3-Maximisation de la densité d'îlots

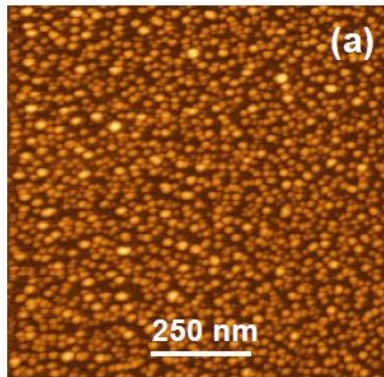
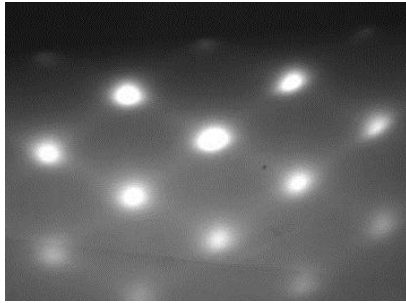
Limiter la formation de macles lors de l'étape de coalescence



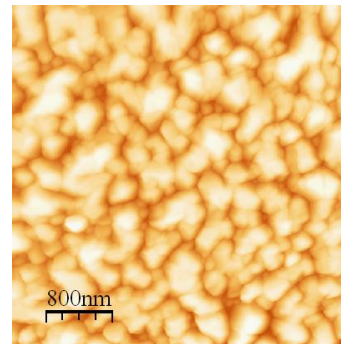
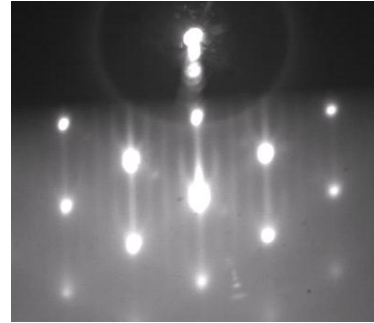
$2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ îlots parfaitement orientés (001)
 $h/d \sim 0.5$

Formation de couches 2D par coalescence

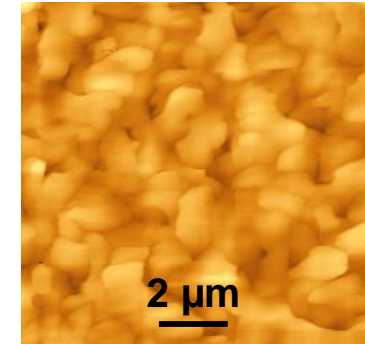
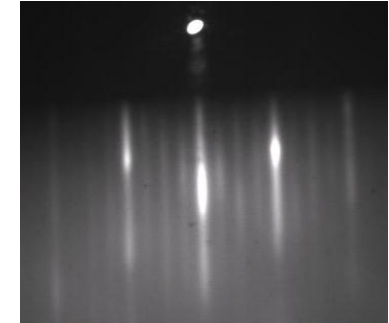
Etape 1
Îlots (001)



Etape 2
coalescence



Etape 3
croissance



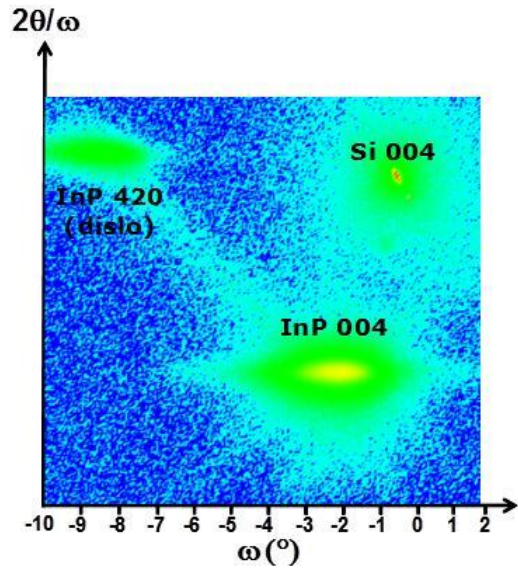
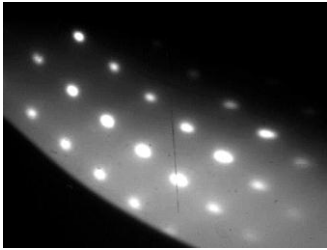
Température élevée (510°C)
P faible (10^{-6} Torr)
→ **diffusion de surface**

480°C – 10^{-5} Torr
→ **conditions InP standard**

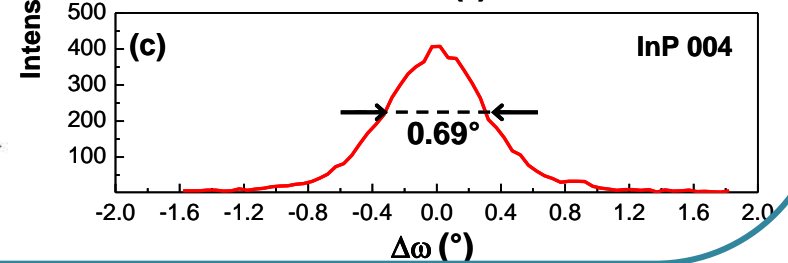
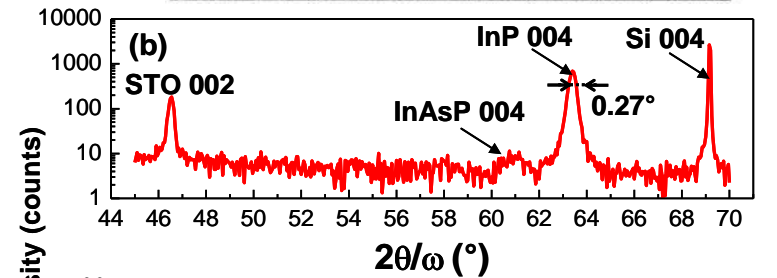
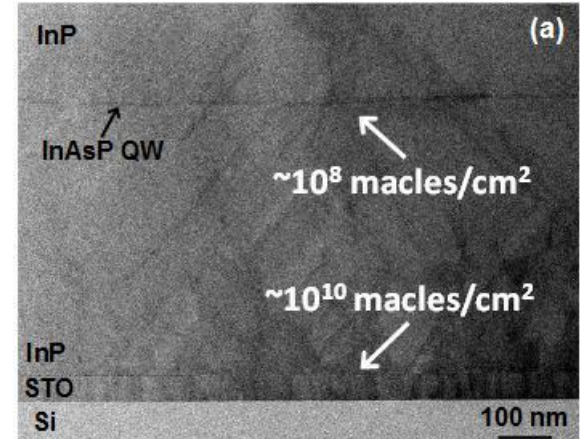
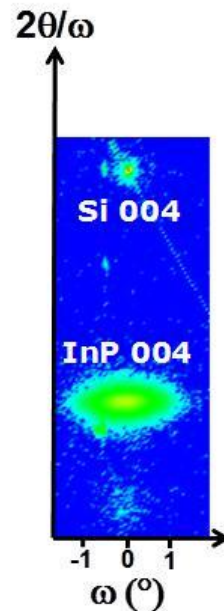
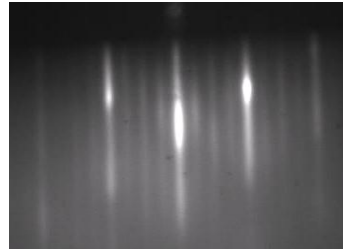
Conditions de croissance optimisées pour limiter la densité de macles tout en maximisant la taille des domaines de phase (~1μm)

Hétérostructure à puits quantique *InAsP/InP/STO/Si* ($e \sim 1 \mu\text{m}$)

Sur Si

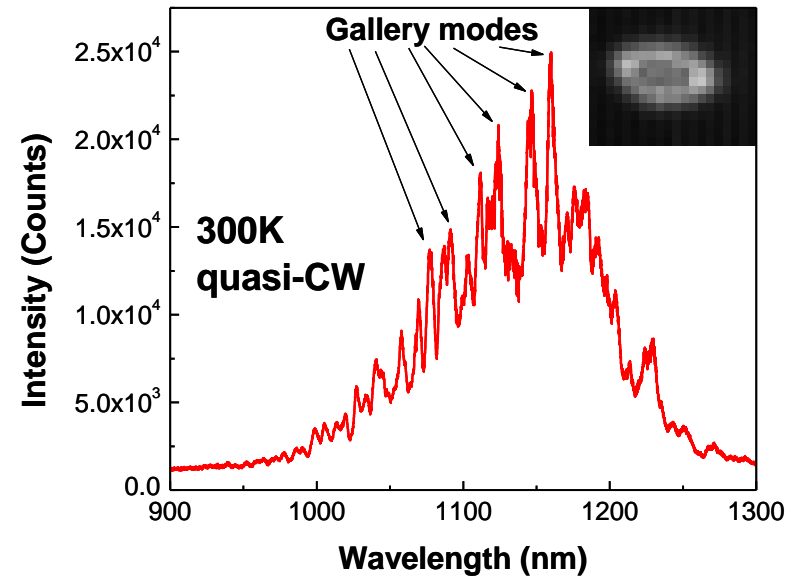
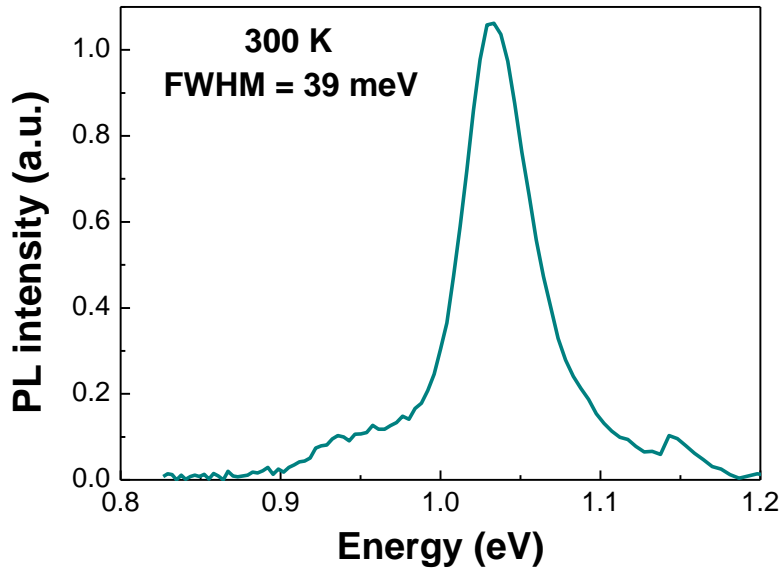


Sur STO/Si



10^8 macles/cm² à 500 nm de l'interface

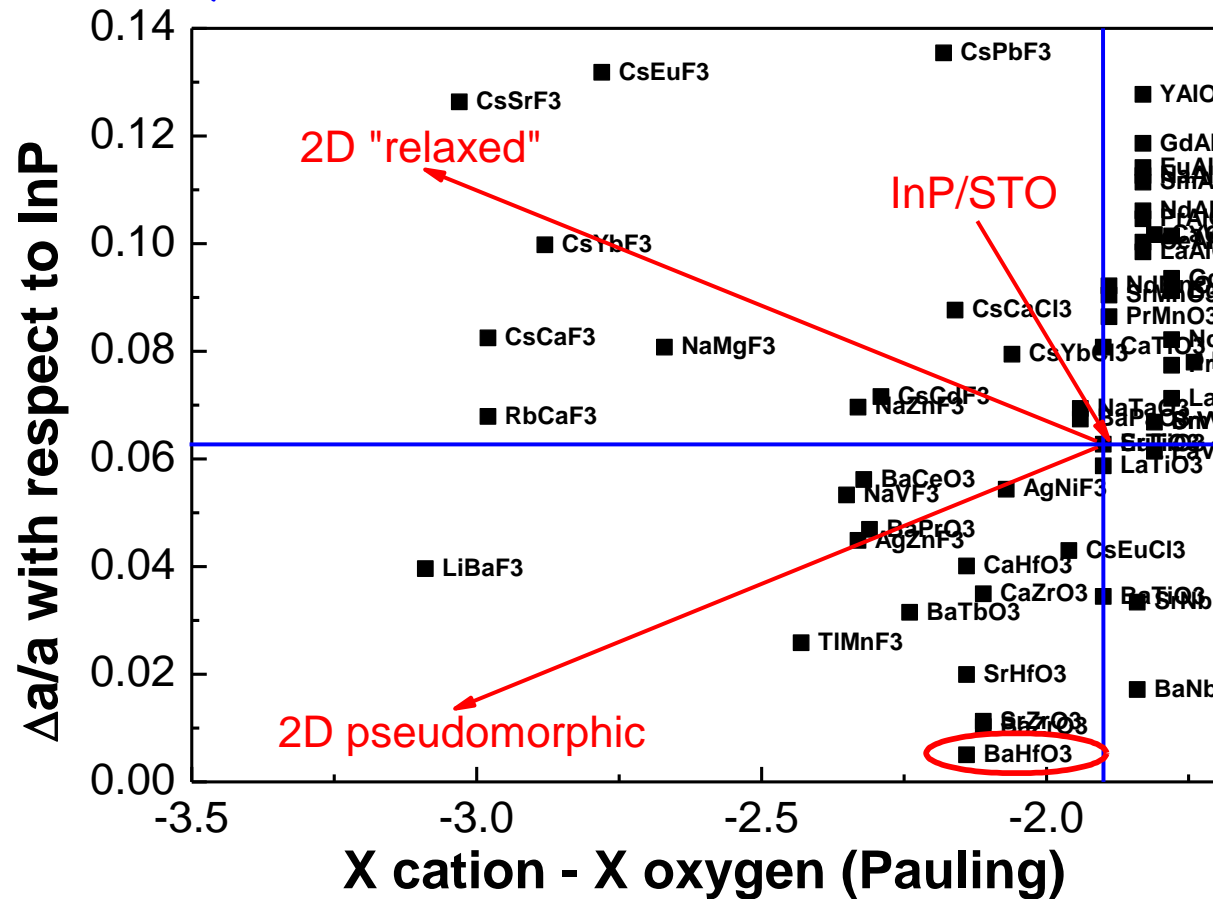
InAsP/InP/STO/Si : propriétés optiques



Rendement de PL environ 70 fois inférieur à celui d'un puits équivalent épitaxié sur InP

Choix d'un nouveau template d'oxyde

Towards larger adhesion



Croissance 2D faiblement contrainte :

- BaHfO₃/Si ($\Delta a/a = 0.5\%$ avec InP)
- Interfaces SrAl₂ pour augmenter l'adhésion (Demkov 2012)

Croissance 2D avec réseau de dislocations d'interface :

- Pérovskites fluorées (peut-on les épitaxier par MBE?)

Perspectives

Approfondissement des études fondamentales des premiers stades de la relaxation dans les systèmes faiblement liés

→ Projet Blanc Menox

Vers une croissance initialement 2D de III-V/oxyde

→ Interfaces type SrAl_2

→ Templates de BaHfO_3

Croissance de BaTiO_3 /GaAs maîtrisée

→ Mémoire optique (projet P2N OPTIMA)

Vers des hétérostructures fonctionnelles combinant III-V et oxydes sur Si

Impact du projet COMPHETI

11 articles dans des revues internationales à comité de lecture (dont 2 soumis)

Accommodation at the interface of highly dissimilar semiconductor/oxide epitaxial systems, G. Saint-Girons et al., Phys. Rev. B **80**, 155308, (2009).

Optically active defects in an InAsP/InP quantum well monolithically grown on SrTiO₃/Si(001), J. Cheng et al., Appl. Phys. Lett. **95**, 232116, (2009).

Partial arsenic pressure and crystal orientation during the molecular beam epitaxy of GaAs on SrTiO₃(001), J. Cheng et al., J. Appl. Phys. **107**, 094902, (2010)

Direct growth of InAsP/InP quantum well heterostructures on Si using crystalline SrTiO₃/Si templates, B. Gobaut, et al., Appl. Phys. Lett. **97**, 201908, (2010).

Evidence for the formation of two phases during the growth of SrTiO₃ on silicon, G. Niu et al., Phys. Rev. B **83**, 054105, (2011).

Direct epitaxial growth on InP based heterostructures on SrTiO₃/Si(001) crystalline templates, G. Saint-Girons et al., Microelec. Eng. **88**, 469, (2011).

Crystallographic orientation transition of InP islands on SrTiO₃ substrates with the growth temperature, A. Chettaoui et al., Surf. Sci. 605, **912**, (2011).

Heteroepitaxy of SrTiO₃ thin films on Si(001) using different growth strategies : toward substratelike quality, G. Niu, et al., (2011).

Ge/SrTiO₃(001) interface probed by soft x-ray synchrotron radiation time-resolved photoemission, M. El-Kazzi et al., Phys. Rev. B **85**, 075317, (2012)

Ge/SrTiO₃(001): correlation between interface chemistry and crystallographic orientation, B. Gobaut et al., soumis à PRB

New Interface Accommodation Mechanism for Weakly Interacting Epitaxial Systems, A. Danescu et al., soumis à PRL

7 conférences invitées, dont 6 internationales (MBE 2010, EuroMBE 2009, SISC 2012,...)

2 séminaires invités (LPN 2010, CRHEA 2012)

>10 communications (oraux/posters) dans des conférences internationales

Nombreuses communications dans des conférences nationales/sans actes