

**Selbstorganisierte Germanium/Silizium Inseln:  
Wachstumsexperimente und Modelle zur Interdiffusion**

**Vom Fachbereich Physik der Universität Hannover  
zur Erlangung des Grades  
Doktor der Naturwissenschaften  
(Dr. rer. nat.)  
genehmigte Dissertation**

**von  
DIPL.-PHYS. ULRICH DENKER  
geboren am 14.09.1973 in Osnabrück, Deutschland  
(2003)**

Referent: Prof. Dr. Rolf Haug  
Korreferent: Prof. Dr. Klaus von Klitzing  
Tag der Promotion: 22.07.2003



# Inhaltsverzeichnis

<b>Zusammenfassung</b>	<b>6</b>
<b>Summary</b>	<b>7</b>
<b>1 Einführung</b>	<b>9</b>
<b>2 Grundlagen und Methoden</b>	<b>11</b>
2.1 Selbstorganisiertes Wachstum niedrigdimensionaler Strukturen . . . . .	11
2.1.1 Inselbildung . . . . .	12
2.1.2 Wachstumsmodi dünner Schichten . . . . .	13
2.1.3 Modellierung des Inselwachstums . . . . .	14
2.2 Eigenschaften niedrigdimensionaler Strukturen . . . . .	16
2.2.1 Verspannung . . . . .	16
2.2.2 Interdiffusion . . . . .	20
2.2.3 Elektronische Eigenschaften . . . . .	21
2.3 Das Materialsystem Germanium/Silizium . . . . .	22
2.3.1 Strukturelle Eigenschaften . . . . .	22
2.3.2 Elektronische Eigenschaften . . . . .	24
2.3.3 Optische Eigenschaften von Ge/Si Volumenkristallen . . . . .	27
2.3.4 Inselwachstum . . . . .	30
2.3.5 Überwachsen von Inseln . . . . .	32
2.3.6 Optische Eigenschaften von niedrigdimensionalen Strukturen	32
2.4 Probenherstellung mittels Molekularstrahlepitaxie . . . . .	35
2.4.1 Waferpräparation . . . . .	35
2.4.2 Aufbau der MBE-Anlage . . . . .	36
2.4.3 MBE-Wachstum . . . . .	37
2.4.4 Ausheilschritt im RTA-Ofen . . . . .	37
2.5 Analysemethoden . . . . .	38
2.5.1 RHEED . . . . .	38
2.5.2 Transmissionselektronenmikroskopie . . . . .	39
2.5.3 Rasterkraft- und Rastertunnelmikroskopie . . . . .	40
2.5.4 Nasschemisches Ätzen . . . . .	40
2.5.5 Photolumineszenz . . . . .	42

2.5.6	Weitere experimentelle Methoden: Transport, Röntgenmessungen und Ramanspektroskopie . . . . .	43
<b>3</b>	<b>Interdiffusion bei hohen Wachstumstemperaturen: Dome Inseln</b>	<b>45</b>
3.1	Experimente zum Inselwachstum bei einer Substrattemperatur von 850°C . . . . .	45
3.1.1	Rasterkraftmikroskopie: Abschätzung des Vermischungszustands . . . . .	46
3.1.2	Photolumineszenz . . . . .	47
3.1.3	Grabenbildung um Inseln, die bei 850°C gewachsen wurden . . . . .	49
3.1.4	Modell zur Grabenbildung kurzreichweitiger Gräben um einzelne Inseln . . . . .	52
3.1.5	Täler zwischen benachbarten Inseln . . . . .	55
3.2	Wachstumstemperaturen von 660°C-800°C . . . . .	60
3.2.1	Grabenbildung um versetzungsfreie Inseln . . . . .	60
3.2.2	Gräben bei Inseln mit Versetzungen . . . . .	63
3.3	Zusammenfassung dieses Kapitels . . . . .	65
<b>4</b>	<b>Interdiffusion bei mittleren Temperaturen: Koexistenz von Domes und Pyramiden</b>	<b>67</b>
4.1	Der Übergang von der Koexistenz von Domes und Pyramiden zu Hut Cluster Inseln . . . . .	67
4.1.1	Vermischungszustand freistehender Inseln . . . . .	68
4.1.2	Temperversuche . . . . .	71
4.2	Lateral inhomogene Zusammensetzung in Pyramiden . . . . .	72
4.2.1	Experimentelle Ergebnisse . . . . .	72
4.2.2	Verspannungsfeld einer freistehenden Pyramide . . . . .	74
4.2.3	Wachstumsmodell zur Erklärung der beobachteten Vermischung . . . . .	79
4.3	Zusammenfassung dieses Kapitels . . . . .	83
<b>5</b>	<b>Wachstum bei niedrigen Temperaturen: Hut Cluster Inseln</b>	<b>85</b>
5.1	Charakterisierung einer einzelnen Insellage . . . . .	85
5.1.1	Rasterkraftmikroskopie und Photolumineszenz . . . . .	85
5.1.2	Inseldichte als Funktion des deponierten Germaniums . . . . .	86
5.1.3	Chemische Zusammensetzung vor und nach Temperversuchen . . . . .	88
5.2	Vergleich zwischen Einzellage und zweifach gestapelten Inseln . . . . .	90
5.2.1	Bestimmung der minimalen Deckschichtdicke zur Planarisierung der Probenoberfläche . . . . .	90
5.2.2	Zweifach gestapelte Inseln: Rasterkraftmikroskopie . . . . .	91
5.2.3	Einfluss der Segregation auf die Reduktion der kritischen Schichtdicke . . . . .	92
5.2.4	Vergleich der Interdiffusion in einer Einzellage und einer Zweifachschicht . . . . .	94

5.2.5	Photolumineszenz . . . . .	97
5.3	Mehrfach gestapelte Hut Cluster Inseln . . . . .	99
5.3.1	Strukturelle Messungen und Photolumineszenz . . . . .	99
5.3.2	Temperversuche: Photolumineszenz . . . . .	102
5.3.3	Interdiffusion in Mehrfach-Stapeln . . . . .	104
5.3.4	Fünffach-Stapel mit verschiedenen Zwischenschichtdicken . . . . .	104
5.3.5	Modellierung der verspannungsinduzierten Reduktion der kritischen Schichtdicke . . . . .	108
5.4	Zusammenfassung dieses Kapitels . . . . .	111
<b>6</b>	<b>Reduzierte Interdiffusion in selbstorganisierten Inseln durch Überwachen bei verminderter Substrattemperatur</b>	<b>113</b>
6.1	Strukturelle Messungen an Hut Cluster Inseln . . . . .	113
6.2	Photolumineszenz von Hut Cluster Inseln . . . . .	114
6.2.1	Einfluss der Substrattemperatur während des Überwachens . . . . .	115
6.2.2	Laseranregungsabhängige PL . . . . .	116
6.2.3	PL-Messungen im Temperaturbereich 1,4K-185K . . . . .	119
6.2.4	PL-Messungen an getemperten Proben . . . . .	120
6.3	Vergleich mit theoretischen Voraussagen für SiGe Inseln . . . . .	122
6.4	Photolumineszenzmaxima von Inseln, die bei höheren Temperaturen gewachsen wurden . . . . .	126
6.5	Zusammenfassung dieses Kapitels . . . . .	127
<b>7</b>	<b>Schlussbemerkungen und Ausblick</b>	<b>129</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>144</b>
<b>A</b>	<b>Abkürzungsverzeichnis</b>	<b>145</b>
A.1	Allgemeine Abkürzungen . . . . .	145
A.2	In Formeln verwendete Symbole und Abkürzungen . . . . .	146
<b>B</b>	<b>Liste der Veröffentlichungen</b>	<b>147</b>
<b>C</b>	<b>Verschiedenes</b>	<b>151</b>
C.1	Danksagungen . . . . .	152
C.2	Lebenslauf . . . . .	153
C.3	Selbständigkeitserklärung . . . . .	154

# Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird die Interdiffusion in selbstorganisierten Inseln im Materialsystem Germanium/Silizium untersucht. Die elementaren Wachstums- und Interdiffusionsprozesse werden anhand von Inseln studiert, die durch Abscheidung von reinem Germanium auf Si(001) bei verschiedenen Wachstumstemperaturen gewachsen wurden. Der im Rahmen dieser Arbeit untersuchte Temperaturbereich von 250°C-850°C deckt alle Wachstumstemperaturen ab, die üblicherweise zur Herstellung von Ge Inseln verwendet werden.

Es wird gezeigt, dass bei hohen Wachstumstemperaturen von 850°C die entstehenden Inseln nur noch einen Ge Gehalt von 25% haben. Das eindiffundierende Si gelangt über Oberflächendiffusion aus dem umliegenden Substrat in die Inseln und führt zur einer signifikanten Absenkung des Substratniveaus gegenüber der Si/SiGe Grenzfläche unter der Insel. Weiterhin führt die Eindiffusion von Si zur Bildung von kurz- und langreichweitigen Gräben um die Inseln.

Bei einer Wachstumstemperatur um 560°C zeigt sich, dass die bei dieser Temperatur entstehenden pyramidenförmige Inseln in den Pyramidenecken am stärksten vermischt sind. Die Annahme, dass das eindiffundierende Si aus der unmittelbaren Umgebung der Pyramide kommt, führt rein geometrisch zu einer Si Anreicherung in den Ecken. Eine einfache Wachstumssimulation basierend auf diesem Modell kann das beobachtete Vermischungsprofil reproduzieren.

In freistehenden Inseln, die bei einer Temperatur von 500°C gewachsen wurden, konnte eine messbare Interdiffusion mit Si erst nach langem Tempern beobachtet werden. Wenn sich unter einer freistehenden Insel eine mit einer dünnen Si Deckschicht vergrabene Insel befindet, ist die Interdiffusion stark erhöht. In gestapelten Inseln wird eine reduzierte kritische Schichtdicke für die Inselbildung beobachtet, die sich mit der durch die vergrabenen Inseln generierten Verspannung korrelieren lässt.

Die Lumineszenz von bei 500°C gewachsenen Inseln, die bei reduzierter Substrattemperatur mit Si überwachsen wurden, verschiebt sich mit sinkender Deckschichttemperatur zu niedrigeren Energien. Bei einer Deckschichttemperatur von weniger als 360°C und niedriger Laseranregungsleistung liegt das Maximum der Inselphotolumineszenz oberhalb einer Wellenlänge von 2  $\mu\text{m}$ . Aus der Temperaturabhängigkeit der Photolumineszenzintensität konnte geschlossen werden, dass die Lumineszenz bei hohen Temperaturen durch die Evaporation von Elektronen limitiert ist.

Schlagworte: Selbstorganisierte Inseln, Silizium, Germanium

# Summary

This work investigates the material interdiffusion of self-assembled islands in the silicon germanium material system. The elementary growth and interdiffusion processes are studied on the basis of islands grown by deposition of pure Ge on Si(001) at different growth temperatures. The studied growth temperature range from 250°C to 850°C includes all temperatures commonly employed for the fabrication of self-assembled islands.

It is shown that the islands grown at a high growth temperature of 850°C contain only 25% Ge. The Si is transported into the islands via surface-diffusion from the surrounding substrate which leads to a significant lowering of the substrate surface with respect to the Si/SiGe interface below the island. Furthermore the in-diffusion of Si produces short- and long-range trenches around and between the islands.

For pyramid-shaped islands grown at 560°C the highest intermixing is found in the pyramid corners. Assuming that the in-diffusing Si comes from the immediate surrounding of the pyramid, the Si enrichment in the pyramid corners is explained by a geometrical effect. A simple growth model based on this assumption reproduces the observed composition profile.

In free-standing islands grown at a temperature of 500°C, significant interdiffusion can only be detected after prolonged annealing. If a buried island capped by a thin Si spacer layer is present below the free-standing island, the interdiffusion is strongly enhanced. A reduced critical thickness for island formation is observed in stacked layers and correlated with the strain field generated by the buried islands.

The luminescence of islands grown at 500°C is shifted to lower energies if the substrate temperature during growth of the Si capping layer is reduced. At capping temperatures below 360°C and low laser excitation power, the island related luminescence maximum is centered beyond 2  $\mu\text{m}$ . From temperature dependent measurements it is deduced that the high temperature photoluminescence intensity is limited by the thermal evaporation of electrons.

Key words: self-assembled islands, silicon, germanium



# Kapitel 1

## Einführung

Die Mikroelektronik hat die Entwicklung des ausgehenden 20. Jahrhunderts geprägt und wird auch im 21. Jahrhundert eine Schlüsseltechnologie bleiben. Da die Miniaturisierung integrierter Schaltungen ungebremst fortschreitet, werden in diesen Schaltungen seit längerem Abmessungen im Nanometerbereich erreicht. Die Bezeichnung Nanoelektronik wird für dieses Feld daher zunehmend angemessener. Der allergrößte Teil der weltweit produzierten hochintegrierten Bauteile benutzt Silizium als Ausgangsmaterial. Seit vier Jahrzehnten verdoppelt sich die Integrationsdichte Si-basierter Schaltkreise alle 18 Monate. Das Ende dieses exponentiellen Wachstums ist unvermeidlich und wurde in der Vergangenheit schon mehrfach fälschlich für die nahe Zukunft vorausgesagt. Aus heutiger Sicht werden die Grenzen Si-basierter Elektronik auch in den nächsten Jahren nicht erreicht [1]. Doch in immer stärkerem Maße sind Hindernisse für die fortschreitende Integration durch fundamentale Eigenschaften der eingesetzten Materialien gegeben. Es gibt daher große Forschungsanstrengungen, Si-basierte Bauteile durch Kombination mit neuen Materialien zu verbessern. Ein seit längerem beschrittener Weg ist der Einbau von SiGe Schichten in Si Bauelemente.

SiGe Schichten mit geringen Ge Anteilen im Bereich von 20% haben dem SiGe-Heterobipolartransistor zum Durchbruch verholfen. Dieser hat sich in den letzten Jahren bei Hochfrequenzanwendungen gegen andere Technologien, die nicht auf Si basierten, erfolgreich durchgesetzt.

Ge-reiche SiGe Schichten werden bisher nicht kommerziell in Si-basierten Bauteilen eingesetzt. Denn bei der Abscheidung von Ge-reichen SiGe Schichten oder gar reinem Ge auf Si bilden sich durch einen Selbstorganisationsprozess kleine Inseln auf dem Substrat [2, 3]. Anfangs wurde diesen Inseln wenig Beachtung geschenkt. Dies änderte sich mit dem zunehmenden Interesse an Quantenpunkten. Quantenpunkte sind künstlich hergestellte Objekte, die in allen drei Raumdimensionen so klein sind, dass Quanteneffekte eine Rolle spielen. Selbstorganisierte Inseln sind ein einfacher Weg, solche Quantenpunkte herzustellen und für Si-basierte Quantenpunkte wurden bereits verschiedene Konzepte für neue Bauteile vorgeschlagen [4, 5, 6]. Zur gezielten Herstellung von selbstorganisierten Inseln ist es aber nötig, den Prozess des Inselwachstums detailliert zu verstehen. Insbesondere die Interdiffusion in diesen Inseln spielt eine

wesentliche Rolle. Denn die strukturellen und elektronischen Eigenschaften der aus einem Selbstorganisationsprozess resultierenden Inseln hängen entscheidend von der chemischen Komposition der Inseln ab. Die Materialverteilung in den Inseln wiederum wird von den Vorgängen während des Wachstums bestimmt.

In dieser Arbeit wird die Interdiffusion in selbstorganisierten Inseln im Materialsystem SiGe untersucht. Die elementaren Wachstums- und Interdiffusionsprozesse werden anhand von Inseln studiert, die durch Abscheidung von reinem Ge auf Si(001) bei verschiedenen Wachstumstemperaturen gewachsen wurden. Der im Rahmen dieser Arbeit untersuchte Temperaturbereich von 250°C-850°C deckt alle Wachstumstemperaturen ab, die üblicherweise zur Herstellung von Ge Inseln verwendet werden. Analysiert werden sowohl die strukturellen Eigenschaften der Inseln, als auch ihre elektronischen Eigenschaften. Die Darstellung der Ergebnisse ist nach Wachstumstemperaturen geordnet, die Präsentation beginnt bei den hohen und endet bei den niedrigen Temperaturen. Diese Einteilung ergibt sich aus der Beobachtung, dass die Inseln in gewissen Temperaturbereichen ähnliche Wachstumseigenschaften aufweisen.

In Kapitel 2 werden zunächst einige Grundlagen zur Bildung und zu den Eigenschaften von selbstorganisierten Inseln im Materialsystem SiGe zusammengestellt. Außerdem werden die experimentellen Methoden vorgestellt, die in dieser Arbeit verwendet wurden. In Kapitel 3 wird das Wachstum von Dome Inseln untersucht, die in einem Temperaturbereich von 660°C bis 850°C gewachsen wurden. Das folgende Kapitel beschäftigt sich mit dem Wachstum im Temperaturbereich von 500°C bis 620°C. In den hier vorgestellten Experimenten tauchen neben den Dome Inseln auch Pyramiden auf. Diese Pyramiden wachsen gleichzeitig mit Dome Inseln und ihre Eigenschaften sind Hauptthema des Kapitels 4. Bei Wachstumstemperaturen von weniger als 550°C wachsen ausschließlich Hut Cluster Inseln, deren Analyse die Kapitel 5 und 6 gewidmet sind. Kapitel 5 untersucht Hut Cluster Inseln in einzelnen und vertikal gestapelten Schichten, die bei 500°C gewachsen wurden. Kapitel 6 stellt Experimente vor, bei denen die Hut Cluster bei Temperaturen von 250°C bis 500°C überwachsen wurden.

# Kapitel 2

## Grundlagen und Methoden

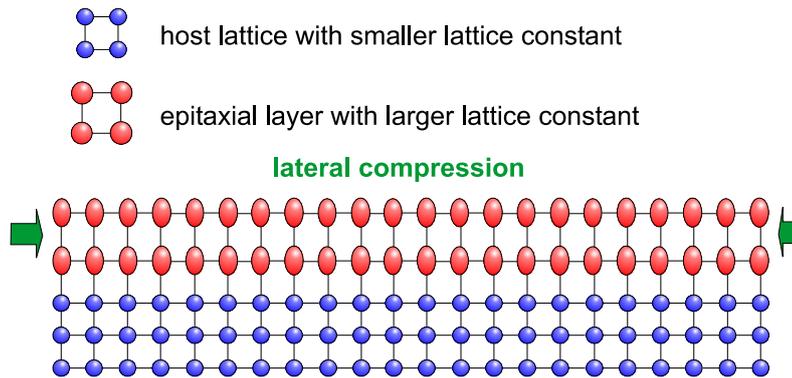
In diesem Kapitel werden die grundlegenden Modelle zur Beschreibung selbstorganisierter Inseln im Materialsystem Germanium/Silizium vorgestellt. Außerdem werden die experimentellen Methoden erläutert, mit denen die in dieser Arbeit untersuchten Proben hergestellt und analysiert wurden.

Abschnitt 2.1 widmet sich den Grundlagen selbstorganisierten Wachstums von niedrigdimensionalen Strukturen, Abschnitt 2.2 geht auf die Modellierung der Eigenschaften dieser Strukturen ein. Die in diesen ersten beiden Abschnitten vorgestellten Modelle können auf verschiedene Materialsysteme angewendet werden. Der Abschnitt 2.3 stellt die notwendigen materialabhängigen Parameter zur Anwendung für das Materialsystem Ge/Si zusammen. Außerdem werden die speziellen Eigenschaften und Phänomene, die beim selbstorganisierten Wachstum im SiGe System von Bedeutung sind, dargestellt.

In Abschnitt 2.4 wird der Herstellungsprozess der Proben mittels Molekularstrahlepitaxie vorgestellt. Abschnitt 2.5 erläutert die experimentellen Methoden, die in dieser Arbeit verwendet wurden, um die gewachsenen Proben strukturell und elektronisch zu charakterisieren .

### 2.1 Selbstorganisiertes Wachstum niedrigdimensionaler Strukturen

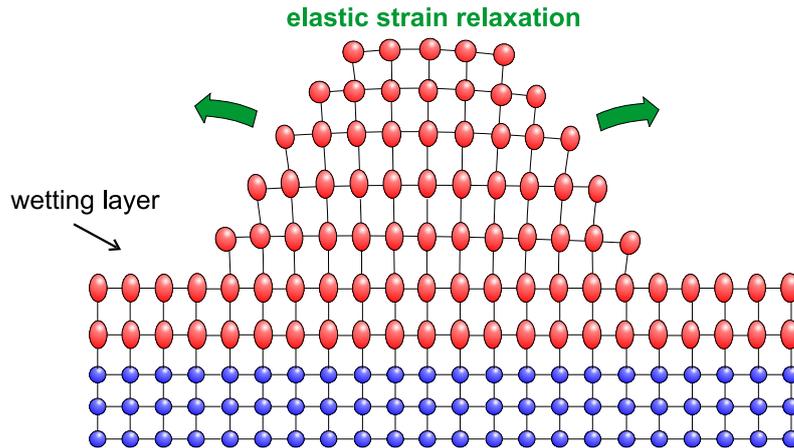
Dieser Abschnitt beschreibt die Wachstumskinetik dünner Schichten, die die physikalische Grundlage für die Realisierung selbstorganisierter Strukturen sind. Diese durch Selbstorganisation entstehenden Inseln haben so kleine Abmessungen, dass in einer oder mehreren Dimensionen quantenmechanische Lokalisierungseffekte beobachtet werden können. In diesen Strukturen ist die Annahme von Periodizität, die in der Festkörperphysik normalerweise vorausgesetzt wird, nicht mehr in allen drei Dimensionen gültig. Die Inseln können daher als niedrigdimensionale Strukturen bezeichnet werden.



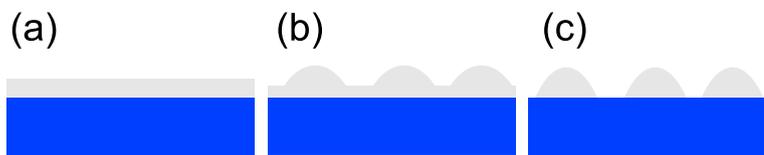
**Abbildung 2.1:** Epitaktisches Wachstum zweier Materialien mit unterschiedlicher Gitterkonstante führt zu Verspannungen. Beim pseudomorphen Wachstum wird die Epitaxieschicht lateral komprimiert.

### 2.1.1 Inselbildung

Epitaxie (griech. epitaxis, “Anordnung”) bezeichnet das Aufwachsen dünner Schichten eines Festkörpers auf einem kristallinen Substrat. Mit diesem Verfahren können Einkristalle aus verschiedenen Materialien hergestellt werden, denn beim epitaktischen Wachstum wird das Kristallgitter des Substratmaterials in der aufwachsenden Schicht fortgesetzt. Eine glatte Epitaxieschicht, die parallel zur Substratoberfläche die Gitterkonstante des Substrats annimmt, nennt man pseudomorph. Wenn das aufwachsende Material eine größere Gitterkonstante als das Substratmaterial hat, wächst eine pseudomorphe Schicht lateral komprimiert. Es kommt deshalb zu Verspannungen. Das Gitter der Epitaxieschicht wird so deformiert, dass die Gitterkonstante in lateraler Richtung der des Substrats entspricht. In vertikaler Richtung dehnt sich die Epitaxieschicht aus, das heißt, die Gitterkonstante ist in dieser Richtung größer als im entsprechenden Volumenmaterial der Epitaxieschicht. Diese Deformation der Epitaxieschicht ist in Abb. 2.1 illustriert. Die Verspannung in der Epitaxieschicht nimmt mit steigender Dicke der Schicht zu. Die Verspannungenergie in einer pseudomorphen Schicht ist  $E_{el} \propto \varepsilon^2 d$ , wobei  $\varepsilon$  die Gitterfehlanspassung und  $d$  die Dicke der Schicht angibt. Wenn die Verspannung hinreichend groß ist, relaxiert sie durch Bildung von Versetzungen oder durch Bildung von Inseln. Im Volumen und in dicken Schichten wird die Verspannung eher über Versetzungen relaxieren, während in dünnen Schichten eher die Rauigkeit der Schicht zunimmt und es zur Inselbildung kommt. In dreidimensionalen Inseln kann die Verspannung elastisch relaxieren, wie Abb. 2.2 zeigt. Die Atome einer Insel können sich in lateraler Richtung bewegen und so die Verspannung verringern ohne Versetzungen zu generieren. Durch die von Schicht zu Schicht zunehmende laterale Verschiebung der atomaren Positionen gegenüber dem Substrat können die Atome in den oberen Lagen die Gitterkonstante des Volumenmaterials der Epitaxieschicht erreichen.



**Abbildung 2.2:** Wenn es zur Bildung von Inseln kommt, kann das Atomgitter in den oberen Schichten der Inseln lateral expandieren. Die Atome können so ihre Verspannung elastisch relaxieren.



**Abbildung 2.3:** Je nach Oberflächenenergie und Verspannungsenergien der Schichten wachsen gitterfehlangepasste Materialien in einem der folgenden drei Wachstumsmodi auf: (a) FRANK-VAN DER MERWE, (b) STRANSKI-KRATANOV und (c) VOLLMER-WEBER.

## 2.1.2 Wachstumsmodi dünner Schichten

Beim Wachstum von Kristallen lassen sich, wie in [Abbildung 2.3](#) gezeigt, drei verschiedene Wachstumsmodi unterscheiden: (a) FRANK-VAN DER MERWE-, (b) STRANSKI-KRATANOV- und (c) VOLLMER-WEBER-Wachstum. Beim pseudomorphen oder FRANK-VAN DER MERWE-Wachstum [7] wächst das Material Monolage für Monolage planar auf. In Kristallsystemen ohne Verspannungen können damit prinzipiell epitaktische Schichten beliebiger Dicke aufgewachsen werden. Bei der Homoepitaxie wird typischerweise FRANK-VAN DER MERWE-Wachstum beobachtet. Ein Beispiel ist das homoepitaktische Wachstum von Si auf Si(001) Substraten. Beim STRANSKI-KRATANOV-Wachstum [8] wächst zunächst eine glatte Benetzungsschicht (engl. wetting layer), ab einer kritischen Schichtdicke  $d_c$  bildet das Material dann Inseln. Weil beim Wachstum von Ge auf Si STRANSKI-KRATANOV-Wachstum auftritt, ist dieser Fall in der [Abbildung 2.2](#) illustriert. Beim VOLLMER-WEBER-Wachstum [9] wachsen direkt auf dem Substrat Inseln aus dem aufzuwachsenden Material, ohne dass es zur

Bildung einer Benetzungsschicht kommt. Ein Beispiel für VOLLMER-WEBER Wachstum ist das Wachstum von Ge Inseln auf einer Si Oberfläche, die durch Deposition einer Sub-Monolage Kohlenstoff modifiziert ist [10, 11].

Diese Wachstumsmodi lassen sich mit folgendem Grenzflächenmodell [12] verstehen, das im thermodynamischen Gleichgewicht gültig ist. Betrachtet werden dabei die Energien von drei Grenzflächen: Die Oberflächenenergie des Substrates gegen das Vakuum  $\gamma_S$ , die Oberflächenenergie des aufzuwachsenden Films gegen das Vakuum  $\gamma_F$  und die Grenzflächenenergie  $\gamma_{SF}$  zwischen Film und Substrat. Im Allgemeinen hängen die Energien des Films und der Grenzfläche von der Anzahl  $n$  der abgeschiedenen Monolagen ab. Die beiden Terme  $\gamma_{F,n}$  und  $\gamma_{SF,n}$  enthalten auch die bei der Heteroepitaxie wichtige Verspannungsenergie. Nach Wachstum eines Films mit  $n$  Monolagen ist die Änderung der Energie des Systems gegeben durch

$$\Delta\gamma_n = \gamma_{F,n} + \gamma_{SF,n} - \gamma_S. \quad (2.1)$$

Gilt  $\Delta\gamma_n \leq 0$  für alle  $n$ , dann ist die vollständige Benetzung der Substratoberfläche mit dem Filmmaterial energetisch am günstigsten, es liegt das FRANK-VAN DER MERWE Wachstum vor. Ist  $\Delta\gamma_n > 0$  für alle  $n$ , so ist die Benetzung ungünstig und das Material bildet im Vollmer-Weber-Wachstumsmodus Inseln auf der Substratoberfläche. Das STRANSKI-KRASTANOV-Wachstum tritt auf, wenn  $\Delta\gamma_n$  einen Vorzeichenwechsel hat. Hier ist  $\Delta\gamma_n$  bis zu einer gewissen Anzahl Monolagen negativ, das Material wächst verspannt mit der Gitterkonstante des Substrates auf. Ab einer kritischen Schichtdicke  $d_c$  wird  $\Delta\gamma_n$  positiv und es ist energetisch günstiger, Inseln zu bilden.

### 2.1.3 Modellierung des Inselwachstums

Für die Nukleation einer Insel ist es entscheidend, wie das Verhältnis der Oberflächenenergie zur Verspannungsenergie ist. Eine Insel wird dann nukleieren, wenn die Verspannungsenergie, die durch die Inselbildung relaxiert wird, größer ist als die zusätzliche Oberflächenenergie der neu entstehenden Inseloberfläche.

Ein einfaches Modell für die Energiedifferenz zwischen einer pseudomorphen Schicht und einer pyramidenförmigen, facettierten Insel wurde von TERSOFF *et al.* [13] vorgestellt:

$$\Delta E_f = -6cV \tan \theta + 4\Gamma V^{2/3} \tan^{1/3} \theta. \quad (2.2)$$

Hierbei steht  $V$  für das Volumen der Insel,  $\theta$  für den Winkel zwischen Pyramidenfacette und Oberfläche,  $c$  für die elastischen Eigenschaften der Epitaxieschicht und  $\Gamma$  für die Verhältnisse der Oberflächenenergien. Der Term  $c$  ist definiert als  $c = \sigma^2(1 - \nu)/2\pi\mu$ , wobei  $\sigma$  die Verspannung parallel zur Oberfläche einer homogen verspannten Epitaxieschicht ist,  $\nu$  bezeichnet das Poissonverhältnis und  $\mu$  das Schubmodul des als isotrop angenommenen Substrats. Die freie Energie der Oberfläche in der normalen Orientierung  $\gamma_n$  und in der Facette  $\gamma_f$  gehen in  $\Gamma$  ein, das als  $\Gamma = \gamma_f \csc \theta - \gamma_n \cot \theta$  definiert ist. Dieses Modell wurde im SiGe System benutzt [14], um den Übergang zwischen

zwei verschiedenen Inseln zu erklären, die durch unterschiedliche Verhältnisse von Höhe zu Breite und damit durch unterschiedliche Winkel  $\theta$  gekennzeichnet sind.

Die bei epitaktischem Wachstum entstehenden Inseln haben die interessante Eigenschaft, dass sie eine relativ homogene Größenverteilung zeigen. Normale OSTWALD-Reifung [15] kann eine solche Größenhomogenität nicht erklären, da bei diesem Prozess größere Inseln auf Kosten von kleineren Inseln wachsen, ohne dass es einen Mechanismus gibt, der das Größenwachstum der größten Inseln beschränkt. Dies führte SHCHUKIN *et al.* [16] dazu, ein Modell vorzuschlagen, mit dem die Energieänderung durch die Inselbildung als

$$\Delta E_f(n) = -cn \tan \theta + 4\Gamma n^{2/3} \tan^{1/3} \theta + An^{1/3} \ln(a_c/n^{1/3}) \quad (2.3)$$

parametrisiert werden kann [17]. Hierbei bezeichnet  $n$  die Anzahl der Atome in der Insel,  $A$  und  $a_c$  sind Konstanten, die den Einfluss von Verspannungen am Rand der Inseln charakterisieren. Wenn man die Energie der Insel unter der Nebenbedingung, dass die insgesamt deponierte Materialmenge  $N$  erhalten bleiben muss, minimiert, führt dies dazu dass Inseln mit einer gewissen Anzahl Atome  $n_0$  energetisch bevorzugt sind. Für ein Inselensemble aus  $N/n$  Inseln, das sich nach der Deposition von  $N$  Atomen bildet, gibt es also ein Volumen  $n_0 a_0$ , bei dem die Inseln stabil sind.

Ein anderes Modell, bei dem das Wachstum der Inseln kinetisch beschränkt ist, wurde von CHEN *et al.* [18] vorgeschlagen. Bei diesem Modell ist das Inselwachstum dadurch beschränkt, dass die Anlagerung weiterer Atome am Rand der Insel behindert wird, weil diese Zone mit steigender Inselgröße immer stärker verspannt ist.

Das Modell von SHCHUKIN *et al.* setzt den ständigen Austausch großer Materialmengen zwischen den Inseln voraus. Zur Einstellung der wahrscheinlichsten Inselgröße  $n_0$  bei einer Thermalisierung muss nämlich der Übergang von einer Inselgröße  $n$  zu einer anderen Größe  $n'$  hinreichend wahrscheinlich sein. Erfüllt ist diese Bedingung zum Beispiel beim Wachstum von Inseln aus der Flüssigphase (engl. liquid phase epitaxy, LPE) [19]. Das Modell von CHEN *et al.* sagt tendenziell eine Abnahme der auf der Oberfläche diffundierenden Atome im Laufe der Zeit voraus, da die starke Verspannung am Rand der Inseln eine Diffusionsbarriere darstellt und damit den Transport von Atomen von einer Insel zur nächsten behindert.

Sowohl das von SHCHUKIN als auch das von CHEN vorgeschlagene Modell wurden benutzt, um experimentelle Ergebnisse im SiGe System zu erklären [17, 20, 21, 22, 23]. Die von beiden Modellen vorausgesagte Inselverteilung beruht aber auf ganz unterschiedlichen Ursachen. Außerdem ziehen beide Modelle eine Vermischung von Inseln während des Wachstums nicht in Betracht. Selbstorganisierte Inseln, die durch Deposition von reinem Ge gewachsen wurden, besitzen ein inhomogenes SiGe Profil und vermischen während des Wachstums mit dem Substratmaterial [24, 25]. Dies kann mit den vorliegenden Modellen nicht erklärt werden. Der reale Wachstumsmechanismus ist daher als in wesentlichen Teilen ungeklärt zu betrachten.

## 2.2 Eigenschaften niedrigdimensionaler Strukturen

In diesem Abschnitt werden die Ansätze vorgestellt, mit denen die Eigenschaften dünner Schichten und selbstorganisierter Inseln modelliert werden können. Im Folgenden werden die in dieser Arbeit verwendeten Modelle für die Verspannung, die Interdiffusion und für die elektronischen Eigenschaften präsentiert.

### 2.2.1 Verspannung

Der Verspannungszustand selbstorganisierter Inseln ist von großer Wichtigkeit, denn die Verspannungsrelaxation in Inseln ist die treibende Kraft für deren Bildung. Durch Modellierung und Messung der Verspannung kann festgestellt werden, inwieweit die Inseln elastisch relaxiert sind und welchen Einfluss kinetische Faktoren auf die im Experiment beobachtete Inselmorphologie haben. Außerdem hat die Verspannung entscheidende Auswirkungen auf die elektronischen und optischen Eigenschaften der Inseln.

Da die Simulation der Inselverspannung auf atomarer Ebene sehr aufwändig ist [26, 27, 28, 29], wurde in dieser Arbeit auf kontinuumsmechanische Näherungen zurückgegriffen. Hier wird der Einfluss der atomaren Struktur des Kristalls und die Rekonstruktion der Oberfläche vernachlässigt. Insbesondere die Rekonstruktion hat entscheidenden Einfluss auf die Verspannung an der Inseloberfläche [28]. Die Aussagekraft der im Folgenden vorgestellten Modelle ist im Bereich der Oberflächenverspannung also begrenzt. Die Verspannung im Volumen der Insel bzw. in der Inselumgebung sollte aber mit hinreichender Genauigkeit auch mit Kontinuumsmechanik berechenbar sein. Für die in dieser Arbeit untersuchten Fragestellungen ist die kontinuumsmechanische Näherungen daher eine gute Approximation.

Elastische anisotrope Kontinua [30] gehorchen bei infinitesimalen Verzerrungen dem verallgemeinerten HOOKEschen Gesetz:

$$\sigma_{ij} = \sum_{kl} c_{ijkl} \epsilon_{kl} \quad (i, j, k, l = 1, 2, 3) \quad (2.4)$$

Dabei ist  $\sigma_{ij}$  der Spannungstensor,  $\epsilon_{kl}$  der Verzerrungstensor und  $c_{ijkl}$  der Tensor der Elastizitätsmoduln. Wenn das betrachtete Material kubische Symmetrie hat, kann diese Beziehung in folgender verkürzter Form aufgeschrieben werden:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{yz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2c_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ \epsilon_{xy} \\ \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yz} \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

Die elastische Verspannungsenergiedichte

$$E_{el} = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} c_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} = \frac{1}{2} \sum_{ij} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} \quad (2.6)$$

kann in kubischen Materialien in folgende Form [31] gebracht werden:

$$E_{el} = \frac{1}{2} c_{11} (\varepsilon_{xx}^2 + \varepsilon_{yy}^2 + \varepsilon_{zz}^2) + c_{12} (\varepsilon_{xx} \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{xx} \varepsilon_{zz} + \varepsilon_{yy} \varepsilon_{zz}) + 2c_{44} (\varepsilon_{xy} \varepsilon_{xy} + \varepsilon_{xz} \varepsilon_{xz} + \varepsilon_{yz} \varepsilon_{yz}). \quad (2.7)$$

Zunächst zur Verspannung in glatten Schichten, die in kontinuumsmechanischer Näherung recht einfach zu berechnen ist. In pseudomorphen Schichten nehmen dünne, epitaktische Filme auf einem Substrat parallel zur Grenzfläche die Gitterkonstante des Substrats an ( $a_{Film,\parallel} = a_{Substrat}$ ). Die Einheitszelle im Film ist tetragonal verzerrt. In diesem Fall bezeichnet  $\varepsilon_{\perp}$  die Verzerrung in Wachstumsrichtung und  $\varepsilon_{\parallel}$  die Verzerrung in der Ebene des Films. Für  $\varepsilon_{\parallel}$  gilt

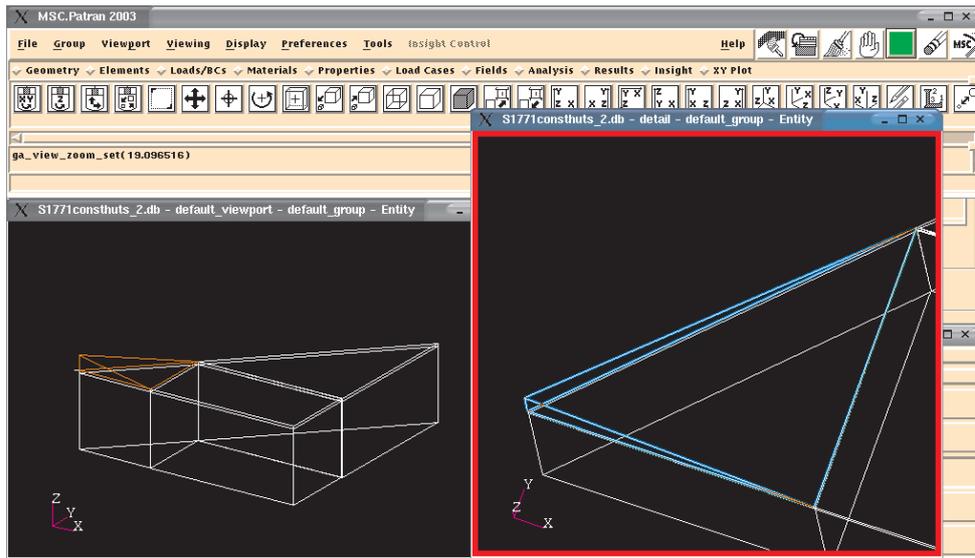
$$\varepsilon_{\parallel} = \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}. \quad (2.8)$$

Senkrecht zur Grenzfläche ist die Verzerrung in einem kubischen Kristall gegeben durch

$$\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{zz} = -2 \left( \frac{c_{12}}{c_{11}} \right) \varepsilon_{\parallel}. \quad (2.9)$$

Verspannungen in einer dreidimensionalen Struktur lassen sich mit Finite-Elemente-Methoden (FEM) berechnen. Ursprünglich für Berechnungen in der Ingenieurmathematik entwickelt, wurde diese Methode zuerst von CHRISTIANSEN *et al.* [32] für selbstorganisierte Inselstrukturen angewendet. Bei finiten Elemente Rechnungen wird die vorgegebene Struktur in diskrete (finite) Elemente aufgeteilt, die aufgrund vorgegebener Belastungen und zusätzlicher Randbedingungen deformiert werden. Einzelne Elemente werden als elastische Kontinua betrachtet. Knotenpunkte verbinden angrenzende Elemente und somit führt die Deformation eines Elements natürlich zur Deformation weiterer Elemente. Ziel der Rechnung ist, die Verschiebungen und Verzerrungen für alle Elemente zu finden, bei denen die Gesamtstruktur die minimale Verspannungsenergie hat. Die durch Benutzung des HOOKESchen Gesetzes gegebene lineare Näherung ist nur gerechtfertigt, wenn die auftretenden Verzerrungen klein sind. In stark verspannten Gebieten müssen die Einzelemente hinreichend klein gewählt werden, damit die Verzerrung jedes einzelnen Elements nicht zu groß wird.

Zur Durchführung der Simulation wird zunächst die zu simulierende Struktur aus einzelnen Teilen zusammengefügt, die jeweils aus nur einem Material mit konstanter Zusammensetzung bestehen. Da die FEM eine kontinuumsmechanische Methode ist, haben die Materialien keine Gitterkonstante und die durch eine Gitterfehlpassung  $\varepsilon_0$  hervorgerufene Verspannung ist nicht direkt simulierbar. Daher werden Substrat- und Epitaxieschichtmaterial als Materialien mit unterschiedlichen Wärmeausdehnungskoeffizienten definiert. Der Wärmeausdehnungskoeffizient wird so gewählt, dass nach

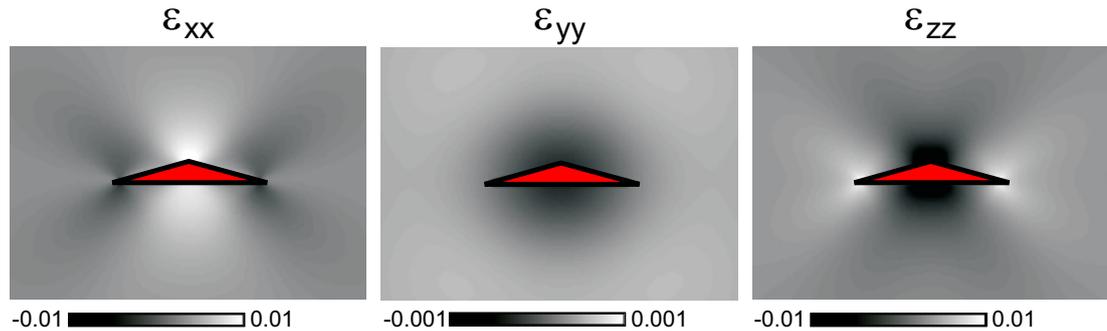


**Abbildung 2.4:** Dreidimensionale Darstellung der Geometrie eines der berechneten Modelle innerhalb der PATRAN/NASTRAN Programmumgebung.

einer Temperaturerhöhung um 1 K das Epitaxieschichtmaterial um die Gitterfehlanpassung größer ist als das Substratmaterial. Wenn für den definierten Körper die Temperatur in der Simulation um ein Kelvin erhöht wird, erhält man als Ergebnis die durch die Gitterfehlanpassung hervorgerufene Verspannung.

Die Simulation wurde mit dem kommerziellen Programmpaket PATRAN/NASTRAN durchgeführt. Dieses Programm erwartet als Eingabedaten die Geometrie der zu simulierenden Struktur und die elastischen Eigenschaften der beteiligten Materialien. Die Geometrie wird in folgenden vier Schritten aus Punkten, Linien, Flächen und Körpern definiert: Zunächst werden Punkte in einem dreidimensionalen Koordinatennetz definiert. Dann werden jeweils zwei oder mehr Punkte zu einer Linie verbunden. Zwei Linien, die nicht auf einer Gerade liegen, spannen eine Fläche auf. Je zwei Flächen, die nicht in derselben Ebene liegen, begrenzen einen Körper. Jedem Körper wird ein Material zugewiesen und aus diesen Körpern wird dann die Struktur zusammengesetzt. Abbildung 2.4 zeigt die Geometriedefinition für eine der in Kapitel 4.2.2 berechneten Strukturen (Modell A, vgl. Abb. 4.7, Seite 76). Für einzelne Kanten oder Flächen der Struktur können Randbedingungen gesetzt werden, zum Beispiel, dass an der Basisfläche der Struktur keine Verzerrungen auftreten dürfen.

In dieser Arbeit wurden die für die Erstellung der Geometrie nötigen Daten mit Hilfe von MATLAB berechnet. Die Umsetzung in das von PATRAN/NASTRAN benötigte Format wurde dann mit einer in MATLAB geschriebenen Programmroutine vorgenommen, die an der Universität Linz entwickelt wurde. Die Umsetzungsroutine definiert auch die Materialeigenschaften für beliebige  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  Legierungen. Dazu werden Ge



**Abbildung 2.5:** Graustufenabbildungen der Zug- und Druckverspannungen um eine Hut Cluster Insel.

und Si als kubische Materialien mit den zugehörigen Elastizitätskonstanten des Volumenmaterials definiert. Für die Legierungen werden die benötigten Elastizitätskonstanten linear interpoliert. Die Gitterfehlpassung für Ge auf Si ist  $\varepsilon_0 = 4,2\%$ , die Gitterfehlpassung der Legierungen wird nichtlinear interpoliert [33]. Vor der Simulation wird zusätzlich ein Netz benötigt, das die Struktur ausfüllt und die einzelnen Körper verbindet. Aus dem Netz werden die für die Rechnung benötigten finiten Elemente generiert. Dazu wird aus jeweils vier oder mehr linear unabhängigen Knotenpunkten dieses Netzes ein Vierflach oder ein Element mit höherer Symmetrie erstellt. Die Erstellung des Netzes erfolgt automatisch, nachdem die gewünschte Netzdichte (und damit die Elementgröße) definiert wurde. Indem bei der Geometriedefinition manuell Bereiche definiert werden, an denen die Netzdichte höher sein soll, kann in bestimmten Bereichen die Berechnungsgenauigkeit verfeinert werden.

Nach der Simulation wird das an der Universität Linz entwickelte Programm XTR benutzt, um die Ausgabedaten von Nastran auszulesen. Dieses Programm berechnet für jedes in der Simulation benutzte Material einzeln die in diesem Material auftretende elastische Verspannungsenergie. Außerdem werden mit dem Programm die berechneten Daten auf ein reguläres Gitter abgebildet, die in den eigentlichen Ausgabedaten von PATRAN/NASTRAN nur für die einzelnen, unregelmäßig geformten finiten Elemente vorliegen. Die weitere Auswertung der von XTR gelieferten Daten erfolgte dann in MATLAB.

Da die Berechnung der Verspannung mittels finiter Elemente sehr aufwändig ist, wurde für vergrabene Inseln eine Methode aus der Kontinuumsmechanik verwendet. Diese Methode basiert auf der Integration des Greenschen Tensor für anisotrope Verspannung. Die Integration des Greenstensor wird über das Volumen der Insel durchgeführt und liefert die elastische Verspannung  $\varepsilon_{kl}$  an einem beliebigen Punkt  $(x, y, z)$  der umgebenden Matrix. Für das Integral lautet die Formel:

$$\varepsilon_{kl}(x, y, z) = \int_V G_{kl}^{\varepsilon}(x - x', y - y', z - z') dV(x', y', z').$$

Hierbei ist  $G_{kl}^{\varepsilon}$  der Greensche Tensor für anisotrope Elastizität. Die Komponenten

dieses Tensor wurden von FAUX und PEARSON [34] in Form einer Reihenentwicklung berechnet. Das Integral wird über das Volumen  $V$  der eingebetteten Insel ausgeführt. Da das Volumen jede beliebige Form annehmen darf, ist dieses Verfahren für beliebige Inselgeometrien anwendbar. In die Formel für den Greenschen Tensor gehen die elastischen Konstanten  $c_{11}$ ,  $c_{12}$  und  $c_{44}$  des Matrixmaterials und die Gitterfehlanspannung  $\varepsilon_0$  der eingebetteten Insel ein. Durch Variation der Gitterfehlanspannung innerhalb der Insel ließe sich prinzipiell auch eine inhomogene Komposition der Insel simulieren. In dieser Arbeit wurden allerdings nur Inseln mit homogenem SiGe Gehalt berechnet. Als Beispiel ist in Abb. 2.5 die Verspannung um eine Hut Cluster Insel beziehungsweise eine langgezogene Pyramide, aufgezeichnet. Die hier gezeigte Insel hat eine rechteckige Grundfläche und ist in der Ebene senkrecht zur Abbildungsebene langgezogen, sie ist 1,5 nm hoch, 15 nm breit und 40 nm lang. Gezeigt ist der Querschnitt durch die Mitte der Insel parallel zur kurzen Seite der Grundfläche.

### 2.2.2 Interdiffusion

Bei der Betrachtung von Diffusionsphänomenen wird in dieser Arbeit meist als einfaches Modell FICKSche Diffusion angenommen [35]. Die FICKSche Diffusionsgleichung

$$\partial C / \partial t = D \Delta C$$

lässt sich bei der Beschränkung auf eine Dimension vereinfachen zu

$$\partial C / \partial t = D \partial^2 C / \partial x^2 \quad (2.10)$$

wobei  $C$  die Konzentrationsverteilung und  $D$  den Diffusionskoeffizient bezeichnet. Gleichung 2.10 liefert ausgehend von vorgegebenen Anfangsbedingungen die zeitliche Entwicklung der Konzentrationsverteilung  $C(x, t)$ .

Die Lösungen für verschiedene Anfangsbedingungen lassen sich analytisch angeben. Für die Anfangskonzentration

$$C = \begin{cases} C_0, & x < 0 \\ 0, & x \geq 0 \end{cases}$$

ist die Lösung für die Konzentration  $C$  nach einer Zeit  $t$  gegeben durch

$$C = \frac{C_0}{2} \operatorname{erfc}(x / (2\sqrt{Dt})).$$

Hiermit kann zum Beispiel im Dreidimensionalen die Diffusion an einer Heterogrenzfläche beschrieben werden.

Für eine endliche Schicht mit der Dicke  $2h$ , die in zwei unendliche Substrate eingeschlossen ist, ist durch

$$C = \begin{cases} C_0, & -h \leq x \leq h \\ 0, & x < -h \text{ oder } x > h \end{cases}$$

die zugehörige Anfangskonzentration gegeben. Für diese Anfangsbedingungen liefert die Lösung der FICKSchen Diffusionsgleichung für die Konzentration  $C$  nach einer Zeit  $t$  die Formel

$$C = \frac{C_0}{2} \left( \operatorname{erf} \left( \frac{h+x}{2\sqrt{Dt}} \right) + \operatorname{erf} \left( \frac{h-x}{2\sqrt{Dt}} \right) \right).$$

Diese Lösung kann auf eine Halbachse beschränkt werden, da bei  $x=0$  kein Diffusionsstrom auftritt. Dann beschreibt sie die Diffusion einer endlichen Schicht der Dicke  $h$  mit einem unendlich dicken Substrat.

### 2.2.3 Elektronische Eigenschaften

Wenn eine dünne Epitaxieschicht eine kleinere Bandlücke als das Substratmaterial hat, werden durch die Bandsprünge in der Schicht Ladungsträger lokalisiert. Bei einem Typ I Bandkantenverlauf werden sowohl Elektronen als auch Löcher in der Schicht lokalisiert, bei einem Typ II Bandverlauf kommt es nur zu Lokalisierung von einer Sorte Ladungsträger, während die anderen Ladungsträger ein abstoßendes Potential erfahren. In diesem Fall werden durch die Heterostruktur die Ladungsträger räumlich getrennt.

Um die Lokalisierungsenergie von Ladungsträgern in selbstorganisierten Inseln zu berechnen, kann man verschiedene Näherungen anwenden. In Inseln, die in einer Raumrichtung wesentlich weniger ausgedehnt sind als in den anderen Richtungen, ist es ausreichend, die Lokalisierungsenergie nur für diese Raumrichtung auszurechnen. Dazu wird die Lokalisierungsenergie eines Teilchens in einem Quantentopf berechnet, dessen Breite der minimalen Ausdehnung entspricht und dessen Tiefe durch den Bandkantensprung an einer homogen verspannten Heterogrenzfläche gegeben ist.

Eine realistischere Näherung lässt sich erreichen, indem die Schrödingergleichung in Effektivmassennäherung für das dreidimensionale Potential der Insel gelöst wird. Hier ist aber zu beachten, dass der Bandverlauf durch die inhomogene Verspannung um die Insel modifiziert werden kann. Diese Näherung setzt also die Kenntnis der Deformationspotentiale voraus, die den Einfluss einer Verspannung auf den Bandverlauf angeben. Außerdem ist natürlich die Berechnung des Spannungsfeldes notwendig [36].

Eine weitere Verbesserung lässt sich erreichen, wenn die Lokalisierungsenergien der Ladungsträger nicht einzeln mit festem Potentialverlauf ausgerechnet werden, sondern selbstkonsistent unter Einbeziehung der durch die Ladungsträger erzeugten elektrischen Felder, d.h. in der Hartree Näherung [37, 38].

Noch genauer lassen sich Lokalisierungsenergien berechnen, indem man zur Berechnung der Ladungsträgerwellenfunktionen in oder an einer Insel z. B.  $k \cdot p$  Methoden benutzt [39, 40].

	Symbol	Silizium	Germanium
Gittertyp		Diamant	Diamant
Gitterkonstante	$a$	5,431 Å	5,657 Å
elastische Konstanten	$c_{11}$	166 GPa	128 GPa
	$c_{12}$	64 GPa	48 GPa
	$c_{44}$	81 GPa	68 GPa

Tabelle 2.1: Materialparameter von Silizium und Germanium (aus [41]).

## 2.3 Das Materialsystem Germanium/Silizium

In diesem Abschnitt werden die für diese Arbeit relevanten Eigenschaften des Germanium/Silizium-Systems zusammengefasst.

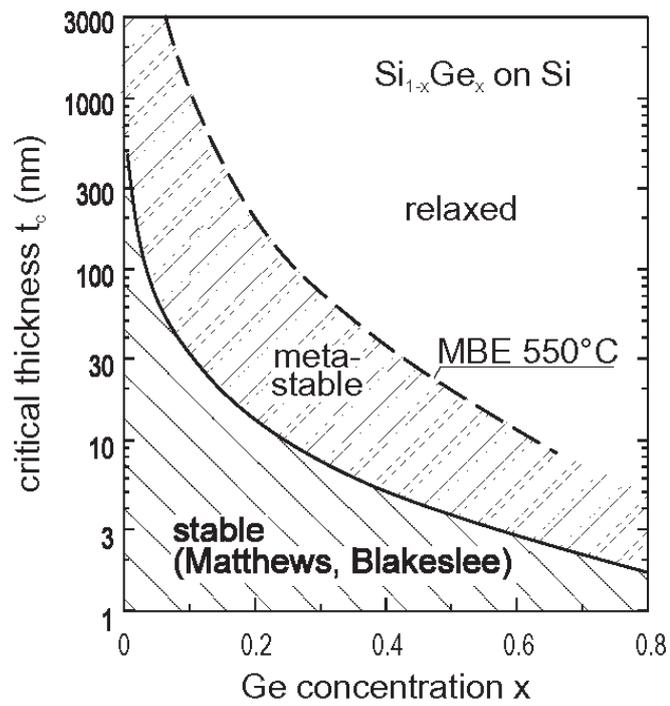
### 2.3.1 Strukturelle Eigenschaften

Silizium und Germanium haben den gleichen Gittertyp, die Gitterfehlpassung ist 4,2%, wie man Tabelle 2.1 entnehmen kann. Si und Ge lassen sich in allen Konzentrationen mischen, die Gitterkonstante eines SiGe-Volumenkristalls ändert sich praktisch linear mit dem Germaniumanteil. In den meisten Fällen ist es ausreichend die Gitterkonstante nach dem Vegardschen Gesetz zu interpolieren:

$$a_{SiGe} = a_{Si} + (a_{Ge} - a_{Si})x$$

Hierbei stehen  $a_{Si}$ ,  $a_{Ge}$  und  $a_{SiGe}$  für die Gitterkonstanten von Si, Ge und der Legierung,  $x$  bedeutet den Ge Anteil. Für genauere Rechnungen ist es notwendig, die Gitterkonstanten eines SiGe Kristalls nichtlinear zu interpolieren [33].

Dünne SiGe-Schichten zeigen auf (001) orientierten Siliziumsubstraten STRANSKI-KRASTANOV-Wachstum. Das heißt, aufgrund der Verspannung im SiGe System können glatte Schichten nur bis zu einer bestimmten Dicke gewachsen werden. Die kritische Schichtdicke einer  $Si_{1-x}Ge_x$ -Schicht, oberhalb der die Schicht relaxiert, hängt vom Germaniumanteil  $x$  ab. Mittels Molekularstrahlepitaxie ist es möglich, Schichten aufzuwachsen, die nicht im thermodynamischen Gleichgewicht stehen. Die Schichten relaxieren erst bei höheren Schichtdicken, die kritische Schichtdicke ist in diesem Fall auch von der Wachstumstemperatur abhängig. Die untere Kurve in Abbildung 2.6 markiert die von Matthews und Blakeslee [43] berechnete Grenze im thermodynamischen Gleichgewicht, die obere Kurve gibt die maximale Schichtdicke metastabiler Schichten beim MBE-Wachstum mit 550°C Substrattemperatur an. Bei passenden Wachstumsbedingungen relaxiert die Schicht oberhalb der kritischen Schichtdicke durch Bildung selbstorganisierter, defektfreier Inseln [2, 3].



**Abbildung 2.6:** Die kritische Schichtdicke von  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ -Filmen auf Silizium in Abhängigkeit des Germaniumanteils  $x$  (aus [42]).

	Symbol	Silizium	Germanium
indirekte Bandlücke			
bei 1,5K	$E_g$	1,170 eV	0,744 eV
bei 10K		1,155 eV	0,741 eV
bei Raumtemperatur		1,113 eV	0,664 eV
dielektrische Konstante	$\epsilon_r$	11,9	16,2
effektive Elektronenmassen	$m_t$	0,19 $m_0$	0,08 $m_0$
	$m_l$	0,91 $m_0$	1,59 $m_0$
Valenzbandparameter	A	-4,26	-13,27
	B	-0,63	-8,63
	C	4,93	12,4
experimentell bestimmte effektive Lochmassen an der Bandkante	$m_{HH}$	0,53 $m_0$	0,28 $m_0$
	$m_{LH}$	0,15 $m_0$	0,04 $m_0$
	$m_{SO}$	0,23 $m_0$	0,09 $m_0$

Tabelle 2.2: Ausgewählte elektronische Parameter von Silizium und Germanium im Volumenkristall (aus [41]).

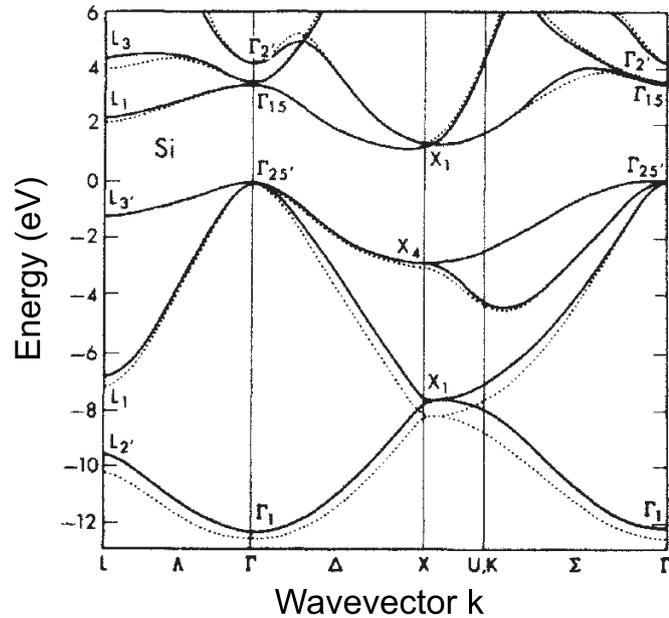
### 2.3.2 Elektronische Eigenschaften

Tabelle 2.2 präsentiert die elektronischen Parameter von Silizium und Germanium im Volumenkristall, die für diese Arbeit von Bedeutung sind. Sowohl Si als auch Ge sind indirekte Halbleiter, das heißt, die energetisch niedrigsten Zustände im Valenz- und Leitungsband befinden sich an unterschiedlichen Stellen im  $k$ -Raum. Die Abbildungen 2.7 und 2.8 zeigen die für Si und Ge berechneten Bandverläufe entlang ausgezeichneter Richtungen im  $k$ -Raum. Wie man sieht, liegt das Valenzbandmaximum in Si und Ge im Zentrum der Brillouin-Zone am  $\Gamma$ -Punkt. In Ge liegt das Leitungsbandminimum auf der  $\langle 111 \rangle$  Achse am L-Punkt, in Si liegt es auf der  $\langle 100 \rangle$  Achse, bei  $0,85 \vec{k}^X$  nahe dem  $\Delta$ -Punkt. Aufgrund der kubischen Kristallsymmetrie sind die Leitungsbandminima im Volumenkristall sechsfach entartet. Die Flächen konstanter Energie sind Ellipsoide um die  $\langle 100 \rangle$  Achsen in Si bzw. um die  $\langle 111 \rangle$  Achsen in Ge. Am Leitungsbandminimum ist die Energiedispersion gegeben durch

$$E = E_C + \hbar^2 \left( \frac{k_x^2 + k_y^2}{2m_t} + \frac{k_z^2}{2m_l} \right).$$

Hierbei sind  $k_x$ ,  $k_y$  und  $k_z$  die einzelnen Komponenten des Quasiimpulsvektors,  $m_l$  die longitudinale effektive Masse entlang der Achsen und  $m_t$  die transversale effektive Masse in den Richtungen senkrecht zu den  $\langle 100 \rangle$  bzw.  $\langle 111 \rangle$  Achsen.

Die Valenzbandmaxima am  $\Gamma$  Punkt bestehen in beiden Elementen aus drei wech-



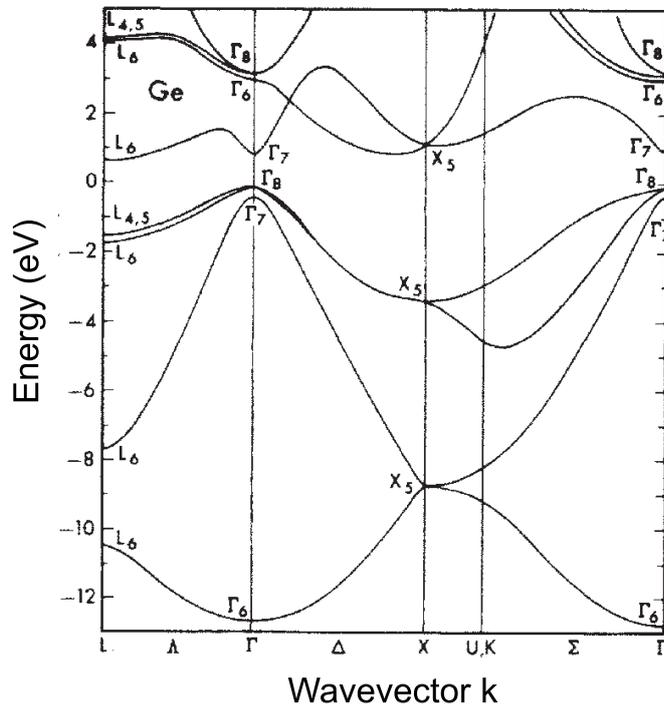
**Abbildung 2.7:** Mittels empirischer, lokaler (gestrichelte Linien) und nichtlokaler Pseudopotentiale (durchgezogene Linien) berechnete Si Bandstruktur (aus [44]).

selwirkenden Bändern, dem LH-Band (engl. light hole “leichtes Loch”), dem HH-Band (engl. heavy hole “schweres Loch”) und einem aufgrund von Spin-Bahn (engl. spin-orbit) Kopplung abgespaltenen SO-Band. Die Attribute “schwer” und “leicht” beziehen sich auf die effektive Masse an der Valenzbandkante im Volumenmaterial. Im elementaren Halbleiter sind das HH-Band und das LH-Band am  $\Gamma$ -Punkt entartet und das SO-Band liegt um 44 meV (Si) bzw. 240 meV (Ge) darunter. Die Valenzbänder sind nicht parabolisch, sondern die Bandkrümmung ändert ihren Wert mit der Kristallrichtung. Man spricht von Bändern mit Verwerfungen. Die Energiedispersion der Valenzbänder wird mit Hilfe der drei Bandparameter A, B und C folgendermaßen beschrieben:

$$E_{HH,LH} = E_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \left( A \pm \sqrt{B^2 + \frac{C^2}{k^4} (k_x^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2)} \right) \quad (2.11)$$

$$E_{SO} = E_v - \Delta - \frac{\hbar^2}{2m_0} A k^2 \quad (2.12)$$

Das “+”-Zeichen beschreibt das LH-Band, das “-”-Zeichen das HH-Band. Das  $\Delta$  steht für die Energielücke zwischen SO- und HH/LH-Band,  $k^2$  bezeichnet das Betragsquadrat des Quasiimpulsvektors und  $k_x$ ,  $k_y$  und  $k_z$  die einzelnen Komponenten des Vektors. Die berechneten effektiven Massen parallel zu den  $\langle 100 \rangle$  Kristallrichtungen sind in Tabelle 2.3 angegeben. In vielen Fällen ist es zu aufwändig, die effektiven Masse in



**Abbildung 2.8:** Mittels empirischer, nichtlokaler Pseudopotentiale berechnete Ge Bandstruktur (aus [44]).

	Germanium	Silizium
$m_{LH}^z/m_0 = (-A - B)^{-1}$	0,05	0,2
$m_{HH}^z/m_0 = (-A + B)^{-1}$	0,2	0,28
$m_{SO}^z/m_0 = (-A)^{-1}$	0,07	0,23

Tabelle 2.3: Effektive Lochmassen parallel zu den  $\langle 100 \rangle$  Richtungen des Kristalls.

	Silizium/Germanium
$\Delta E_v$	$0,84 \pm 0,05$ eV [45]
$\Delta E_c$	$<0,020$ eV [42]

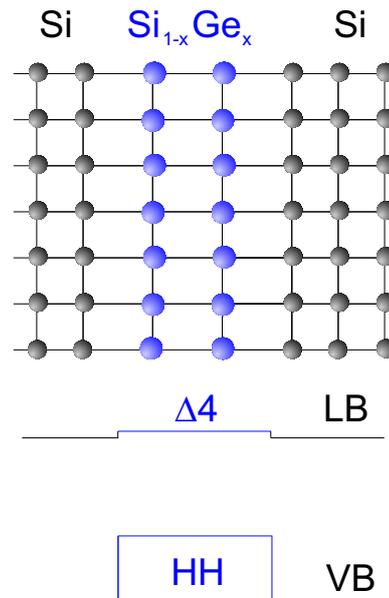
Tabelle 2.4: Bandkantensprünge an der Si/Ge-Grenzfläche in verspannten pseudomorph gewachsenen Ge-Schichten auf Si.

einer bestimmten Richtung mit Hilfe von Gleichung 2.11 zu berechnen. Eine skalare effektive Masse lässt sich angeben, wenn die effektiven Massen über alle Kristallrichtungen gemittelt werden. In Tabelle 2.2 sind die experimentell bestimmten, gemittelten effektiven Massen angegeben.

Die Verspannung hat entscheidende Auswirkungen auf den Bandverlauf in SiGe-Heterostrukturen. Die Bandkantenoffsets im SiGe-System unter Einbeziehung der Verspannung wurden von VAN DER WALLE und MARTIN [45] berechnet. Sie fanden heraus, dass der gewichtete Mittelwert des Valenzbandkantensprungs  $\Delta E_v^{av}$  nur schwach von der Verspannung abhängt und linear mit dem Germanium Anteil  $x$  variiert [46]. Ausgehend von diesem Mittelwert können die Bandkanten aller Bänder des Leitungs- und Valenzbandes beschrieben werden, indem die Korrekturen durch die Spin-Bahn-Aufspaltung, Bandlücken und die Deformationspotenziale für jedes Band hinzugezogen und zu  $\Delta E_v^{av}$  addiert werden. Die Verspannung hebt sowohl die Entartung zwischen HH und LH-Bändern an der Valenzbandkante, als auch die Entartung im Leitungsband auf. Das Leitungsband spaltet in zwei  $\Delta_2$  und vier  $\Delta_4$  Minima auf. Das energetisch am höchsten liegende Band bestimmt den relevanten Offset  $\Delta E_v$  im Valenzband, im Leitungsband bestimmt das am niedrigsten liegende Band  $\Delta E_c$ . Die Leitungsbandkante in pseudomorph verspannten SiGe Schichten auf Si wird durch das  $\Delta_4$ -Band gegeben, die Valenzbandkante stammt vom HH-Band. Ein wichtiges Ergebnis der Rechnungen ist, dass pseudomorphe SiGe-Strukturen auf Silizium so gut wie keinen Offset im Leitungsband zeigen, die Werte liegen innerhalb der Fehlergrenzen der Rechnung von ungefähr 100 meV. Die Ergebnisse sind in Tabelle 2.4 für tetragonal verspanntes Ge auf Si(001) zusammengefasst. Abbildung 2.9 skizziert den Verlauf der Bandlücke in verspanntem SiGe. Gezeigt ist das Kristallgitter mit einer in Silizium eingebetteten, pseudomorphen  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ -Schicht und der zugehörige Bandkantenverlauf. Experimentell wurde ein Typ II-Bandverlauf beobachtet [48], das heißt die Leitungsbandkante liegt im Silizium tiefer als im SiGe-Film.

### 2.3.3 Optische Eigenschaften von Ge/Si Volumenkristallen

Die Leitungsbandminima und Valenzbandmaxima liegen sowohl im Si als auch im Ge an unterschiedlichen Punkten in der ersten Brillouin-Zone. Wegen des sehr geringen Impulses  $\hbar k = E/c$  eines Photons ist eine strahlende Rekombination von Ladungsträgern im Valenz- und Leitungsband nur möglich, wenn der Impuls  $k$  durch die gleichzeitige Aussendung eines Phonons mit geringer Energie aber großem Wellenvektor erhal-

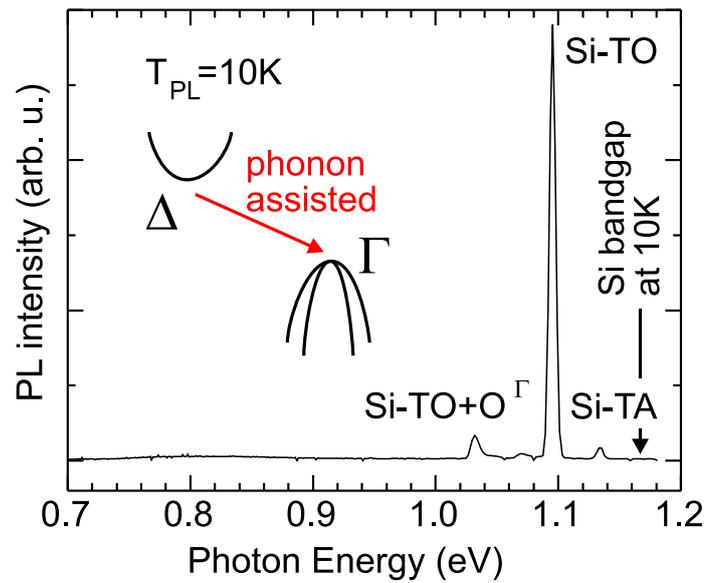


**Abbildung 2.9:** Skizze der Valenz- und Leitungsbandkanten in verspannten  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ -Schichten. Das Leitungsbandminimum ist durch das  $\Delta_4$  Band festgelegt, das Valenzbandmaximum ist durch das HH-Band gegeben (aus [47]).

ten bleibt. Die Strahlungsenergie der ausgesendeten Photonen ist daher im Vergleich zur indirekten Bandlücke des Halbleiters zu niedrigeren Energien hin verschoben. Die möglichen Phononenenergien der bei der Rekombination erzeugten impulserhaltenden Phononen ergibt sich aus der Phonondispersion am Leitungsbandminimum, wobei im SiGe-System Rekombinationen unter Beteiligung von Phononen aus den longitudinalen Zweigen der Phonondispersion nicht vorkommen. Außerdem werden Rekombinationen beobachtet, bei denen ein Phonon aus dem optischen Zweig am  $\Gamma$ -Punkt ausgesendet wird. Da es sich bei phononenassistierter Lumineszenz um einen Mehrteilchenprozess handelt, sind die Übergangswahrscheinlichkeiten für strahlende Rekombination wesentlich geringer als bei direkten Halbleitern, bei denen Leitungsbandminimum und Valenzbandmaximum am gleichen Ort im  $k$ -Raum sind und bei denen Ladungsträger direkt unter Aussendung eines Photons rekombinieren können.

Eine häufig angewandte Methode zur Untersuchung der optischen Eigenschaften von Halbleitern ist die Photolumineszenz (PL). Bei Photolumineszenzmessungen werden Elektronen/Lochpaare durch Absorption von Strahlung erzeugt, deren Energie weit oberhalb der Bandlücke des Halbleiters ist. Die erzeugten Ladungsträger relaxieren zunächst zu den Bandkanten und rekombinieren später wieder. Gemessen wird die bei dieser Rekombination ausgesendete Strahlung [49, 50].

Abbildung 2.10 zeigt ein typisches PL-Spektrum eines Si Einkristalls. Beobachtet wird nur phononenassistierte Lumineszenz. An der Stelle, an der die indirekte Bandlücke liegt, wird keine Lumineszenz gemessen. Die Energien der beteiligten Phononen



**Abbildung 2.10:** Typisches Photolumineszenzspektrum eines Si Kristalls. Es wird ausschließlich phononenassistierte Lumineszenz beobachtet. An der Energieposition, an der bei der Messung die indirekte Bandlücke liegt, wird keine Lumineszenz gemessen.

Name	$E_{phonon}$	$E_{PL}=E_{gap,Si}-E_{phonon}$
Si-TA $^{\Delta}$	18 meV	1.137 eV
Si-TO $^{\Delta}$	58 meV	1.097 eV
Si-O $^{\Gamma}$	64 meV	-
Si-TO $^{\Delta}$ +O $^{\Gamma}$	122 meV	1.033 eV

Tabelle 2.5: Si Phononenenergien, die für die Zuordnung phononenassistierter Übergänge im Si Substrat benutzt wurden [51].

und die Energien der jeweiligen PL Maxima, die im Spektrum zu sehen sind, sind in Tabelle 2.5 aufgeführt.

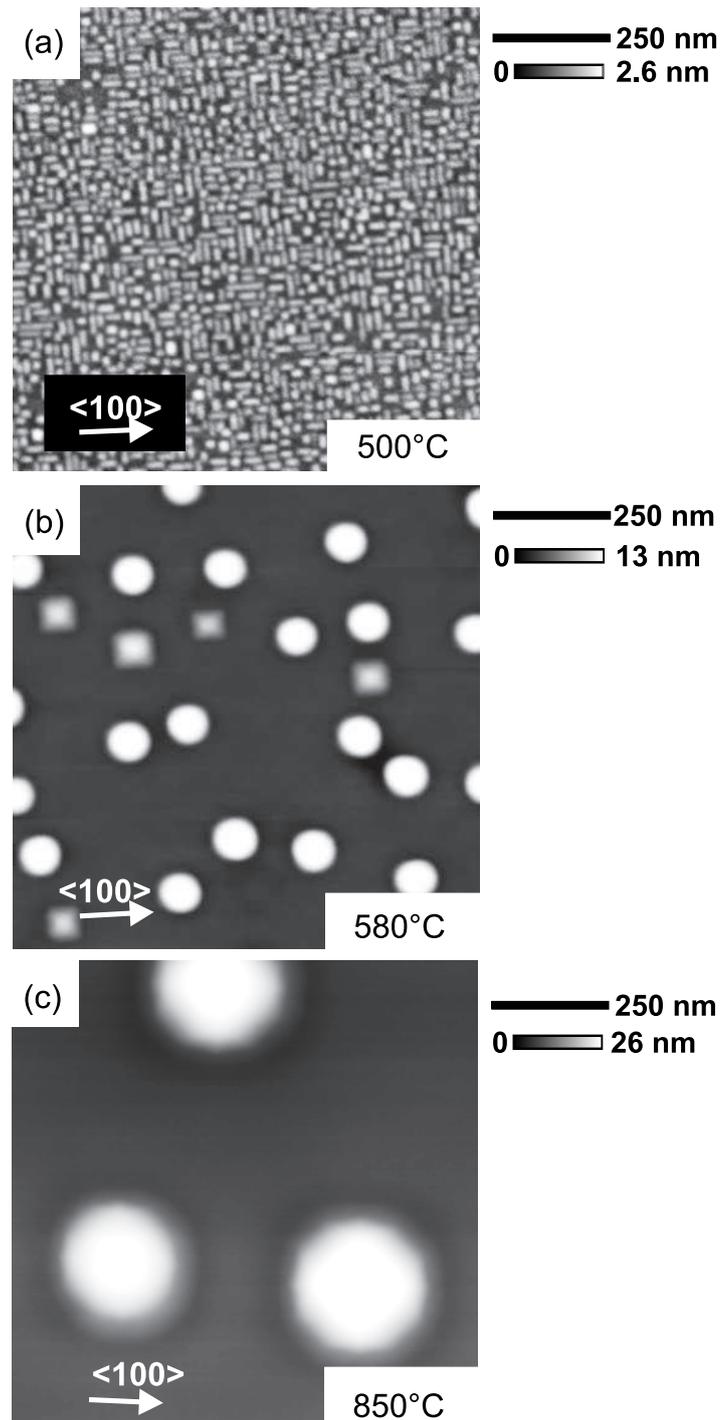
### 2.3.4 Inselwachstum

Für reines Ge auf Si existieren mindestens drei verschiedene Typen von Inseln, die durch selbstorganisiertes Wachstum entstehen können: Große multi-facettierte Domes [2], {105} facettierte Pyramiden mit quadratischer Grundfläche [17] und rechteckige Hut Cluster [3], die ebenfalls von {105} Facetten begrenzt werden. Die Domes haben Durchmesser von 50-300 nm und ähneln in ihrem Aussehen Kugelabschnitten [52]. Pyramiden wachsen im gleichen Temperaturbereich wie Domes und können sich reversibel in diese umwandeln. Die Hut-Cluster sind kleine, langgezogene Pyramiden mit einer Breite in der Größenordnung von etwa 10-15 nm und einem typischen Verhältnis Länge zu Breite von 3:1 oder mehr [53, 54].

Ob Domes oder Huts gebildet werden, hängt von der Substrattemperatur während des Wachstums ab, zwischen beiden Inseltypen existiert ein Phasenübergang bei 560-600°C. Oberhalb dieser Temperatur bilden sich Domes, darunter Huts [55].

Abbildung 2.11 zeigt AFM-Aufnahmen von drei Proben, bei denen jeweils nominell etwa 6 ML Germanium bei verschiedenen Temperaturen abgeschieden wurde und in denen alle beschriebenen Wachstumstypen zu sehen sind: Abbildung 2.11 (a) zeigt Huts mit einer Flächendichte von  $8 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ . In Abbildung 2.11(b) sind Domes mit einer Flächendichte von ungefähr  $3 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$  und Pyramiden zu sehen. Die Domes in Abbildung 2.11(c) zeigen, welche Variabilität der Inselgrößen bei Domes beobachtet wird. Die Inseln haben einen Durchmesser von etwa 300 nm und eine Flächendichte von nur  $3 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$ .

Wenn SiGe Legierungen anstatt reinem Ge abgeschieden werden, hat dies zur Folge, dass die Inseln aufgrund der kleineren Gitterfehlpassung größer werden [56, 57, 58]. Bei sehr kleiner Gitterfehlpassung, d.h. Si $_{1-x}$ Ge $_x$  Legierungen mit  $x < 25\%$ , ändert sich auch der Bildungsmechanismus der Inseln. Die Inseln entstehen dadurch, dass die Schicht kontinuierlich welliger wird und ohne dass ein Nukleationsprozess stattfindet [59, 60].



**Abbildung 2.11:** Die Bildung von selbstorganisierten Quantenpunkten hängt empfindlich von der Temperatur des Substrates beim Probenwachstum ab. (a) Bei 500°C wachsen Huts, (b) bei 580°C wachsen Domes und Pyramiden in einer bimodalen Verteilung, und (c) bei 850°C wachsen ausschließlich große Domes.

### 2.3.5 Überwachsen von Inseln

Zur Untersuchung der elektrischen und optischen Eigenschaften der Inseln ist es meist nötig, die Inseln mit Si zu überwachsen um sie zu passivieren und das Oxidieren der Inseln zu vermeiden. Beim Überwachsen mit Si verändern die Inseln ihre Form, sie werden viel flacher und bilden eine {100} Facette an der Oberfläche [61, 62, 63]. Diese Form ist verursacht durch eine Umlagerung des Ge [61, 64, 65] und gleichzeitige Vermischung mit Si [66] während des Überwachsens. Wenn die Substrattemperatur beim Überwachsen wesentlich niedriger ist als beim Wachstum der Inseln, lässt sich die Form der freistehenden Inseln erhalten [67, 68].

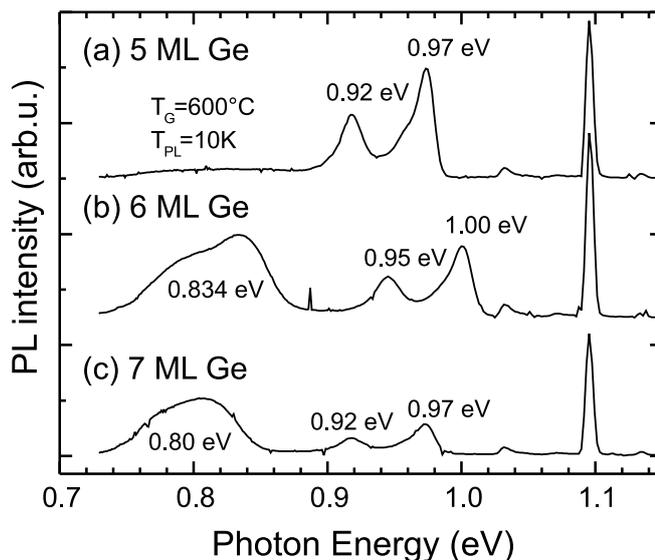
Wenn die Inseln durch Überwachsen in Silizium eingebettet werden, entsteht ein ausgedehntes Spannungsfeld oberhalb der Inseln, das die Größe der Inseln weit übersteigt. Experimentell stellt man fest, dass die Inseln sich vertikal anordnen, wenn die dazwischen gewachsenen Siliziumbarrieren nicht zu dick sind [69, 70, 71, 72] und die Si Oberfläche zwischen zwei aufeinander folgenden Insellagen ausreichend planarisiert wird [73, 74]. Dies führt außerdem dazu, dass die kritische Schichtdicke für Inselwachstum bei erneutem Aufwachsen von  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  vermindert wird, solange die Deckschicht eine bestimmte Dicke unterschreitet [75].

### 2.3.6 Optische Eigenschaften von niedrigdimensionalen Strukturen

In dünnen Schichten aus SiGe können strahlende Übergänge ohne Phononenbeteiligung (engl. no-phonon, NP) beobachtet werden [76, 77, 78, 79, 80]. Denn in diesen Schichten gelten die Erhaltungsregeln für den Quasiimpuls nicht mehr streng.

Zeitweilig wurde in der Literatur diskutiert, ob dünne, verspannte SiGe Schichten in Si einen Typ-I oder Typ-II Bandkantenverlauf zeigen [81]. Einige Experimente zeigen eine Typ I-artige Lumineszenz, bei der sowohl Elektronen als auch Löcher in den SiGe Schichten lokalisiert sind [82, 83]. Der Bandkantensprung im Leitungsband ist so klein, dass Elektronen bei höheren Ladungsdichten durch die ladungsinduzierte Bandverbiegung in den SiGe Bereich gelangen können und der Bandverlauf somit von der Anregungsdichte abhängig wird. Bei sehr niedrigen Anregungsdichten wurde ein Typ-II Bandverlauf in verspannten SiGe Schichten gemessen [48], das heißt, die Elektronen befinden sich im Leitungsband im Si, während die Löcher im SiGe lokalisiert sind.

Elektronen sind an dünnen SiGe Schichten auf Si nur sehr schwach lokalisiert, die Lokalisierung basiert auf der exzitonen Bindung mit Löchern. Eine bessere Lokalisierung der Löcher wird in Strukturen erreicht, in denen sowohl die SiGe Schicht als auch das umliegende Si verspannt sind. Die Verspannung führt zu einer Absenkung des Leitungsbands im Si. In einer sogenannten “neighboring confinement structure” (NCS) [84] wird eine dünne  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  Schicht zwischen zwei dünnen Si Schichten gewachsen. Die gesamte Struktur wird auf einem relaxierten  $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$  Puffer mit  $x > y$  gewachsen. Dies führt dazu, dass die dünne SiGe Schicht einen Quantentopf für die



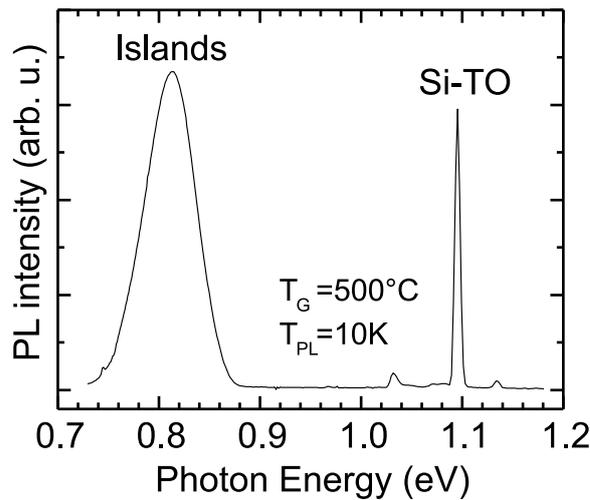
**Abbildung 2.12:** Typische PL von Ge Schichten, die bei 600°C gewachsen wurde. Ab einer Schichtdicke von 6 ML ist die niederenergetische PL selbstorganisierter Inseln sichtbar.

Löcher darstellt und die Si Schicht einen Quantentopf für die Elektronen bildet. Die effektive Ladungsträgerlokalisierung erhöht die Intensität strahlender Rekombinationen, da weniger Ladungsträger durch konkurrierende Prozesse verloren gehen.

In Proben mit selbstorganisierten Inseln wurde Lumineszenz im Bereich von 0,75 bis etwa 0,9 eV beobachtet, die den Inseln zugeordnet wurde [85,86,87,88,89,47]. Die wichtigsten Ergebnisse dieser Studien zur Photolumineszenz selbstorganisierter Inseln können anhand von Abbildung 2.12 illustriert werden. Beim Wachstum dünner Ge Schichten unterhalb der kritischen Schichtdicke für Inselbildung zeigt die Benetzungsschicht zunächst die typische Quantentopflumineszenz, die mit zunehmender Schichtdicke und damit zunehmender Topfbreite zu niedrigeren Energien hin verschiebt. Abbildung 2.12(a) zeigt eine solche typische PL einer Benetzungsschicht.

Nach dem Übergang vom zweidimensionalen Wachstum der Benetzungsschicht zum dreidimensionalen Inselwachstum wird ein zusätzliches niederenergetisches Lumineszenzmaximum sichtbar. Das breite Maximum in Abbildung 2.12(b) bei etwa 0,83 eV wird den strahlenden Übergängen in den Inseln zugeordnet. Durch die große bei der PL-Messung angeregte Fläche mittelt das Signal über ein großes Ensemble von Inseln. Die Breite des Maximums ist daher durch die Inhomogenität der Inseln gegeben, welche leicht unterschiedliche Rekombinationsenergien verursacht.

Bei Wachstumstemperaturen um 600°C und höher lässt sich das Maximum in zwei Anteile zerlegen, die NP- und TO-phononenassistenten Übergängen in den Inseln zugeordnet wurden. In Abbildung 2.12(b) zeigt das Maximum eine tieferenergetische Schulter, die dem erwähnten phononenassistenten Übergang zugeordnet werden kann.



**Abbildung 2.13:** PL Spektrum einer typischen Probe mit selbstorganisierten Inseln, die bei  $500^\circ\text{C}$  gewachsen wurden.

TEM-Aufnahmen haben gezeigt, dass die untersuchten Inseln nach dem Überwachsen sehr flach und breit sind, was die beobachtete Quantentopf-ähnliche Lumineszenz mit NP- und TO-Maximum erklären kann. Erwähnenswert ist, dass einige Autoren die tieferenergetische Schulter anders interpretieren [89]. Aus strukturellen Messungen ist bekannt, dass bei  $600^\circ\text{C}$  Pyramiden mit Dome Inseln koexistieren (vgl. Abschnitt 2.3.4). Die beiden Lumineszenzmaxima werden daher den unterschiedlichen Inseln zugeordnet.

Ferner wurde beobachtet, dass sich die Lumineszenz der Benetzungsschicht mit Auftreten der Insellumineszenz zu höheren Energien hin verschiebt, in Abb. 2.12(b) liegt die Lumineszenz der Benetzungsschicht beispielsweise etwa 30 meV höher als in Abbildung 2.12(a). Dies wurde als Beleg interpretiert, dass die Dicke der Benetzungsschicht abnimmt, wenn Inseln wachsen, da Material aus der Benetzungsschicht in die Inseln transportiert wird.

Nach weiterer Deposition von Ge verschieben sich die Positionen der Lumineszenzmaxima zu niedrigeren Energien, wie in Abb. 2.12(c) gezeigt. Die Lumineszenz der Benetzungsschicht erreicht wieder dieselbe energetische Position wie vor dem Einsatz des Inselwachstum. Die Insellumineszenz verschiebt sich zu niedrigeren Energien, da die durchschnittliche Inselgröße zunimmt.

Bei hohen Wachstumstemperaturen bleibt die Lumineszenz der Benetzungsschicht sichtbar, auch wenn die Gesamtschichtdicke erhöht wird. Abbildung 2.12(c) zeigt Lumineszenz sowohl von der Benetzungsschicht als auch von den Inseln. Die Lumineszenzmaxima sind gegenüber Abb. 2.12(b) durch das zusätzlich abgeschiedene Material zu niedrigeren Energien hin verschoben. Bei Wachstumstemperaturen klei-

ner als 580°C verschwindet die Lumineszenz der Benetzungsschicht mit zunehmender Schichtdicke, da die Inseldichte stark zunimmt und generierte Ladungsträger vor der Rekombination von der Benetzungsschicht in die Inseln diffundieren können. Bei niedrigen Wachstumstemperaturen sind die selbstorganisierten Inseln sehr klein, eine Näherung als Quantentopf ist nicht mehr gerechtfertigt und die Erhaltungsregeln für den Quasiimpuls gelten nicht mehr. Das Lumineszenzmaximum enthält dann auch keinen TO Anteil mehr, die Lumineszenz läuft ohne Phononenbeteiligung ab. Dies wird in Abbildung 2.13 illustriert. Abbildung 2.13 zeigt ein typisches PL Spektrum einer Probe mit selbstorganisierten Inseln, die bei 500°C gewachsen wurde. Die PL Maxima oberhalb von 1 eV lassen sich phononenassistierten Übergängen im Si Substrat zuordnen, das PL Maximum der Inseln liegt etwas über 0,8 eV und zeigt eine fast gaußförmige Intensitätsverteilung.

## 2.4 Probenherstellung mittels Molekularstrahlepitaxie

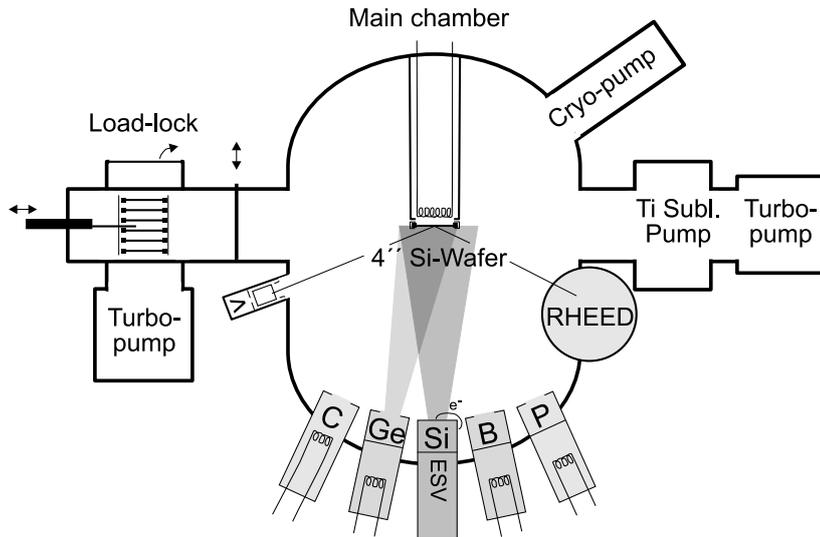
Alle untersuchten Proben wurden mittels Molekularstrahlepitaxie am Max-Planck-Institut für Festkörperforschung in Stuttgart hergestellt. Mit Molekularstrahlepitaxie (engl. molecular beam epitaxy, MBE) ist es möglich, im Ultrahochvakuum (UHV) kontrolliert einzelne Atomlagen eines Materials auf ein Substrat aufzuwachsen. In diesem Abschnitt wird der zur Herstellung der Proben verwendete Prozess beschrieben.

### 2.4.1 Waferpräparation

Die in dieser Arbeit untersuchten Proben wurden auf 100 mm (4 Zoll) Silizium-Substraten mit (001)-Oberflächenorientierung gewachsen. Alle Proben waren nominell undotiert ( $p^-$ ) mit einem spezifischen Widerstand von mehr als 4000  $\Omega\text{cm}$  bei Raumtemperatur. Vor dem Einbau in die Ultrahochvakuumkammer der MBE-Anlage wurden die Wafer gereinigt [90]. Die Reinigungsprozedur besteht aus folgenden Schritten:

1. 3 Min. Eintauchen in Flusssäure (HF-Dip) zum Entfernen des Siliziumoxids ( $\text{SiO}_2$ ),
2. 2 Min. Abspülen in deionisiertem Reinstwasser,
3. 8 Min. Ätzen in einer Lösung aus  $\text{H}_2\text{SO}_4$ (60%) :  $\text{H}_2\text{O}_2$ (10%) :  $\text{H}_2\text{O}$  (30%), um organisches Material zu entfernen und die Oberfläche mit einer gleichmäßigen Oxidschicht zu versehen,
4. 2 Min. Abspülen in deionisiertem Reinstwasser.

Diese Prozedur wird dreimal wiederholt, wobei nach dem zweiten Durchgang die Chemikalien erneuert werden. Nach dem letzten Schritt werden die Wafer in Methanol getaucht, um eine Verunreinigung während des Transports zur MBE-Anlage zu verhindern.



**Abbildung 2.14:** Schemazeichnung der SiGeC MBE-Anlage, die zum Wachstum aller in dieser Arbeit untersuchten Proben benutzt wurde.

## 2.4.2 Aufbau der MBE-Anlage

Die MBE-Anlage, in der die Proben hergestellt wurden, ist in [Abbildung 2.14](#) schematisch dargestellt. Es handelt sich dabei um eine modifizierte ULS(Ultra Large Scale)-400 Feststoffquellen-MBE der Firma Balzers. Die UHV-Kammer der MBE-Anlage wird mit einer LEYBOLD RGD210 Kryopumpe, einer PFEIFFER TPU450 HPS Turbopumpe und einer Titan Sublimationspumpe auf einen Basisdruck von etwa  $1 \times 10^{-10}$  mbar gepumpt. Während des Wachstums war der Druck typischerweise im Bereich von  $5 \times 10^{-9}$  mbar.

Das Si-Substrat wird über eine Schleusenkammer eingebracht, die vorher ebenfalls auf UHV Druck gepumpt wird. Vor dem Wachstum wird der Wafer in der Hauptkammer ausgeheizt, damit übriggebliebene Verunreinigungen Zeit haben, zu desorbieren.

Die Molekularstrahlen werden auf zwei verschiedene Weisen erzeugt: Das Hauptmaterial Silizium wird mit einem ESQ407U-Elektronenstrahlverdampfer erhitzt. Dieser ist zur Regelung der Flussrate an ein QMG421-Massenspektrometer rückgekoppelt. Die anderen Materialien für die Epitaxie befinden sich in Effusionszellen, die widerstandsbeheizt sind und die über Temperaturregler auf die gewünschte Verdampfungsrate eingestellt werden. Es sind vier Effusionszellen vorhanden (Ge, C, B, GaP). Die Germaniumzelle und die Kohlenstoffzelle werden für das Wachstum von Heterostrukturen verwendet, die Borzelle zur p-Dotierung und die Galliumphosphidzelle zur n-Dotierung der Proben mit Phosphor. Der Materialfluss auf das Substrat kann für jede Zelle über mechanische Blenden ein- und ausgeschaltet werden. Die Ratenkalibrierung sowohl für Si und Ge erfolgt mittels Röntgenmessungen an  $\text{Si/Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  Übergittern oder mit einer dicken  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  Schicht. Das gemessene Röntgenbeugungsbild um den

(004) Substratreflex wird dazu mit simulierten Beugungsmustern in Übereinstimmung gebracht. Aus den Simulationsdaten lässt sich die Schichtdicke einer  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  Schicht und der Ge Gehalt unabhängig voneinander bestimmen. Aus den Depositionszeiten ergeben sich dann die Raten sowohl für Si als auch für Ge. Bei einem Übergitter ergibt sich der durchschnittliche Ge Gehalt aus der Verschiebung des Übergittermaximums nullter Ordnung im Vergleich zum Si Substratmaximum. Die Übergittermaxima erster Ordnung entsprechen der Periode einer  $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  Doppelschicht. Aus den Informationen durchschnittlicher Ge Gehalt und Gitterperiode lassen sich ebenfalls die Raten bestimmen.

### 2.4.3 MBE-Wachstum

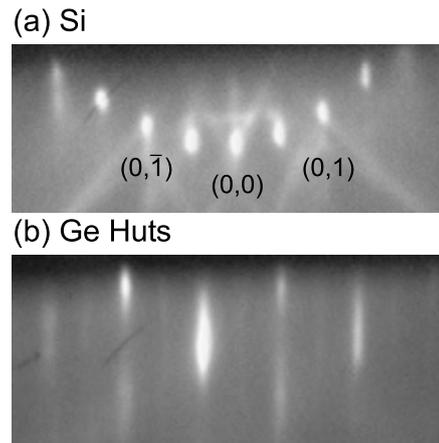
Die MBE-Anlage wird beim Wachstum über einen PC ferngesteuert. Dazu wird für jede Probe ein individuelles Steuerungsprogramm erstellt, das von einer spezialisierten MBE-Steuerungssoftware abgearbeitet wird. Das Wachstum der in dieser Arbeit untersuchten Proben folgt folgendem grundsätzlichen Schema:

1. Der Wafer wird zunächst bei  $900\text{ }^\circ\text{C}$  deoxidiert.
2. Die Substrattemperatur wird zum Anwachsen auf  $T_g = 460\text{ }^\circ\text{C}$  zurückgefahren.
3. Als Pufferschicht wird 30-100 nm undotiertes Silizium mit einer Rate von  $0,1\text{ nm/s}$  gewachsen. Während des Wachstums dieser Schicht wird die Substrattemperatur auf  $700\text{ }^\circ\text{C}$  hochgefahren, um eine möglichst gute Kristallqualität des Puffers zu erreichen. Erst kurz vor dem Wachstum der aktiven Schicht wird die Substrattemperatur auf den gewünschten Wert eingestellt.
4. Die aktive Schicht wird gewachsen, das sind je nach Probe eine oder mehrere Schichten mit Inseln.
5. Bei Proben, an denen Photolumineszenzmessungen vorgesehen sind, werden die gewachsenen Strukturen zum Schluss mit einer 30 nm - 100 nm dicken, undotierten Siliziumschicht passiviert.

Die Wachstumsparameter der letzten beiden Schritte unterscheiden sich von Probe zu Probe. In den folgenden Kapiteln werden die aktiven Schichten und die eventuell vorhandene Si Deckschicht daher jeweils direkt vor den experimentellen Ergebnissen genauer erläutert.

### 2.4.4 Ausheilschritt im RTA-Ofen

Nach dem Ausbau aus der MBE-Anlage wurden einige Proben in einer mit Halogenlampen geheizten SHS 100vac Rapid-Thermal-Annealing (RTA) Anlage getempert. Dieser Prozessschritt heilt Punktdefekte aus, die dadurch entstehen, dass Silizium- oder Germaniumatome aufgrund der niedrigen Wachstumstemperatur nicht an ihre richtigen Kristallpositionen gelangen, sondern auf Zwischengitterplätzen sitzen.



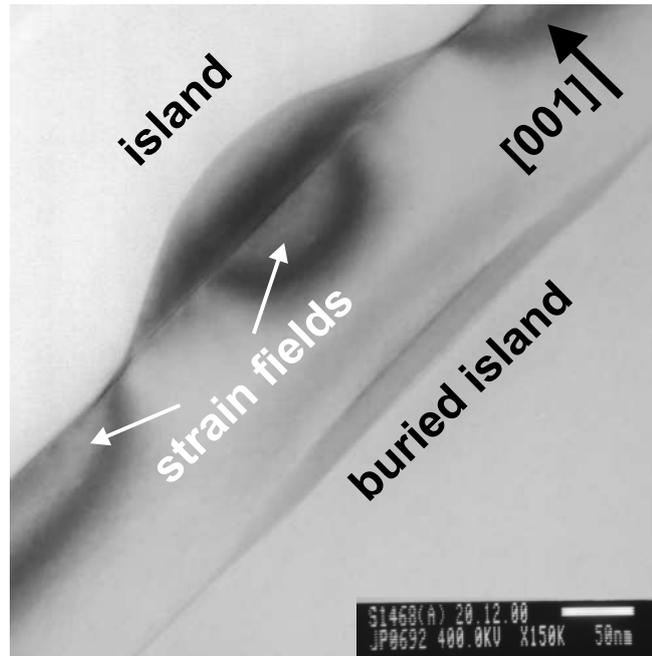
**Abbildung 2.15:** Typische RHEED Muster, die beim Wachstum selbstorganisierter Ge Inseln auf Si beobachtet werden. (a) RHEED Muster einer Si Oberfläche nach dem Deoxidationsschritt, (b) RHEED Muster nach dem Wachstum von Hut Cluster Inseln.

## 2.5 Analysemethoden

In diesem Abschnitt werden die in dieser Arbeit benutzten Analysemethoden vorgestellt, mit denen die strukturellen und elektronischen Eigenschaften der mittels MBE gewachsenen Proben untersucht wurden.

### 2.5.1 RHEED

Während des Wachstums liefert ein RHEED-System (Reflection High Energy Electron Diffraction) der Firma STAIB-Instrumente (STAIB EK-35) Informationen über die Oberflächenmorphologie. Beim RHEED-Verfahren werden unter kleinem Winkel zur Probenoberfläche einfallende, hochenergetische Elektronen reflektiert und gebeugt. Das entstehende Beugungsmuster wird auf einem Schirm abgebildet und gibt Aufschluss über die Oberflächenbeschaffenheit. In dieser Arbeit diente es nur zur Kontrolle des Wachstumsmodus, denn der Einsatz von STRANSKI-KRSTANOV-Inselwachstum oberhalb der kritischen Schichtdicke wird begleitet durch eine typische Änderung des RHEED-Bildes: Die mit RHEED abgebildete Rekonstruktion einer  $2 \times 1$  Oberfläche besteht aus einem parallelen Streifenmuster (streaky pattern), das beim Übergang zum 3D-Inselwachstum in ein Punktmuster (spotty pattern) wechselt. In Abbildung 2.15 sind typische RHEED Muster gezeigt, wie sie nach dem Deoxidieren (Abb. 2.15(a)) und nach dem Wachstum einer Inselfschicht mit Hut Clustern (Abb. 2.15(b)) beobachtet werden.



**Abbildung 2.16:** TEM-Aufnahme von zwei vertikal gestapelten Dome Inseln, die bei 850°C gewachsen wurden.

### 2.5.2 Transmissionselektronenmikroskopie

Die Struktur von freistehenden und auch von mit Si überwachsenen Inseln lässt sich mittels Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) untersuchen. Für TEM-Aufnahmen werden die zu untersuchenden Proben soweit gedünnt, dass sie für Elektronen teilweise transparent werden. Gemessen wird dann das beim Durchstrahlen der Probe entstehende Beugungsmuster der Elektronen. Außer durch das Material wird die Beugung der transmittierten Elektronen auch von der Verspannung beeinflusst. In transmissionselektronenmikroskopischen Aufnahmen ist daher meistens auch das Verspannungsfeld sichtbar.

Abbildung 2.16 zeigt eine Beispielaufnahme mit einer freistehenden und einer überwachsenen Insel, die beide bei einer Substrattemperatur von 770°C gewachsen wurden. Oben links ist die freistehende, linsenförmige Insel zu erkennen. Das durch die Insel erzeugte Verspannungsfeld im darunterliegenden und umgebenden Si Substrat ist sehr auffällig sichtbar. Im unteren rechten Bildteil ist die überwachsene Insel zu identifizieren, über der ebenfalls ein leichtes Verspannungsfeld sichtbar ist. Die überwachsene Insel ist von einer klar erkennbaren Benetzungsschicht umgeben, die Linie der Benetzungsschicht verläuft parallel zur Substratoberfläche.

### 2.5.3 Rasterkraft- und Rastertunnelmikroskopie

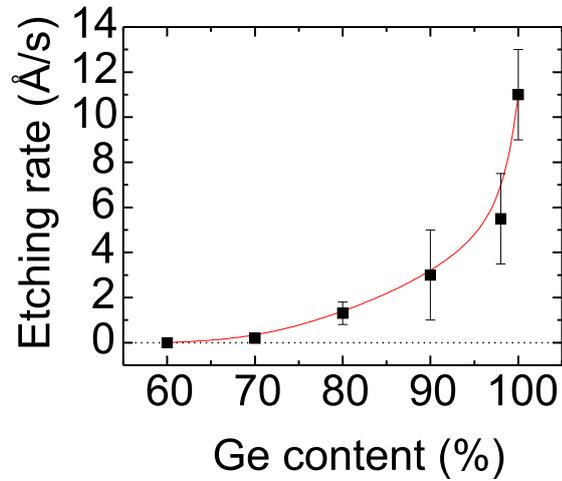
Zur strukturellen Charakterisierung von Halbleiteroberflächen eignet sich die Rasterkraftmikroskopie, die Messungen unter Atmosphärendruck erlaubt. Die in dieser Arbeit gezeigten Aufnahmen mit dem Rasterkraftmikroskop (engl. atomic force microscope, AFM) stammen von einem “digital instruments Nanoscope IIIa Multimode AFM”, das im “Tapping Mode” betrieben wurde. In vertikaler Richtung lassen sich mit diesem Mikroskop atomare Stufen auflösen. Die laterale Auflösung ist dadurch beschränkt, dass das gemessene Profil eine Faltung der Spitzengeometrie mit der Oberflächenstruktur darstellt.

Außerdem wurden eine Reihe Proben auch in einem Rastertunnelmikroskop (engl. scanning tunnelling microscope, STM) untersucht. Es handelt sich dabei um ein völlig separates, speziell konstruiertes STM, das Probentransfers zwischen MBE und STM im Ultrahochvakuum ( $<10^{-9}$  mbar) ermöglicht. Dazu wird ein UHV Transportkoffer an die Ladekammer der MBE-Anlage angebaut und nach dem Probenwachstum wird die Probe in den Transportkoffer transferiert, ohne das Vakuum zu brechen. Der Koffer wird dann mit einem Ventil verschlossen, von der MBE Transferkammer abgebaut und an das STM angebaut. Zwischen Transportkoffer und STM sitzt ein zunächst auf Atmosphärendruck befindliches Transferstück, das vor dem Transfer der Probe ins STM auf UHV Druck gepumpt wird. Da die STM-Aufnahmen relativ aufwändig sind, wurden im Rahmen dieser Arbeit nur ausgewählte Proben mit STM vermessen, um die mit AFM gewonnenen Messwerte zu verifizieren. Es zeigte sich, dass die AFM-Messdaten für die in dieser Arbeit benötigten Zwecke hinreichend genau sind. Alle im Folgenden vorgestellten strukturellen Messreihen basieren daher auf AFM Daten.

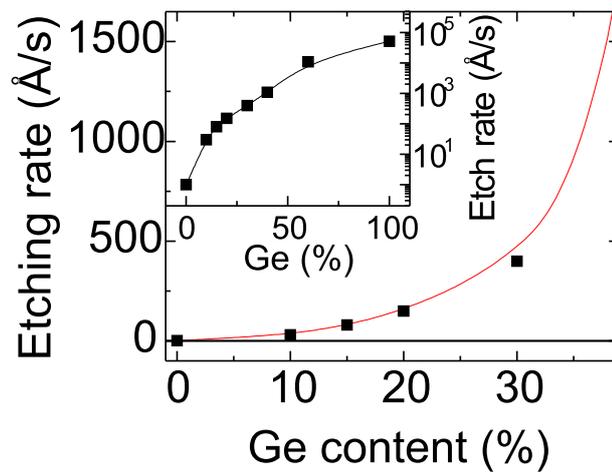
### 2.5.4 Nasschemisches Ätzen

Zur Untersuchung der Zusammensetzung von selbstorganisierten Inseln wurden diese in verschiedenen nasschemischen Ätzlösungen geätzt. Im SiGe System existieren mehrere Ätzlösungen, die hochgradig selektiv sind und je nach chemischer Zusammensetzung des Materials extrem unterschiedliche Ätzraten haben. AFM-Aufnahmen nach einem Ätzschritt erlauben Rückschlüsse auf Zusammensetzung einzelner selbstorganisierter Inseln. Gleichzeitig ist es möglich, Statistiken über große Inselensembles zu erstellen und so zu testen, wie repräsentativ die an einer einzelnen Insel gefundenen Kompositionsprofile sind und welchen Schwankungen die Zusammensetzungen unterworfen sind. Dazu ist nur die detaillierte Auswertung großflächiger AFM-Aufnahmen notwendig, deren Erstellung sehr einfach ist und die in akzeptabler Zeit analysiert werden können.

In dieser Arbeit wurden zwei verschiedene selektive Ätzlösungen verwendet. Die Eignung für Volumenkristalle und zugehörige Ätzraten sind aus der Literatur bekannt, die Eignung dieser Ätzlösungen für Strukturen im Nanometerbereich wurde im Rahmen dieser Arbeit untersucht und wird in den Abschnitten 3.1.3 und 4.2 genauer diskutiert.



**Abbildung 2.17:** Ättrate von 31% Wasserstoffperoxid als Funktion des Ge Gehalt der geätzten SiGe Legierungen.



**Abbildung 2.18:** Ättrate von 1 HF : 2 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> : 3 CH<sub>3</sub>COOH als Funktion des Ge Gehalts der geätzten SiGe Legierungen [91].

Die erste benutzte Ätzlösung ist 31%  $\text{H}_2\text{O}_2$ . Diese Wasserstoffperoxidlösung ätzt selektiv Ge [92], aber keine siliziumreichen SiGe Legierungen und kein Si. Um die genaue Selektivität von Wasserstoffperoxid zu testen, wurden dicke, relaxierte SiGe Schichten auf Si Substraten geätzt. Bei SiGe Schichten mit einem Ge Gehalt bis 60% wurde auch nach mehreren Stunden in der Ätzlösung kein Ätzeffekt festgestellt. Dagegen konnte auf einem relaxierten Puffer mit 70% Ge eine Ätzrate von  $0.03 \pm 0.01 \text{ nm/s}$  bestimmt werden. Daraus lässt sich der Schluss ziehen, dass die Ätzlösung effektiv bei einem Ge Gehalt von  $65 \pm 5\%$  stoppt. Mit zunehmendem Ge Gehalt steigt die Ätzrate stark an, wie Abbildung 2.17 zeigt.

Die zweite Ätzlösung ist eine Mischung aus 1 HF : 2  $\text{H}_2\text{O}_2$  : 3  $\text{CH}_3\text{COOH}$  [91,93]. Als benutzte Chemikalien kommen dabei 49% HF, 31%  $\text{H}_2\text{O}_2$  und 98%  $\text{CH}_3\text{COOH}$  in VLSI Qualität zum Einsatz. Diese Ätzlösung ätzt sowohl Si als auch SiGe Legierungen. Allerdings ist die Ätzrate schon bei einem Ge Gehalt von 10% um den Faktor 30 höher als auf Si. Abbildung 2.18 zeigt die in [91] veröffentlichten Ätzraten in Abhängigkeit vom Ge Gehalt.

### 2.5.5 Photolumineszenz

Zur Untersuchung der elektronischen Eigenschaften der Inseln wurden Photolumineszenz-Messungen (PL) durchgeführt. Hierbei wurde eine Probenoberfläche in der Größenordnung von  $1 \text{ mm}^2$  mit einem Laser beleuchtet und die spontane Emission bei Temperaturen unter 15 K gemessen. Es wurden zwei experimentelle Aufbauten benutzt.

Beim ersten Aufbau wird das Anregungslicht von einem Argon Laser mit 70 mW Ausgangsleistung (SPECTRA PHYSICS Series 2000) bei einer Wellenlänge von 488 nm geliefert. Das Laserlicht wird über eine drehende Schlitzscheibe moduliert. Die Proben befinden sich in einem Durchflusskryostaten, der mit Flüssighelium gekühlt wird. Das PL Signal wird mit einem 1 m Monochromator (Jobin Yvon THR1000) spektral analysiert. Das spektral aufgelöste Signal wird mit einem Ge Detektor (Northcoast EO-817L) aufgenommen, der mit Flüssigstickstoff auf 77K gekühlt wird. Das modulierte Detektorsignal wird mit einem Lock-In Verstärker demoduliert und zum Auslesen über die PC-Software SPECTRAMAX digitalisiert. Mit diesem Aufbau wird typischerweise bei einer Temperatur von 8-10 K gemessen, der Messbereich ist im Infraroten durch den Ge Detektor auf Energien  $\geq 0,75 \text{ eV}$  beschränkt.

Der zweite Aufbau benutzt Fourier-Transformations-Infrarot-Spektroskopie (FTIR) und ermöglicht Messungen unterhalb von 0,75 eV. Dort wird ein Argonlaser mit 10mW Ausgangsleistung benutzt. Die Proben befinden sich in einem Helium-Kryostaten, der auf 1,4 K gekühlt werden kann. Das PL Signal wird mit einem Fouriertransformspektrometer (Bruker Equinox 55) und einem mit Flüssigstickstoff gekühlten InSb Detektor aufgenommen und mit einem PC ausgelesen.

### **2.5.6 Weitere experimentelle Methoden: Transport, Röntgenmessungen und Ramanspektroskopie**

Einige Proben, die im Laufe dieser Arbeit gewachsen wurden, sind noch mit anderen Methoden vermessen worden. Zu nennen sind Transportmessungen [94, 95, 96] an Intra- und Interbandtunneldioden, die selbstorganisierte Inseln enthalten. Weiterhin wurden Röntgenbeugungsexperimente [97] und Ramanmessungen [98] an den Inseln durchgeführt. Die mit diesen Messmethoden gemessenen Ergebnisse stimmen, soweit sie vergleichbare Informationen liefern, gut mit den hier vorgestellten Ergebnissen überein.



## Kapitel 3

# Interdiffusion bei hohen Wachstumstemperaturen: Dome Inseln

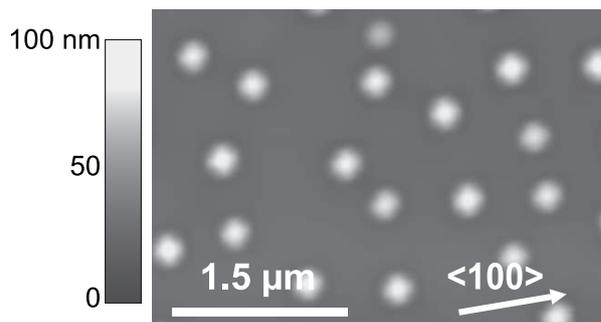
Im Folgenden werden Dome Inseln untersucht, die bei einer Substrattemperatur zwischen  $660^{\circ}\text{C}$  und  $850^{\circ}\text{C}$  gewachsen wurden. Die Inseln wurden gewachsen, indem reines Germanium auf Si abgeschieden wurde. Beim Wachstum wurden hohe Substrattemperaturen zusammen mit einer niedrigen Ge-Wachstumsrate gewählt, um eine möglichst homogene Verteilung der Inselgrößen zu erreichen. Die so produzierten Inseln stellen, soweit dies möglich ist, einen Gleichgewichtszustand dar und sind nur wenig durch kinetische Beschränkungen während des Wachstums beeinflusst.

In Abschnitt 3.1 werden Inseln, die bei  $850^{\circ}\text{C}$  gewachsen wurden, detailliert untersucht. Es wird gezeigt, dass die Inseln stark mit Si vermischt sind und beim Wachstum durch die Bildung von Gräben Si aus dem umliegenden Substrat in die Inseln transportiert wird [99, 100]. Abschnitt 3.2 zeigt, dass sich dieser Wachstumsmechanismus auf alle in Kapitel 3 untersuchten Wachstumstemperaturen verallgemeinern lässt. Außerdem wird ein Wachstumsmodell für Inseln erläutert, die Versetzungen gebildet haben.

### 3.1 Experimente zum Inselwachstum bei einer Substrattemperatur von $850^{\circ}\text{C}$

Innerhalb dieser Messreihe wurde die beste Homogenität der Inseln bei einer Substrattemperatur von  $850^{\circ}\text{C}$  erreicht. Die strukturellen Parameter dieser Inseln werden in diesem Abschnitt analysiert und die sich daraus ergebenden Rückschlüsse zu ihrer Entstehung werden diskutiert.

Die Wachstumsprozedur der in diesem Abschnitt gewachsenen Inseln war dabei wie folgt: Zunächst wurde eine Si Pufferschicht von 150 nm gewachsen. Danach wurden 6 Monolagen reinen Germaniums mit einer Rate von  $0,011\text{ nm/s}$  auf Si abgeschieden, die zur Bildung von Inseln führten. Die erste Inselnschicht, die für Photolumines-

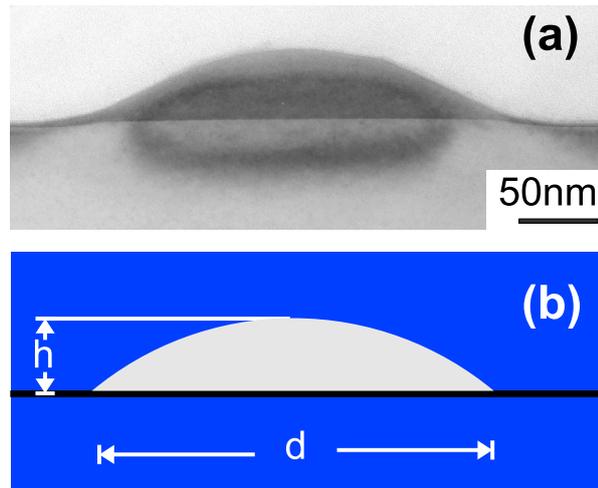


**Abbildung 3.1:** AFM-Aufnahme von Dome Inseln, die bei einer Substrattemperatur von  $850^{\circ}\text{C}$  gewachsen wurden.

zenzexperimente gedacht war, wurde mit 150 nm Si überwachsen. Zum Schluss wurde eine zweite, nominell identische Inselnschicht an der Oberfläche gewachsen, die für strukturelle Messungen genutzt wurde.

### 3.1.1 Rasterkraftmikroskopie: Abschätzung des Vermischungszustands

Abbildung 3.1 zeigt eine typische AFM-Aufnahme der Probenoberfläche, auf der zu erkennen ist, dass die Dome Inseln eine recht homogene Größenverteilung zeigen. Die Auswertung der AFM-Aufnahme ergibt, dass die Domes im Durchschnitt einen Durchmesser von 300 nm, eine Höhe von 45 nm und eine Dichte von  $1,8 \times 10^8 \text{cm}^{-2}$  haben. Diese Werte werden durch Vergleich mit TEM-Aufnahmen bestätigt (Abb. 3.2(a)). Aufgrund des großen Inseldurchmessers ist es nicht notwendig, die endliche Größe der AFM-Spitze in Betracht zu ziehen. Der Vermischungszustand der untersuchten Inseln kann durch Vergleich des in den Inseln enthaltenen Volumens mit der deponierten Ge-Menge abgeschätzt werden. Die Inseln haben annähernd die Form eines Kugelabschnitts, wie Abb. 3.2(a) zeigt. Das Volumen einer Insel ist somit  $V = \frac{1}{6}\pi h(\frac{3}{4}d^2 + h^2)$  [101], wobei  $h$  die Höhe und  $d$  den Durchmesser bezeichnet (Abb. 3.2(b)). Durch Multiplikation mit der Inseldichte erhält man das Inselvolumen pro Einheitsfläche. Dieses ist äquivalent zu einer Schichtdicke von 23 ML Si. Da aber nur 6 ML Ge abgeschieden wurden, müssen 17 ML des Inselvolumens aus Si sein, was einem durchschnittlichen Si Anteil in den Inseln von 74% entspricht. Dieser extrem hohe Si Anteil ist sehr überraschend, wenn man in Betracht zieht, dass beim Wachstum reines Ge abgeschieden wurde. Sehr ähnliche Ergebnisse wurden auch von anderen Forschungsgruppen mit anderen experimentellen Methoden erzielt [102, 103], so dass davon auszugehen ist, dass diese starke Vermischung eine grundsätzliche Eigenschaft selbstorganisierter Si-Ge Inseln ist, die bei hoher Temperatur gewachsen werden. Es ist auch einsichtig, dass das Inselwachstum einen signifikanten Einfluss auf die Oberflächenmorphologie der

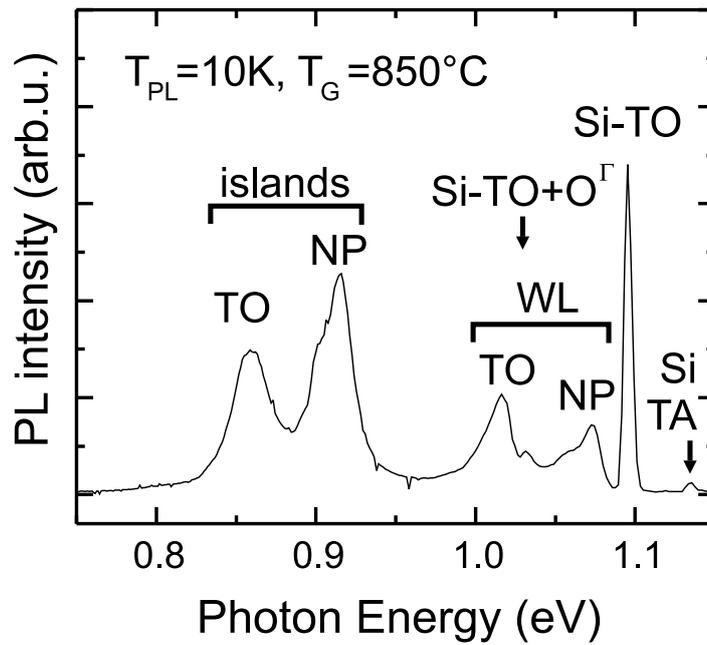


**Abbildung 3.2:** (a) Querschnitts-TEM-Aufnahme einer bei 850°C gewachsenen Dome Insel. Zur Volumenberechnung wurden die Inseln, wie in (b) skizziert, als Kugelabschnitte angenähert.

Si-Oberfläche haben muss, da das Volumen, das insgesamt in die Inseln transportiert wird, einer Schichtdicke von 2,3 nm Si entspricht.

#### 3.1.2 Photolumineszenz

Photolumineszenzspektren von Dome Inseln zeigen typischerweise neben der von den Inseln verursachten Lumineszenz auch Lumineszenzlinien, die der Benetzungsschicht zugeordnet werden. Dies ist auch bei den hier untersuchten Proben der Fall. Das Photolumineszenzspektrum einer Probe, die bei 850°C gewachsen wurde, ist in Abb. 3.3 aufgezeichnet. Abgesehen von den Linien des Si-Substrats sind vier breite Maxima im PL-Spektrum erkennbar. Die beiden Maxima oberhalb von 1 eV werden der Lumineszenz aus der Benetzungsschicht zugeordnet. Die Differenz der beiden Maxima entspricht ungefähr der Energie des impulserhaltenden  $TO_{Si-Si}$  Phonons (58 meV [104]) in einer Si-reichen SiGe Schicht. Die Insellumineszenz ist auch in zwei Maxima aufgespalten. Der Vergleich mit TEM-Aufnahmen (Abb. 3.5(a), s. Seite 51) zeigt, dass überwachsene Inseln sehr breit und flach sind. Da die Breite groß gegen den Exzitonradius in SiGe ( $\sim 5$  nm) ist, können die Inseln als Quantentopf ohne laterale Lokalisierung betrachtet werden. Das energetisch niedrigere Maximum bei 859 meV wird daher als TO-phononenassistierter Übergang in den Inseln und das höhere Maximum bei 916 meV als no-phonon (NP) Linie identifiziert. Eine einfache Abschätzung zeigt, dass die Inseln stark mit Si vermischt sein müssen. Die PL Energie ist in erster Näherung gegeben durch die Differenz zwischen der Leitungsbandkante im Si und der Energie des tiefsten HH-Zustands in einem SiGe Quantentopf, der mit Si Barrieren eingeschlossen ist. Die Dicke des Quantentopfs entspricht der Höhe der vergrabenen



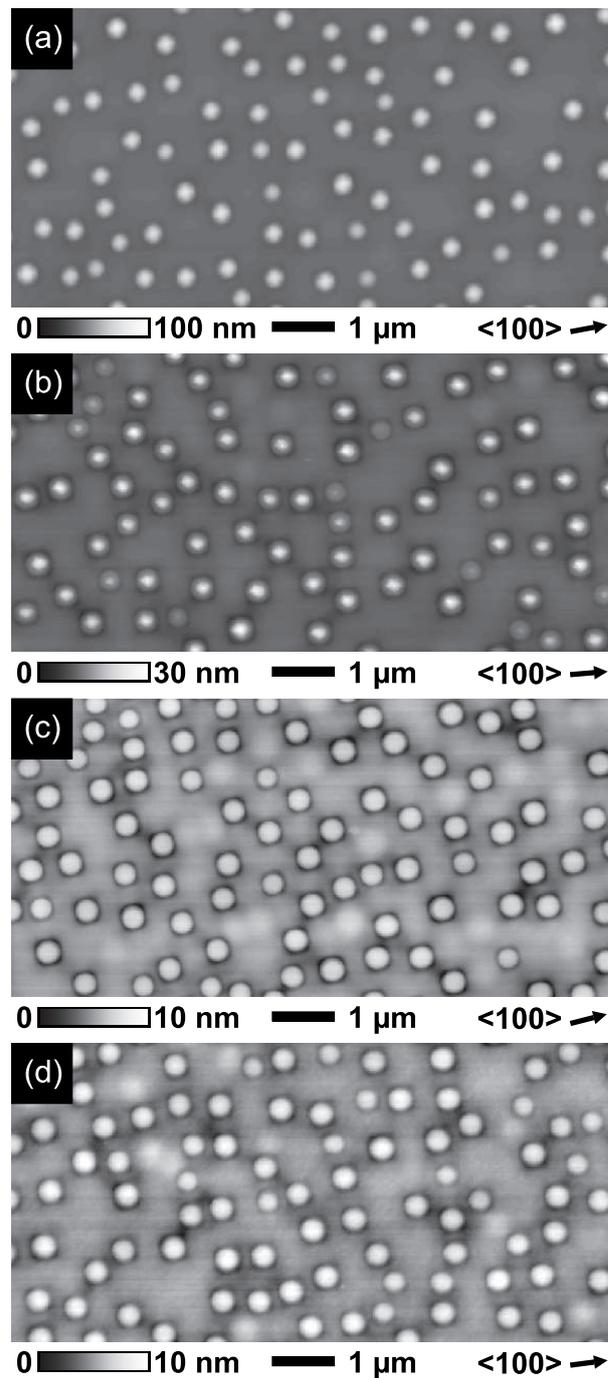
**Abbildung 3.3:** PL Spektrum einer Probe mit Dome Inseln, die bei  $850^\circ C$  gewachsen und mit Si überwachsen wurden.

Inseln. Für eine einfache Abschätzung ist es ausreichend, wenn man die Dicke mit 10 nm ansetzt, da die Lokalisierungsenergie für Topfdicken dieser Größenordnung nur im Bereich weniger meV liegt. Die PL-Energie eines Quantentopfs dieser Dicke aus purem Ge müsste bei 350 meV liegen, die beobachtete PL Energie kann nur durch Annahme eines Si Gehalts von mehr als 66% in den Inseln erklärt werden.

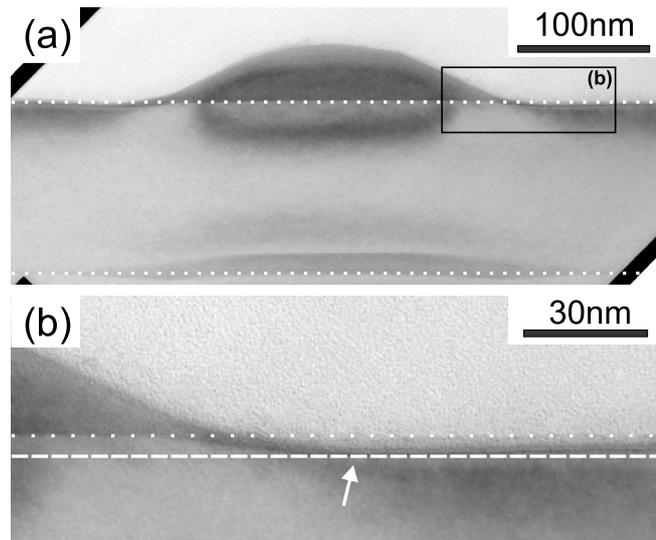
Im vorigen Abschnitt wurde gezeigt, dass die freistehenden Inseln einen durchschnittlichen Si Gehalt von 74% enthalten. Der mittels PL bestimmte Si Gehalt weicht davon deutlich ab, da die obige, einfache Auswertung der PL Messungen an Dome Inseln nur eine sehr ungenaue Abschätzung für den Ge Gehalt in den Inseln liefern kann. TEM Messungen an Dome Inseln, die bei 700°C gewachsen wurden, haben eine inhomogene Vermischung innerhalb der Inseln [105,106] gezeigt. Ein solches inhomogenes Konzentrationsprofil wurde auch in überwachsenen Inseln gefunden [19] und ist folglich auch in den hier untersuchten Proben zu erwarten. Für die PL bedeutet dies, dass die Ladungsträger hauptsächlich in dem Bereich lokalisiert sein werden, in dem die Ge Konzentration am höchsten ist. Die PL Energie wird dann dadurch bestimmt, wie groß dieser Kernbereich ist und wie hoch die Germanium-Konzentration dort ist. Ein Rückschluss auf den durchschnittlichen Ge Gehalt im Gesamtvolumen der Insel ist also nur sehr eingeschränkt möglich. Die AFM und PL Ergebnisse sind aber insofern konsistent, als sie zeigen, dass die durch Deposition von purem Ge gewachsenen Inseln zum überwiegenden Teil aus Si bestehen.

#### 3.1.3 Grabenbildung um Inseln, die bei 850°C gewachsen wurden

In diesem Abschnitt werden Ätzexperimente an Inseln vorgestellt, die bei 850°C gewachsen wurden. Die Proben wurden mit einer Lösung aus 1 HF : 2 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> : 3 CH<sub>3</sub>COOH geätzt, die hochgradig selektiv SiGe ätzt. Das selektive nasschemische Ätzen der mit Inseln dekorierten Probenoberfläche erlaubt es, die unter den Inseln liegende Si Oberfläche freizulegen und die zwischen den Inseln liegende Si Oberfläche einfacher zu vermessen. Eine Untersuchung der Si-Oberfläche kann zeigen, woher das Si in den Inseln stammt, und somit helfen, die während des Wachstums wichtigen Diffusionsphänomene zu identifizieren. In Abbildung 3.4(a) sind nochmals Dome Inseln direkt nach dem Wachstum dargestellt. Abbildung 3.4(b) zeigt dieselbe Oberfläche nach 30 s in der Ätzlösung, man beachte die gestreckte Farbskala. Die durchschnittliche Inselhöhe ist von 45 nm vor dem Ätzen auf 15 nm nach dem Ätzen reduziert worden. Man erkennt, dass die Inseln durch das Ätzen auch im Durchmesser kleiner geworden sind. Um die Inselreste herum werden Gräben sichtbar, welche ungefähr den Durchmesser der ursprünglichen Inseln nachzeichnen. Nach einer Ätzzeit von 2 Min. ist alles SiGe Material entfernt und die Si Oberfläche freigelegt. Anstelle der Inseln sind nun runde Erhebungen in der Si Oberfläche sichtbar, die vorher die Grenzfläche zwischen SiGe und Si bildeten und die von Gräben umgeben sind [107, 108, 109]. In Abbildung 3.4(c) ist nun die genaue Form der Gräben deutlich erkennbar. Die Gräben sind in den <110> Kristallrichtungen breiter als in den <100> Kristallrichtungen, wodurch sich eine quadratische Form mit Seitenrändern parallel zu den <100> Kristall-



**Abbildung 3.4:** AFM-Bilder einer bei 850°C gewachsenen Probe mit Dome Inseln (a) direkt nach dem Wachstum, (b) nach einer Ätzeit von 30 s, (c) nach einer Ätzeit von 1 Min., (d) nach einer Ätzeit von 80 Min.



**Abbildung 3.5:** Querschnitts-TEM-Aufnahme von bei 850°C gewachsenen Döme Inseln. (a) TEM-Aufnahme einer freistehenden und einer mit 100 nm Si überwachsenen Insel (am unteren Bildrand). (b) Vergrößerung des in (a) markierten Ausschnitts, der zeigt, dass die Grenzfläche zwischen Si und Insel (gepunktete Linie) über dem Substratniveau liegt. Der weiße Pfeil markiert das Minimum des Grabens, der die Insel umgibt.

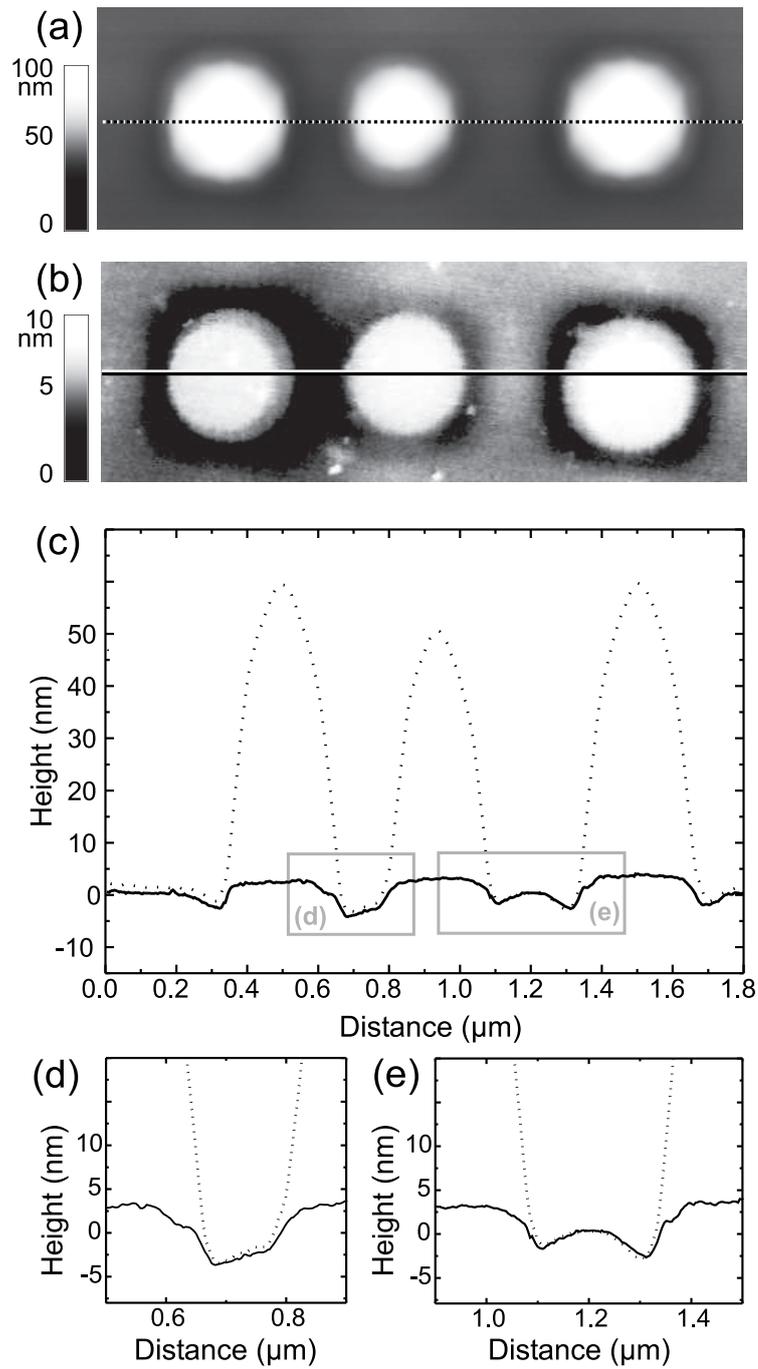
richtungen ergibt. Längeres Ätzen ändert die Oberflächenmorphologie kaum noch, da reines Si von der Ätzlösung nur mit einer Rate von  $\sim 0,1$  nm/s geätzt wird. In Abbildung 3.4(d) ist die Oberfläche nach einer Ätzzeit von 80 Min. dargestellt. Die Oberflächenrauigkeit in dieser Probe ist höher als die in Abbildung 3.4(c) und das gesamte Bild wirkt verwaschener. Es sind aber keine qualitativen Unterschiede in der Oberflächenbeschaffenheit zu erkennen.

Zwei wichtige Beobachtungen, die mit Hilfe der Ätzmethode gemacht wurden, können durch TEM-Aufnahmen direkt bestätigt werden. Abbildung 3.5(a) zeigt ein Querschnitts-TEM entlang der  $\langle 110 \rangle$  Kristallrichtung. Im unteren Teil der Aufnahme ist die vergrabene Insel zu erkennen, die für PL-Messungen benutzt wurde. Die vergrabene Insel ist viel flacher als die freistehende Insel, sie hat nur eine Höhe von etwa 16 nm. Diese Form ist verursacht durch eine Umlagerung des Ge und gleichzeitige Vermischung mit Si während des Überwachsens [61, 64, 65]. Die Inseln sind in vertikaler Richtung angeordnet [69, 72, 110], ansonsten hat die vergrabene Insel keinen Einfluss auf die Oberflächenmorphologie, da die Oberfläche vor dem Wachstum der zweiten Inselnschicht planar ist, wie mit Referenzproben bestätigt wurde. Abbildung 3.5(b) zeigt den Randbereich um die freistehende Insel, der vergrößerte Bereich ist in Abbildung 3.5(a) mit einem schwarzen Rahmen markiert. In der Vergrößerung wird deutlich, dass die Grenzfläche zwischen Si und der Insel (markiert durch eine

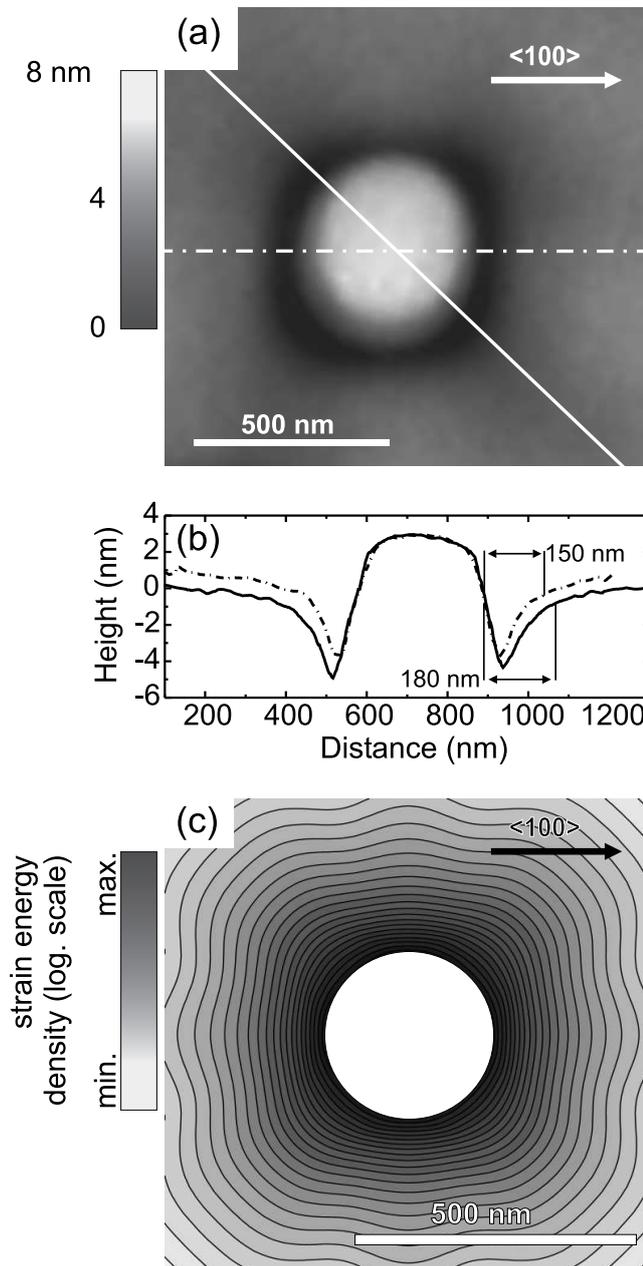
gepunktete Linie) höher liegt als die Si Oberfläche weit weg von der Insel [56]. Außerdem ist zu erkennen, dass der niedrigste Punkt der Oberfläche (gestrichelte Linie, das Minimum ist mit einem Pfeil markiert) nahe bei der Insel liegt, die Insel also von einem Graben umgeben ist. Es könnte sein, dass der Ätzvorgang die beobachtete Form der Gräben beeinflusst und die dargestellte Oberfläche somit nicht genau die Si Oberfläche nach dem Inselwachstum widerspiegelt. Dass dies nicht so ist, wird im Folgenden durch einen direkten Vergleich zwischen der Oberflächenmorphologie vor und nach dem Ätzen verifiziert. Hierzu wurde eine Probe mit einem kleinen Kratzer markiert und die Oberfläche etwas entfernt vom Kratzer im AFM gemessen. Dabei wurden einige Inseln, die zufällig in markanter Weise angeordnet waren, als Fixpunkte festgelegt. Nach dem Ätzen wurde durch Vergleich der Verteilung der Gräben mit der Inselverteilung vor dem Ätzen die gleiche Stelle an der Oberfläche identifiziert. Die in Abbildung 3.6 gezeigten Bilder sind auf diese Weise von exakt derselben Stelle vor und nach dem Ätzen aufgenommen worden. Die AFM-Aufnahme vor dem Ätzen (Abb. 3.6(a)) zeigt drei Inseln, der Abstand zwischen der mittleren und der linken Insel ist kleiner als der zwischen der mittleren und der rechten Insel. Die Aufnahme nach 2 Min. Ätzzeit ist in Abb. 3.6(b) gezeigt. Abbildung 3.6(c) zeigt Oberflächenprofile vor dem Ätzen (gestrichelte Linie) und nach dem Ätzen (durchgezogene Linie) entlang der in Abb.3.6(a) und (b) eingezeichneten Linien. Außerhalb des Bereichs, der von den Inseln bedeckt wird, stimmen die Oberflächenprofile exakt überein. Damit ist gezeigt, dass die Si Oberfläche durch den Ätzvorgang nicht wesentlich beeinflusst wird. Die Bereiche zwischen den Inseln sind in Abb. 3.6(d) und (e) vergrößert dargestellt. Während die Gräben in Abb. 3.6(e) durch ein klares Maximum in der Mitte getrennt sind, ist eine Unterscheidung der Gräben der einzelnen Inseln in 3.6(d) nicht möglich.

### 3.1.4 Modell zur Grabenbildung kurzreichweitiger Gräben um einzelne Inseln

Wie in vorigen Abschnitt gezeigt, sind die um selbstorganisierte Dome Inseln herum gebildeten Gräben stark anisotrop, obwohl die Inseln selbst eine fast kreisförmige Basis haben. Dies wird anhand eines repräsentativen Grabens in Abb. 3.7 genauer diskutiert. Der gezeigte Graben stammt von einer Insel, die bei 850°C gewachsen wurde. Abb. 3.7(a) zeigt eine AFM-Aufnahme, durch die zwei Schnittlinien gelegt wurden, die in Abb. 3.7(b) gezeichnet sind. Die durchgezogene Linie verläuft entlang einer  $\langle 110 \rangle$  Kristallrichtung und man erkennt, dass die Grabenbreite in dieser Richtung etwa 180 nm beträgt. Entlang der  $\langle 100 \rangle$  Kristallrichtung hat der Graben nur eine Ausdehnung von 150 nm, wie der mit einer gestrichelten Linie gezeichnete Schnitt zeigt. Gemessen wurde die Breite des Grabens von der Stelle aus, deren Höhe in der Mitte zwischen maximaler Höhe des Plateaus und maximaler Grabentiefe liegt. Eine statistische Auswertung zeigt, dass es sich hierbei um ein generelles Phänomen handelt, das beim Wachstum von Dome Inseln bei verschiedenen Temperaturen auftritt (vgl. Abschnitt 3.2).



**Abbildung 3.6:** AFM-Bilder von drei in einer Linie angeordneten Inseln (a) vor dem Ätzen, (b) nach dem Ätzen. (c) Querschnittsprofile entlang der in (a) und (b) eingezeichneten Linien. Die Ausschnitte (d, e) zeigen, dass die Substratoberfläche zwischen den Inseln vor und nach dem Ätzen exakt gleich ist.



**Abbildung 3.7:** (a) AFM-Bild eines einzelnen Stumpfs, der nach dem Ätzen einer Dome Insel zurückgeblieben ist. (b) Querschnittsprofile entlang einer  $\langle 110 \rangle$  Kristallrichtung (durchgezogene Linie) und entlang einer  $\langle 100 \rangle$  Kristallrichtung (gestrichelte Linie). (c) Berechnetes Verspannungsprofil im Si in der Umgebung der unteren Grenzfläche einer als Kugelabschnitt angenäherten SiGe Insel.

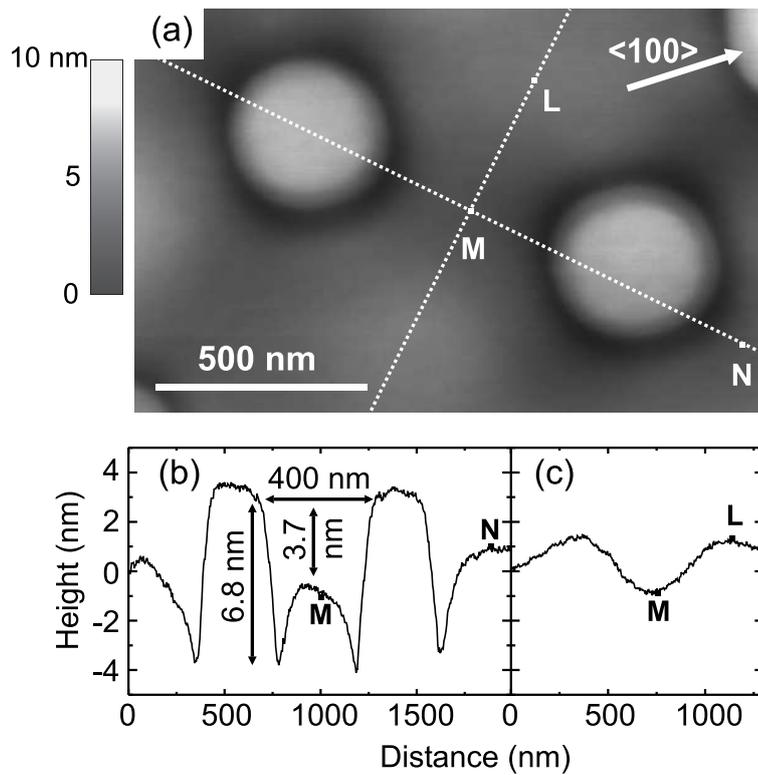
Dies wirft natürlich die Frage nach der Ursache für diese Anisotropie der Grabenbreite auf. Die erste mögliche Erklärung beruht darauf, dass die Gräben entstehen, um die Verspannung um eine selbstorganisierte Insel zu verringern [108,111]. Der Bereich um die Außenkanten einer Insel ist hochgradig verspannt [18, 112] und die Atome in diesem Bereich können durch Diffusion aus diesem Bereich heraus die Verspannung effektiv verkleinern. Aufgrund der Anisotropie der elastischen Eigenschaften des kubischen SiGe Kristalls wird das Verspannungsfeld selbst für eine Insel mit kreisförmiger Basisfläche eine vierzählige Symmetrie aufweisen. Dies soll anhand von Abb. 3.7(c) illustriert werden. Hier wurde die Verspannungsenergiegedichte um eine in einer Si Matrix eingeschlossene Ge Insel aufgezeichnet. Gezeigt ist ein Schnitt parallel zur Grundfläche der Insel, die Verspannung in der Insel selbst wurde nicht berechnet, die Grundfläche ist daher in weiß dargestellt. Die Form der Insel wurde als Kugelabschnitt angenähert und das Verspannungsfeld durch Integration des Greenschen Tensors für anisotrope elastische Kontinua über das Inselvolumen [34] berechnet. Die Linien gleicher Energiedichte haben in einigem Abstand von der Insel fast quadratische Form. Entlang der  $\langle 100 \rangle$  Kristallachsen ist das Verspannungsfeld weniger weit ausgedehnt als in den  $\langle 110 \rangle$  Richtungen. Diese Übereinstimmung mit der beobachteten Form der Gräben führt zu dem Schluss, dass die Grabenbreite durch verspannungsinduzierte Diffusion verursacht sein könnte und die Breite der Gräben die Verteilung der Verspannungsenergie widerspiegelt.

Eine weitere mögliche Interpretation der Grabenform ist, dass die Inseln zuerst als Pyramiden entstanden sind und sich erst später in Dome Inseln umgewandelt haben. Bei einer Pyramide ist ein quadratischer Graben selbstverständlich zu erwarten. TEM [21] und STM Untersuchungen zeigen, dass die Umwandlung von Pyramiden zu Domes über die Bildung abgerundeter Kanten an den Pyramidenecken beginnt. Die beobachteten Domes könnten also aus Pyramiden entstanden sein, deren Ecken in die Ecken der Gräben hineingereicht haben. Nach dem Umwandlungsprozess können die Domes aufgrund ihres höheren Aspektverhältnisses weiteres Material aufnehmen ohne ihre Grundfläche wesentlich zu vergrößern. Gegen diese Interpretation spricht allerdings, dass in der untersuchten Probe auch bei großflächigen AFM-Aufnahmen keine Pyramiden zu finden sind. Bei höheren Wachstumsraten sind allerdings Pyramiden beobachtet worden, so dass nicht ausgeschlossen werden kann, dass die Pyramiden als metastabile Strukturen auch in der vorliegenden Probe während des Wachstums vorhanden waren.

#### 3.1.5 Täler zwischen benachbarten Inseln

Abgesehen von den Gräben um einzelne Inseln sind in der bei 850°C gewachsenen Probe auch Täler zwischen benachbarten Inseln zu erkennen.

Ein Beispiel für ein solches Tal ist in Abb. 3.8 gezeigt. In der AFM-Aufnahme (Abb. 3.8(a)) ist zu erkennen, dass zwischen den Inseln auf dieser Aufnahme Gräben verlaufen. Die Tiefe dieser Gräben ist auf der Verbindungslinie zwischen den Inselmitelpunkten maximal; auf dem Bild sind die Verbindungen zwischen den Inseln daher



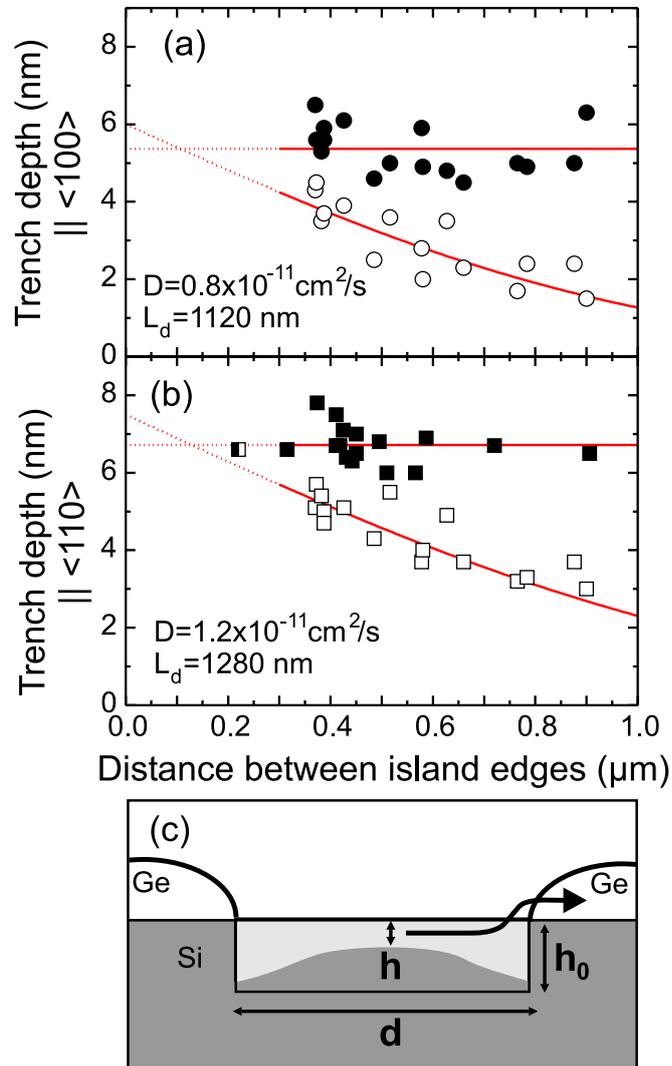
**Abbildung 3.8:** (a) AFM Bild zweier nahe beieinander liegender Gräben, die durch ein Tal verbunden sind, das in der AFM-Aufnahme als leicht dunklere Verbindungslinie sichtbar ist. Die Höhenprofile (b) und (c) zeigen ebenfalls deutlich die Absenkung zwischen den Gräben.

abgedunkelt. Durch die AFM-Aufnahme wurden zwei senkrechte Schnitte gelegt, die in Abb. 3.8(a) als gepunktete Linien eingezeichnet sind. Der in Abb. 3.8(b) gezeigte Schnitt verläuft ungefähr durch die Mittelpunkte der beiden Inseln. Die Inselkanten haben eine Entfernung von 400 nm. Zwischen dem Plateaumaximum und der größten Grabentiefe liegt ein Höhenunterschied von 6.8 nm. An der mit M markierten Stelle in der Mitte zwischen beiden Inseln ist das Oberflächenniveau 3.7 nm tiefer als das Plateau. Dagegen liegt die mit N markierte Stelle deutlich höher. Entlang der Linie sind in dieser Richtung außerhalb des Bildbereichs erst in größerem Abstand Inseln zu finden. Das zwischen den beiden Inseln entstandene Tal wird noch deutlicher im Schnitt, der durch die Punkte L und M verläuft und in Abb. 3.8(c) gezeigt ist. Hier ist zu sehen, dass der Punkt M weit tiefer liegt als der Rest des Schnittprofils. Dass das Höhenprofil zum linken Rand hin und rechts von Punkt L abfällt, liegt an den Inseln, die in den Ecken der AFM-Aufnahme teilweise zu sehen sind. Eine genaue Betrachtung großflächiger AFM-Aufnahmen zeigt, dass die Oberfläche komplett von Gräben durchzogen ist (Abb. 3.4(c) und (d), siehe S. 50).

Wie gezeigt wurde, sind die Inseln hochgradig mit Si vermischt und dieses Si stammt aus den Bereichen zwischen den Inseln. Da es vernünftig ist anzunehmen, dass das Si aus der Substratoberfläche in der unmittelbaren Umgebung der Inseln stammt, ist es klar, dass es bei eng benachbarten Inseln zu einer Konkurrenz um das eindiffundierende Si kommt. Mithilfe dieser Annahme kann die beobachtete Tiefe der Täler in einem einfachen Diffusionsmodell beschrieben werden.

In Abb. 3.9(a) sind die Tiefen Abhängigkeit vom Abstand zur nächsten Insel aufgetragen. Bei der Auswertung wurden nur Inseln berücksichtigt, die parallel zu den  $\langle 100 \rangle$  Kristallrichtungen angeordnet waren. Die Messwerte für die maximale Grabentiefe sind mit ausgefüllten Symbolen gezeichnet, die weißen Symbole zeigen die Absenkung des Substratniveaus genau in der Mitte zwischen zwei Inseln an. Während die maximale Grabentiefe keine Korrelation mit dem Abstand aufweist, liegt der Mittelpunkt zwischen zwei Inseln umso tiefer, je enger die Inseln beieinander liegen. Dies ist in Abb. 3.9(b) für die  $\langle 110 \rangle$  Richtung gezeichnet, auch hier ergibt sich derselbe Trend, nur dass die absoluten Werte der Grabentiefe in dieser Richtung höher sind. Für Inselabstände unter 300 nm überlappen die kurzreichweitigen Gräben so stark, dass nicht mehr von einem Tal zwischen den beiden Inseln gesprochen werden kann. Wie in Abbildung 3.4 zu sehen, existieren kaum Inseln, die einen so geringen Abstand haben. Das einzige gemessene Inselpaar mit einem Abstand unter 300 nm ist in Abbildung 3.9(b) als gemischtes schwarz/weißes Symbol eingetragen.

Die Diffusion wird mit einem 1D Modell beschrieben. Betrachtet wird eine Si Schicht der Höhe  $h_0$ , deren Höhe  $h'$  durch die Eindiffusion des Si in die Inseln abnimmt. Die Abnahme der Si Schichthöhe korrespondiert in diesem Modell mit einer Konzentrationsabnahme in einer dünnen Schicht, die zwischen zwei unendlichen Halbräumen eingeschlossen ist und in diese hineindiffundiert. Die Inseln fungieren als Senken, in die das Si hineindiffundiert und entsprechen den Halbräumen. Die Dicke  $d$  der dünnen Schicht ist gegeben durch den Abstand zwischen den Inseln. Die Lösung der FICKschen Diffusionsgleichung für eine endliche Schicht der Dicke  $d$  ist:



**Abbildung 3.9:** Maximale Tiefe der kurzreichweitigen Gräben (gefüllte Symbole) und der langreichweitigen Täler (offene Symbole) als Funktion des Abstands zwischen den Inselkanten, gemessen (a) parallel zu den  $<100>$  Richtungen und (b) parallel zu den  $<110>$  Richtungen. (c) Skizze eines Modells, das die Abnahme der Tiefe der langreichweitigen Täler mit zunehmendem Abstand beschreibt.

$$h' = \frac{h_0}{2} \left( \operatorname{erf} \left( \frac{d+x}{2(Dt)^{1/2}} \right) + \operatorname{erf} \left( \frac{d-x}{2(Dt)^{1/2}} \right) \right).$$

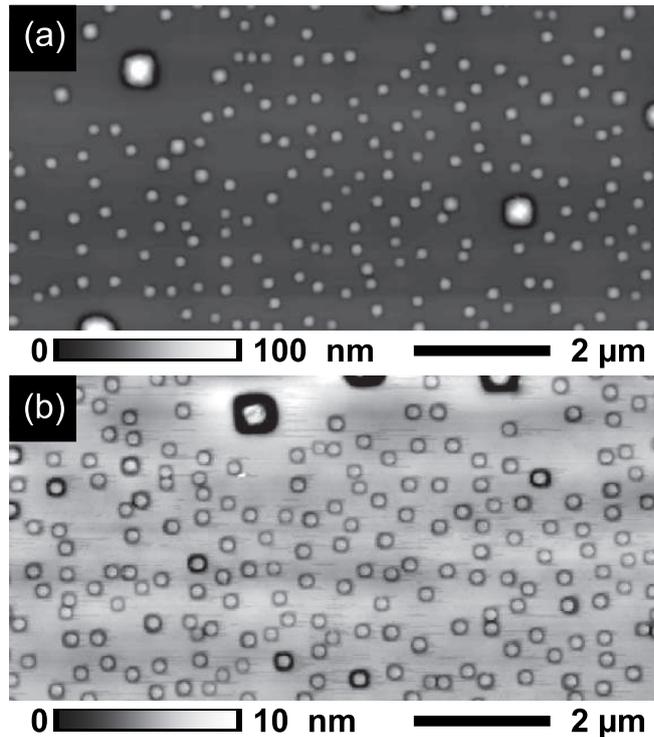
In den Messdaten wurde nur der Punkt in der Mitte zwischen den Inseln betrachtet. Für den betrachteten Punkt bei  $x = 0$  reduziert sich die Gleichung zu:

$$h' = h_0 \operatorname{erf} \left( \frac{d}{2(Dt)^{1/2}} \right).$$

Die in Abbildung 3.9(c) eingezeichnete Strecke  $h$  hat die Länge  $h_0 - h'$ , die letztendlich benutzte Formel lautet daher wegen  $\operatorname{erfc} = 1 - \operatorname{erf}$ :

$$h = h_0 \operatorname{erfc} \left( \frac{d}{2(Dt)^{1/2}} \right).$$

In dieser Formel wird  $d$ , die Distanz zwischen benachbarten Inseln, als Variable betrachtet. Gegeben ist die Zeit  $t = 400$  s, die zur Deposition der Inseln benötigt wird.  $D$  ist der gesuchte Diffusionskoeffizient. Die durch die weißen Symbole gezeichneten Linien sind Fits, die mit diesem Modell berechnet wurden. Der Parameter  $h_0$  gibt die maximale Dicke der Si Schicht an, die an dem Diffusionsprozess beteiligt sein kann. Eine sinnvolle Wahl für diesen Parameter wäre die maximale Grabtiefe um einzelne Inseln, da das Silizium bis zu dieser Tiefe mit Sicherheit an der Diffusion beteiligt ist. Um die Rechnung nicht durch zu viele Annahmen einzuschränken, wurde  $h_0$  aber als freier Parameter betrachtet. Es zeigt sich, dass der durch Kurvenanpassung berechnete Parameter  $h_0$  vergleichbar mit der beobachteten maximalen Grabtiefe ist. Dies bestätigt, dass ein enger Zusammenhang zwischen den Gräben um die einzelnen Inseln und der Absenkung des Substrats weit weg von den Inseln besteht. Für Inseln, die entlang der  $\langle 100 \rangle$  Kristallrichtungen angeordnet sind, wurde ein Diffusionskoeffizient  $D$  von  $0,8 \times 10^{-11} \text{ cm}^2/\text{s}$  und eine Diffusionslänge  $L_d = 2\sqrt{Dt}$  von 1120 nm berechnet. Für Inseln, die in  $\langle 110 \rangle$  Richtungen angeordnet sind, ist der Diffusionskoeffizient erheblich höher, nämlich  $D = 1,2 \times 10^{-11} \text{ cm}^2/\text{s}$  und  $L_d = 1380$  nm. Diese Diffusionskoeffizienten sind mehrere Größenordnungen kleiner als die bekannten Diffusionskoeffizienten für Si Diffusion auf atomar glatten Oberflächen [113]. Dies ist nicht erstaunlich, da die Si Oberfläche in den hier untersuchten Proben nicht atomar glatt ist. Die Höhenunterschiede auf der Si Oberfläche zwischen den Inseln lagen hier bei mehr als 2 nm. Die große Zahl atomarer Stufen kann mit großer Wahrscheinlichkeit als Ursache für die hier gefundenen Diffusionslängen gelten. Der Unterschied der Diffusionslängen in den  $\langle 100 \rangle$  und  $\langle 110 \rangle$  Kristallrichtungen lässt sich wahrscheinlich auf dieselben Gründe zurückführen, die auch zur Bildung der kurzreichweitigen, anisotropen Gräben führen. Es ist interessant anzumerken, dass die Diffusionslängen von 1380 nm und 1120 nm vergleichbar mit dem mittleren Inselabstand von 730 nm sind, der sich aus der Inseldichte und dem Inseldurchmesser errechnen lässt.



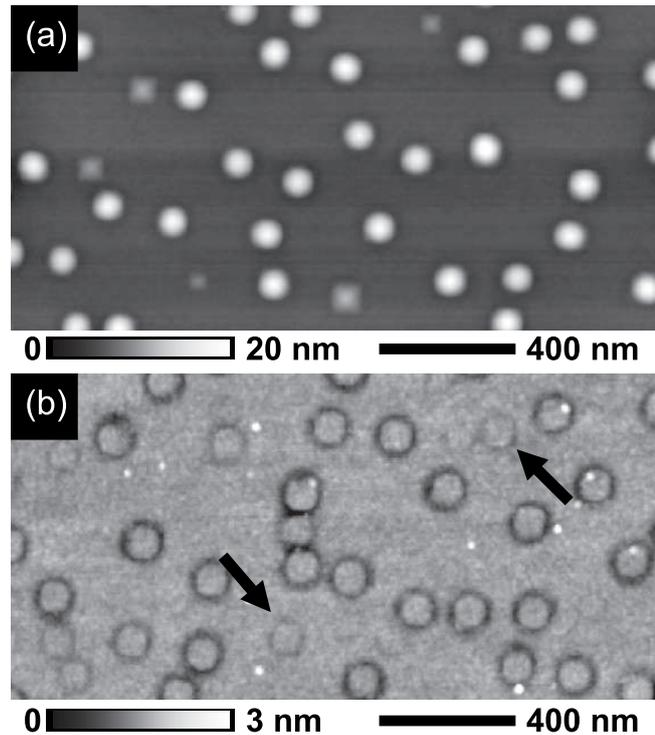
**Abbildung 3.10:** AFM Bilder von Proben mit bei 750°C gewachsenen Dome Inseln (a) vor dem Ätzen und (b) nach dem Ätzen.

## 3.2 Wachstumstemperaturen von 660°C-800°C

Die bei 850°C Wachstumstemperatur beobachtete Grabenbildung lässt sich auch bei niedrigeren Wachstumstemperaturen nachweisen. Allerdings wird die Auswertung durch das Auftreten von versetzten Superdomes und, bei 660°C Wachstumstemperatur, von Pyramiden erschwert. Die folgenden Abschnitte zeigen die Skalierungseigenschaften der Inseln und der umgebenden Gräben als Funktion der Wachstumstemperatur. Der Zusammenhang mit der Vermischung der Inseln wird diskutiert.

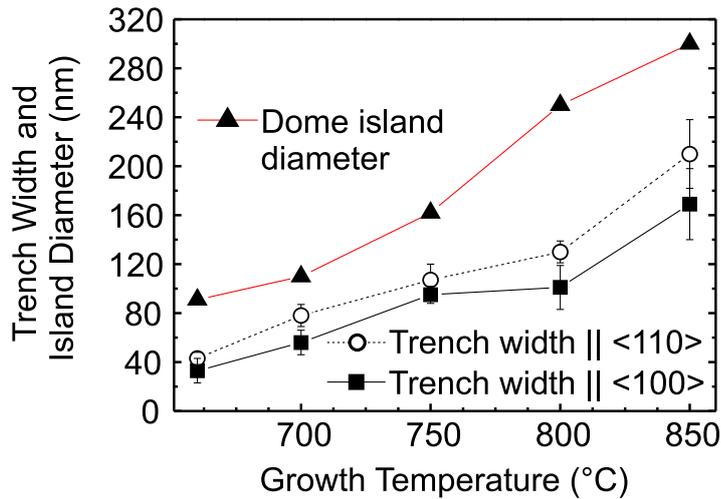
### 3.2.1 Grabenbildung um versetzungsfreie Inseln

In Abb. 3.10 sind AFM-Aufnahmen von einer Probe dargestellt, die bei einer Substrattemperatur von 750°C gewachsen wurde. Abbildung 3.10(a) zeigt die Probenoberfläche vor dem Ätzen. Die Oberfläche ist größtenteils bedeckt von Dome Inseln mit einem durchschnittlichen Durchmesser von 160 nm. Außerdem sind vereinzelte Inseln mit Durchmessern von mehreren hundert Nanometern zu erkennen. Aus TEM Messungen ist bekannt, dass diese sogenannten Superdomes grundsätzlich Versetzungen enthalten [114]. Da in diesen Inseln die elastischen Verspannungen geringer sind als in



**Abbildung 3.11:** (a) AFM Bild von bei 660°C gewachsenen Inseln, das eine bimodale Verteilung von Dome und Pyramid Inseln zeigt. (b) Nach dem Ätzen sind tiefe Gräben sichtbar, die den Dome Inseln zugeordnet werden. Die mit weißen Pfeilen markierten, flachen Gräben werden den Pyramiden zugeordnet.

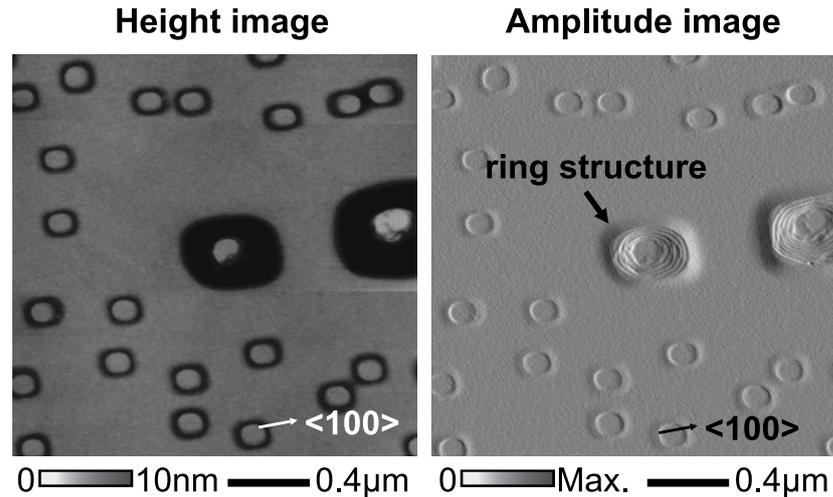
den kohärenten Inseln, sind sie bessere Senken für Ge und erreichen daher ein wesentlich größeres Volumen als die nicht versetzten Inseln. Um die einzelnen Superdome herum sind deutlich Bereiche zu erkennen, in denen keine kohärente Insel zu finden ist. Dies kann dadurch erklärt werden, dass das chemische Potential einer versetzten Insel geringer ist als das einer Insel ohne Versetzungen [115]. Nach Bildung einer Versetzung kommt es zu OSTWALD-Reifung können, das heißt, die Superdome können auf Kosten benachbarter Inseln Ge Material ansammeln. Nach dem Ätzen zeigt die Oberfläche in Abb. 3.10(b) die auch bei 850°C gefundenen Gräben, die sich um die kohärenten Inseln herum gebildet haben. Auch hier sind die Gräben leicht in den  $\langle 100 \rangle$  Richtungen elongiert. Um die inkohärenten Superdome herum sind wesentlich größere Gräben zu erkennen als um die Dome Inseln. Während die durchschnittliche Tiefe der Gräben um die kohärenten Inseln etwa 2 nm ist, haben die Gräben um die größten versetzten Inseln eine Tiefe von mehr als 15 nm. Bei einer Wachstumstemperatur von 660°C wird, wie in Abb. 3.11 zu sehen ist, eine bimodale Inselverteilung beobachtet. Neben den Dome Inseln sind in Abb. 3.11(a) auch Pyramiden zu sehen. Nach dem Ätzen zeigen sich in Abb. 3.11(b) deutlich die runden Gräben um die Dome Inseln.



**Abbildung 3.12:** Durchschnittswerte für Inseldurchmesser (Dreiecke), Grabenbreite parallel zu den  $\langle 110 \rangle$  Kristallrichtungen (Kreise) und Grabenbreite parallel zu den  $\langle 100 \rangle$  Kristallrichtungen (Quadrate) als Funktion der Temperatur.

Gräben mit eckigen inneren Kanten, die den Pyramiden zugeordnet werden könnten, sind nicht eindeutig zu erkennen. Im Bild sind aber mehrere schwach ausgebildete Gräben zu sehen. Zwei dieser Gräben sind in Abb. 3.11(b) mit Pfeilen markiert. Die Dichte der flachen Gräben ist vergleichbar mit der Pyramiddichte und daher werden diese Gräben als von Pyramiden verursacht angesehen. Für diese Interpretation spricht auch folgende Betrachtung: Der Berührungswinkel von Pyramiden mit der Oberfläche ist kleiner als der von Dome Inseln, und die Verspannungsenergie am Rand einer Insel nimmt mit dem Berührungswinkel an der Inselkante zu [108]. Bei kleineren Berührungswinkeln ist daher die treibende Kraft für die Grabenbildung geringer und die Grabentiefe sollte daher kleiner sein.

In Abb. 3.12 sind die Messergebnisse der gezeigten Probenserie im Temperaturbereich von  $660^\circ\text{C}$  bis  $850^\circ\text{C}$  zusammengefasst. Bei der Auswertung wurden nur kohärente Dome-Inseln betrachtet. Die Durchmesser der Dome Inseln sind im Diagramm mit Dreiecken gezeichnet, der Durchmesser erhöht sich mit steigender Wachstumstemperatur stetig von  $90\text{ nm}$  bei  $660^\circ\text{C}$  bis  $300\text{ nm}$  bei  $850^\circ\text{C}$ . Da die Inseln bei höheren Temperaturen signifikant mit Si vermischt sind [116, 117, 62], wurde dieser Anstieg der Inseldurchmesser mit einer zunehmenden Vermischung der Inseln mit Si korreliert [118]. Die Breite der Gräben, welche die Inseln umgeben, steigt ebenfalls stetig an. Grabenbreiten parallel zu den  $\langle 110 \rangle$  Richtungen sind im Diagramm als Kreise dargestellt, parallel zu  $\langle 100 \rangle$  sind die Grabenbreiten als Quadrate gezeichnet. Während die Gräben bei  $660^\circ\text{C}$  in den  $\langle 110 \rangle$  Richtungen durchschnittlich eine Breite von etwa  $40\text{ nm}$  haben, ist die Grabenbreite bei  $850^\circ\text{C}$   $210\text{ nm}$ . Die Grabenbreite parallel zu den  $\langle 100 \rangle$  Richtungen ist bei allen Temperaturen zwischen 10% und 25% kleiner.



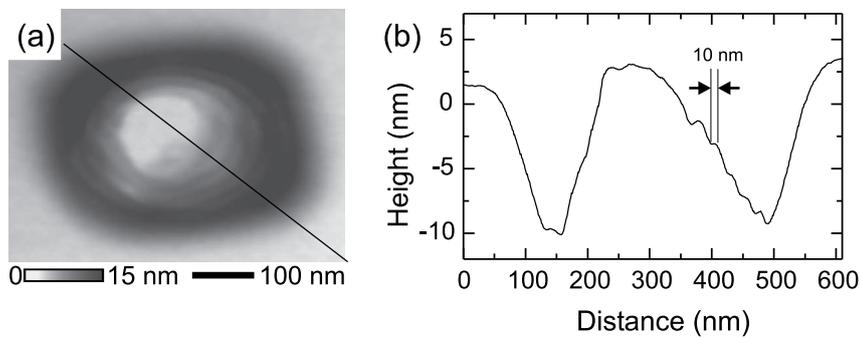
**Abbildung 3.13:** AFM-Aufnahme versetzter Inseln. Links ist die Höheninformation und rechts die Amplitude des Messsignals aufgezeichnet.

### 3.2.2 Gräben bei Inseln mit Versetzungen

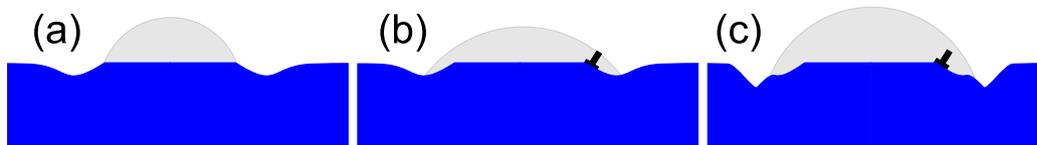
Eine genauere Untersuchung der nach dem Ätzen sichtbaren Gräben um versetzte Inseln zeigt, dass diese Gräben eine interessante Struktur besitzen. In [Abbildung 3.13](#) wird diese Struktur besonders deutlich im rechten Teil der Abbildung, in der die Amplitude des Messsignals im “Tapping Mode” gezeigt wird. Die Amplitude hat in glatten Bereichen der Probe einen mittleren Wert, während sie an Kanten, je nach Vorzeichen der Steigung an dieser Stelle, größer bzw. kleiner wird. Dadurch werden Stufen in der Probe hervorgehoben und man erkennt, dass die Gräben in den versetzten Proben eine Ringstruktur ausbilden. Der innerste Ring hat in etwa die Größe des inneren Bereichs bei nicht versetzten Inseln, um diesen innersten Ring herum sind mehrere, mehr oder weniger kreisförmige, konzentrische Ringe erkennbar. Durch die großen Höhenunterschiede in der Probe sind diese Ringe im linken Bild, das die Höheninformation zeigt, weniger gut zu sehen.

Die Gräben um versetzte Inseln lassen Rückschlüsse auf die Entstehung der Inseln zu. [Abbildung 3.14](#) zeigt den Graben um eine einzelne versetzte Insel. In [Abb. 3.14\(b\)](#) ist das in [Abb. 3.14\(a\)](#) eingezeichnete Höhenprofil dargestellt. Im Höhenprofil sind mehrere Stufen zu erkennen, die Breite einer Stufe liegt typischerweise im Bereich von 10 nm. Wobei natürlich zu beachten ist, dass die Stufen eine recht unregelmäßige Form haben, wie auch in [Abb. 3.13](#) zu erkennen ist.

Ein Wachstumsmodell zur Entstehung dieser Stufen ist in [Abb. 3.15](#) skizziert. In [Abb. 3.15\(a\)](#) ist eine Dome Insel gezeigt, die einen Graben gebildet hat. Diese Insel hat keine Versetzung und ein hohes Aspektverhältnis. Die großen Berührungswinkel an den Kanten der Insel sorgen für eine starke Verspannung an dieser Stelle und behindern die weitere Anlagerung von SiGe Material an dieser Stelle. Nach Bildung einer



**Abbildung 3.14:** (a) AFM-Aufnahme des Grabens unter einer versetzten Insel und (b) Höhenprofil entlang der in (a) eingezeichneten schwarzen Linie.



**Abbildung 3.15:** Modell zur Entstehung der Ringstruktur. (a) Seitenansicht einer Insel vor dem Einbau einer Versetzung, (b) unmittelbar nach Nukleation einer Versetzung und (c) längere Zeit, nachdem die Versetzung gebildet wurde.

Versetzung ist die Verspannung an den Kanten reduziert und weitere Materialanlagerung sorgt für ein rapides Wachstum der Insel in die Breite, wie in Abb. 3.15(b) gezeigt wird. Durch die schnelle Ausdehnung des Durchmessers begräbt die Insel einen Teil des Grabens unter sich. Wie in Abb. 3.12 gezeigt wurde, nimmt die Grabenbreite mit zunehmender Inselgröße zu, so dass beim weiteren Wachstum der Insel sich ein entsprechend größerer Graben bilden wird. Wie in den vorherigen Abschnitten diskutiert, ist die Interdiffusion an der Si/SiGe Grenzfläche vernachlässigbar klein gegen Oberflächendifusionsprozesse, so dass unterhalb der Insel die Oberflächenmorphologie vor Bildung der Versetzung konserviert wird. Der tiefere Graben um die versetzte Insel in Abb. 3.15(c) führt nun dazu, dass die Si Oberfläche eine Stufe ausbildet. Weitere Versetzungen führen dann jeweils wieder zu weiteren Stufen, die dann letztendlich das Muster auf der Si Oberfläche bilden, das nach dem Ätzen der Inseln beobachtet wird.

Dieses Wachstumsmodell basiert auf der Annahme, dass die Inseln nach Einbau einer Versetzung sehr schnell in die Breite wachsen. Genau dies wurde bei in-situ TEM Untersuchungen beobachtet [119, 120, 121]. Dort wurden Dome Inseln mit sehr geringer Rate gewachsen. Mittels Video-Aufnahmen wurde gezeigt, dass Dome Inseln nach Bildung einer Versetzung in wenigen Sekunden ihren Durchmesser um 20 nm erhöhten, während sie vorher für Zeiträume im Bereich von 30 Minuten nicht messbar gewachsen waren. Da bei diesen Experimenten kontinuierlich Material deponiert wurde, wurde angenommen, dass die Inseln zwischen den Phasen des Breitenwachstums in die Höhe wachsen, was im TEM experimentell nicht nachweisbar war. Die Breite einzelner Stufen in den geätzten Proben ist vergleichbar mit der Zunahme in der Breite, die bei den TEM Untersuchungen gefunden wurde. Der Wachstumsmodus wurde als "zyklisches Wachstum" bezeichnet. Auch bei den in dieser Arbeit geätzten Proben drängt sich der Vergleich mit Jahresringen geradezu auf. Die Erklärung für die Ringstruktur ist also, dass ein solches zyklisches Wachstum, nur um Größenordnungen schneller, auch in den hier vorgestellten Proben stattgefunden hat.

### 3.3 Zusammenfassung dieses Kapitels

In diesem Kapitel wurde die Interdiffusion in stark mit Si vermischten Dome Inseln untersucht. Es wurde gezeigt, dass die Inseln bei einer Wachstumstemperatur von 850°C nur noch einen Ge Gehalt von etwa 25% haben. Das eindiffundierende Si gelangt über Oberflächendifusion aus dem umliegenden Substrat in die Inseln. Dies lässt sich aus einer signifikanten Absenkung des Substratniveaus gegenüber der Si/SiGe Grenzfläche unter der Insel schließen.

Weiterhin führt die Eindiffusion von Si zur Bildung von Gräben um die Inseln. Das Si in der unmittelbaren Umgebung einer Insel ist stark verspannt und die Bildung von kurzreichweitigen Gräben ist ein effektiver Mechanismus zur Verspannungsreduktion. Die Größe der Gräben skaliert mit der Größe der Inseln und nimmt für kohärente Inseln mit sinkender Wachstumstemperatur ab. Zwischen benachbarten Inseln werden langreichweitige Täler beobachtet, die sich bilden, weil die Inseln um das eindiffun-

dierende Si konkurrieren. Bei Inseln mit Versetzungen werden besonders tiefe Gräben mit ringförmigen Strukturen beobachtet. Diese Ringstrukturen lassen sich durch eine abrupte Zunahme der Inselbreite nach Bildung einer neuen Versetzung erklären.

# Kapitel 4

## Interdiffusion bei mittleren Temperaturen: Koexistenz von Domes und Pyramiden

In diesem Kapitel wird die Interdiffusion in Inseln untersucht, die im Temperaturbereich von 520°C bis 620°C gewachsen wurden. In diesem Bereich ist im SiGe System ein Übergang zwischen verschiedenen Inselformen zu beobachten. Oberhalb von 560°C wachsen Domes und Pyramiden, unterhalb dieser Temperatur werden hauptsächlich Hut Cluster beobachtet. In Abschnitt 4.1 wird die Vermischung der Inseln nahe der Übergangstemperatur untersucht. In Abschnitt 4.2 wird das Vermischungsprofil in pyramidenförmigen Inseln gezeigt und ein Modell vorgeschlagen, um den Vermischungsmechanismus in diesen Inseln zu klären. Es zeigt sich, dass die Entstehung des Vermischungsprofils in diesen Inseln nicht verspannungsgetrieben sein kann. Das Profil lässt sich mit einem einfachen Modell erklären, das die Vermischung während des Wachstums simuliert.

### 4.1 Der Übergang von der Koexistenz von Domes und Pyramiden zu Hut Cluster Inseln

In diesem Abschnitt wird die Vermischung von Dome Inseln, Pyramiden und Hut Clustern untersucht. Durch nasschemisches Ätzen wird gezeigt, dass freistehende Domes und Pyramiden mit Si vermischt sind, während bei Hut Clustern keine Vermischung nachgewiesen werden kann. Dazu wird in Abschnitt 4.1.1 zunächst die Vermischung von Inseln untersucht, die direkt nach dem Wachstum abgekühlt wurden; im folgenden Abschnitt wird dem Einfluss eines Temperschnitts nachgegangen. In allen Proben wurden nach Wachstum eines Si Puffers 6 ML Ge bei einer Rate von 0,008 nm/s abgeschieden.

### 4.1.1 Vermischungszustand freistehender Inseln

Abbildung 4.1 zeigt Ge Inseln, die bei Temperaturen von 520°C bis 580°C gewachsen wurden. Bei Temperaturen unter 550°C sind ausschließlich Hut Cluster Inseln mit Kanten entlang der  $\langle 100 \rangle$  Richtungen zu sehen. Die bei 520°C gewachsenen Hut Cluster (Abb. 4.1(a)) sind kleiner als die bei höherer Temperatur gewachsenen Inseln (Abb. 4.1(c)), die Inselgröße nimmt mit der Temperatur also zu.

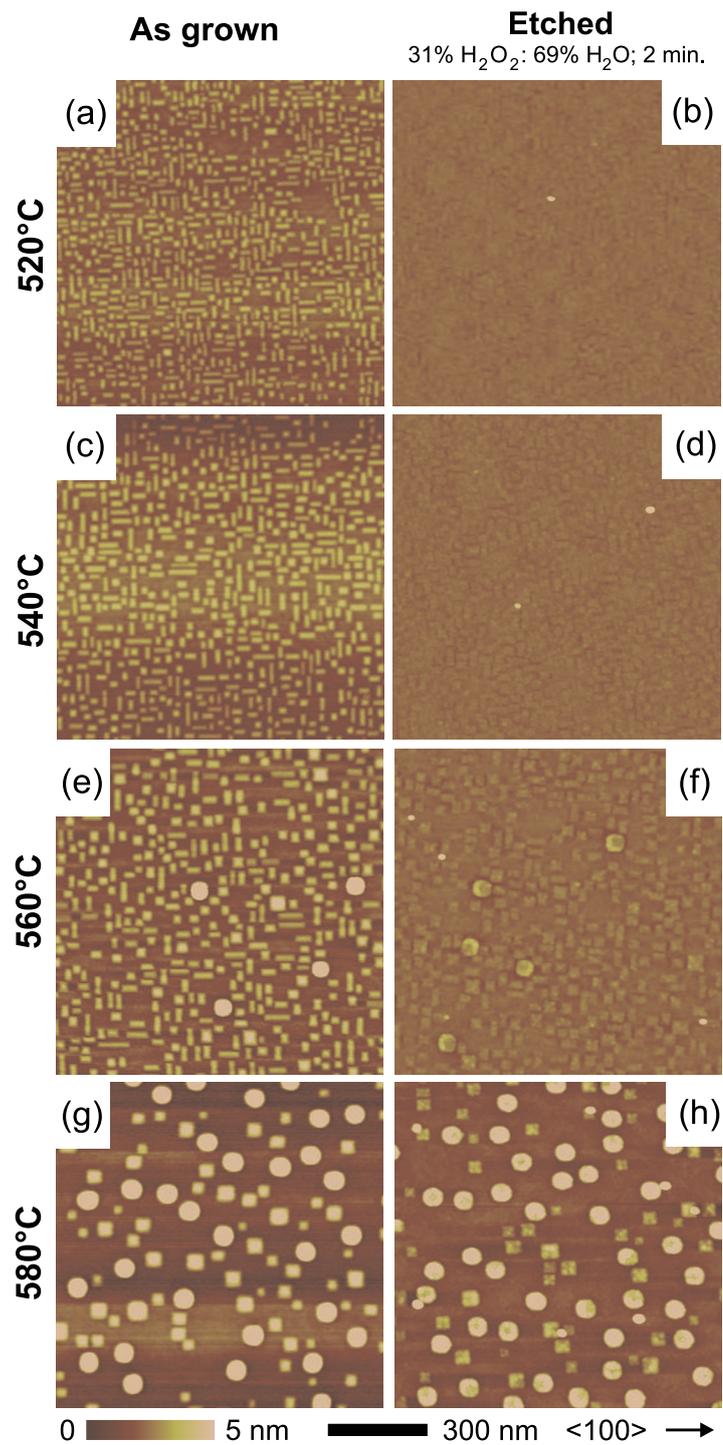
Um die Vermischung in diesen Inseln zu untersuchen, wurden die Proben in Wasserstoffperoxid geätzt. Wasserstoffperoxid ätzt  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  Legierungen mit  $x \geq 65\%$ . Nach dem Ätzen sind alle Inseln, die bei 520°C und 540°C gewachsen wurden, verschwunden (Abb. 4.1(b) und (d)). Dies zeigt, dass der Ge Gehalt bei diesen Temperaturen in der gesamten Insel größer als 65% ist. In den Abbildungen ist eine Feinstruktur erkennbar, die darauf hindeuten könnte, dass bei diesen Temperaturen schon eine gewisse Vermischung stattgefunden hat. Die Vermischung ist aber noch nicht stark genug, so dass keine erkennbaren Inselreste zurückbleiben.

Ein ganz anderes Bild zeigt sich in der Versuchsreihe, in der die Inseln bei Temperaturen zwischen 560°C und 620°C gewachsen wurden (Abb. 4.1(e)-(h) und Abb. 4.2). Hier sind in allen Bildern Dome Inseln zu sehen. In Abb. 4.1(e) koexistieren sie mit Hut Cluster Inseln, während in Abb. 4.1(g) und Abb. 4.2(a) eine bimodale Verteilung von Domes und Pyramiden zu sehen ist. Abb. 4.2(b) zeigt eine monomodale Verteilung mit ausschließlich Dome Inseln.

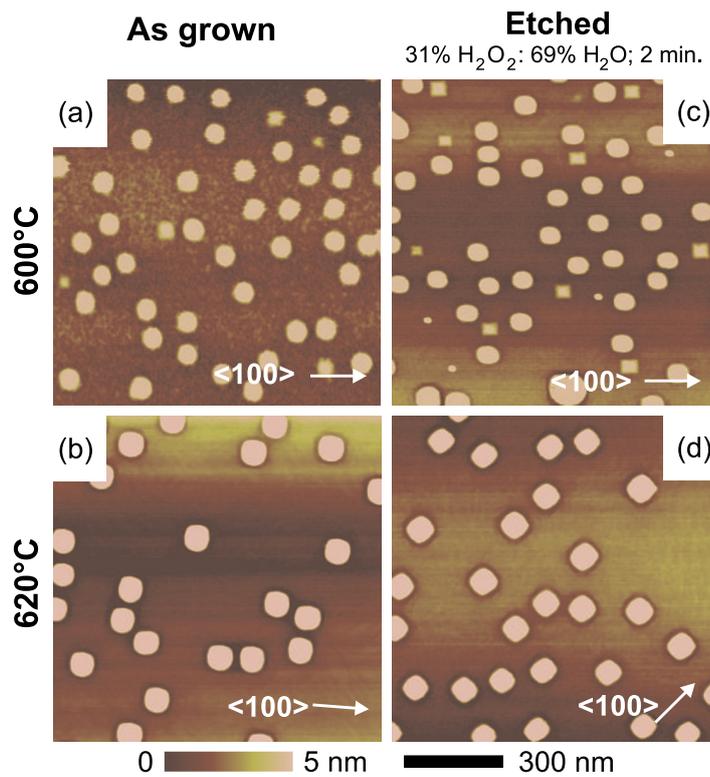
Das Ätzen in Wasserstoffperoxid zeigt, dass die Inseln alle signifikant mit Si vermischt sind. Von allen Inseln sind nach dem Ätzen Reste zu sehen, die darauf hinweisen, dass die Inseln an dieser Stelle mit mehr als 35% Si vermischt waren. Während die Reste der langgezogenen Hut-Cluster in Abb. 4.1(f) kaum eine Struktur zeigen, sind bei den Resten der Dome Inseln deutliche Ringstrukturen zu sehen. Dies weist darauf hin, dass die Si Vermischung in den Domes größtenteils am Rand stattfand. Die meisten Ringe sind nicht perfekt, sondern zu einer Seite hin abgeflacht. Diese recht große Inhomogenität der Strukturen scheint auf zufällige Fluktuationen während des Wachstums zurückzuführen sein, da keine besondere Regelmäßigkeit zu erkennen ist. Dieselben grundsätzlichen Merkmale sind in Abb. 4.1(h) zu erkennen. Auch hier werden die Dome Inseln durch das Ätzen angegriffen und haben nachher eine unsymmetrische Form. Allerdings ist durch die höhere Wachstumstemperatur die Si Vermischung stärker und die Ätzlösung hat nur noch einen relativ geringen Effekt. In den Pyramiden ist nach dem Ätzen eine kreuzförmige Struktur zu erkennen, diese wird im Folgenden noch genauer untersucht.

Bei den beiden höchsten Wachstumstemperaturen (Abb. 4.2(c) und (d)) ist auf den ersten Blick kaum ein Unterschied zwischen den nicht geätzten und den geätzten Strukturen zu sehen. Durch Vergleich der Durchschnittshöhen der Inseln lässt sich aber zeigen, dass auch diese Proben geätzt werden. Die Durchschnittshöhe der Inseln nimmt bei 620°C von ca. 15 nm auf ungefähr 10 nm ab.

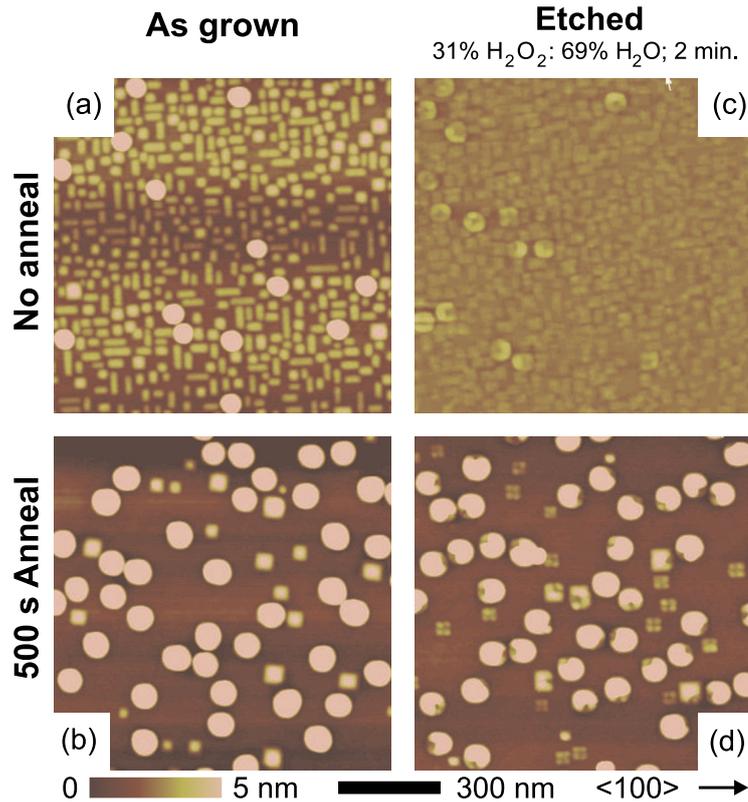
#### 4.1 Der Übergang von der Koexistenz von Domes und Pyramiden zu Hut Cluster Inseln



**Abbildung 4.1:** AFM-Aufnahmen von Ge Inseln, die bei Temperaturen zwischen 520°C und 580°C gewachsen wurden, direkt nach dem Wachstum (linke Spalte) und nach einem Ätzschritt in einer Wasserstoffperoxidlösung (rechte Spalte).



**Abbildung 4.2:** AFM-Aufnahmen von Ge Inseln, die bei Temperaturen von 600°C und 620°C gewachsen wurden. (a),(b) Direkt nach dem Wachstum und (c),(d) nach einem Ätzschritt in einer Wasserstoffperoxidlösung.



**Abbildung 4.3:** AFM-Aufnahmen von Ge Inseln, die bei 560°C gewachsen wurden, (a) direkt nach dem Wachstum, (b) nach einem in-situ Tempersschritt von 500 s, (c) nach einem Ätzschritt in Wasserstoffperoxid und (d) nach Tempern und Ätzen.

### 4.1.2 Temperversuche

Die in diesem Abschnitt vorgestellten Proben wurden bei 560°C gewachsen, der niedrigsten Temperatur, bei der Dome Inseln beobachtet wurden. Mit einem Tempersschritt, bei dem die Substrattemperatur nach dem Wachstum für 500 s auf 560°C gehalten wurde, wurde die Stabilität der Inselverteilung und die zeitliche Entwicklung der Vermischung untersucht. Die Ergebnisse sind in den AFM-Aufnahmen in Abb. 4.3 zu sehen.

Abb. 4.3(a) zeigt die Oberfläche vor einem Tempersschritt. Zu sehen sind Dome Inseln und gleichzeitig langgezogene Hut Cluster Inseln. Nach dem Tempersschritt sind die Hut Cluster komplett verschwunden, wie Abb. 4.3(b) zeigt. Stattdessen sind nur noch Pyramiden mit quadratischer Grundfläche zu sehen und die Durchschnittsgröße der Dome Inseln hat gleichzeitig zugenommen. Dies bestätigt, dass bei den hier gewählten Wachstumstemperaturen Hut Cluster instabil sind [122] und nach kurzer Temperzeit durch Pyramiden und Domes ersetzt werden, die relativ stabil sind [17].

Der Ätzschritt in Wasserstoffperoxid zeigt, dass die Komposition der Inseln durch den Tempersschritt signifikant geändert wurde. Ohne den Tempersschritt bleiben nach dem Ätzen nur sehr flache Strukturen zurück (Abb. 4.3(c)). Die Dome Inseln zeigen eine leichte Ringstruktur im Innern, während von den Hut Clustern ein mehr oder weniger strukturloser Rumpf zurückbleibt. Nach dem Tempern (Abb. 4.3(d)) sind die zurückbleibenden Strukturen völlig anders. Die Dome Inseln werden kaum noch geätzt, was damit erklärt werden kann, dass diese während des Tempersschritts stark mit Si vermischen.

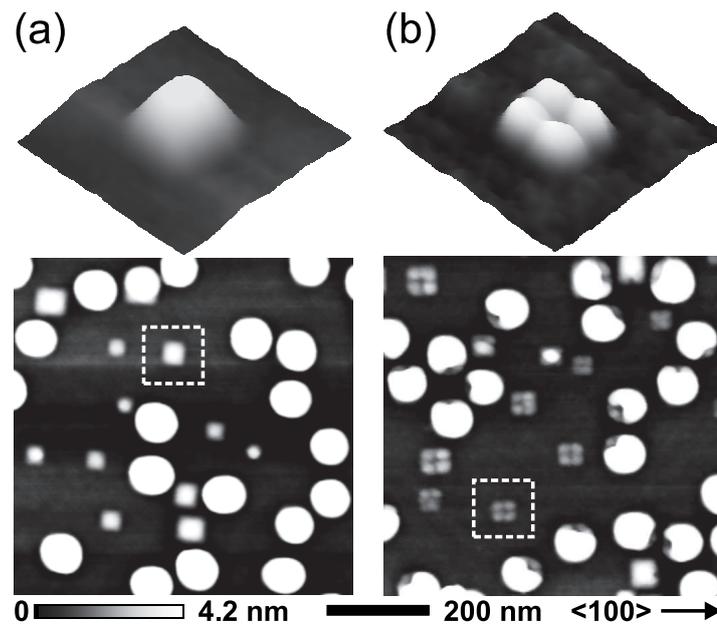
Zumeist wird in die Domes nur eine Ecke hineingeätzt. Diese lateral sehr inhomogene Vermischung ist eine Fortsetzung eines Trends, der schon vor dem Tempern zu beobachten war. Auch vor dem Tempern sind die dort beobachteten Ringstrukturen sehr inhomogen, was darauf hindeutet, dass das Si nicht gleichmäßig von allen Seiten her in die Inseln gelangt. Wahrscheinlich hat diese Inhomogenität mit dem Übergang zwischen Pyramiden und Domes zu tun. STM-Aufnahmen [123] zeigen Übergangsstrukturen zwischen Pyramiden und Domes, die zuvor schon bei Echtzeit TEM-Aufnahmen beobachtet wurden [21]. Im AFM sind diese Übergangsstrukturen kaum von Dome Inseln zu unterscheiden. Die Facettierung der Übergangsstrukturen ist nicht so symmetrisch wie bei Domes. Die Basisfläche der Pyramiden ist noch erkennbar, aber die Spitzen dieser Inseln liegen nicht in der Mitte der Basisfläche. Es ist zu erwarten, dass in diesen unsymmetrischen Übergangsstrukturen die Si Verteilung ebenfalls unsymmetrisch ist. Auch nach der vollständigen Umwandlung einer Übergangsstruktur zu einer Dome Insel bleibt die unsymmetrische Materialverteilung in der Inseln erhalten, da die Diffusion im Volumen bei der Wachstumstemperatur sehr klein ist. Die Materialverteilung in geätzten Inseln spiegelt damit den Übergangsprozess wider, den die Inseln bei der Umwandlung in Dome Inseln durchlaufen haben.

## 4.2 Lateral inhomogene Zusammensetzung in Pyramiden

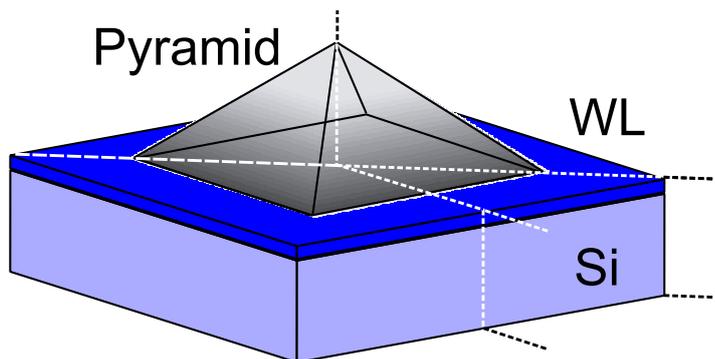
Die chemische Zusammensetzung von Pyramiden wurde mit Hilfe einer Probe genauer untersucht, die bei 560°C gewachsen wurde und selbstorganisierte Inseln aus 6 ML Ge enthält. Diese Probe wurde nach dem Wachstum für 500 s getempert. Wie in Abschnitt 4.1.2 erläutert, ist in dieser Probe eine bimodale Verteilung von Pyramiden und Domes zu beobachten.

### 4.2.1 Experimentelle Ergebnisse

Die Abbildung 4.4(a) zeigt eine AFM-Aufnahme der Probenoberfläche (unten) und eine vergrößerte dreidimensionale Darstellung einer repräsentativen Pyramide. Diese Probe wurde für zwei Minuten in Wasserstoffperoxid geätzt und nochmals gemessen. Das Ergebnis ist in Abbildung 4.4(b) zu sehen. Insbesondere fällt die Form der geätz-



**Abbildung 4.4:** AFM-Aufnahmen von Pyramid Inseln (a) direkt nach dem Wachstum und (b) nach einem zweiminütigen Ätzschritt in Wasserstoffperoxid. Die dreidimensionalen Darstellungen in der oberen Zeile stellen die in der unteren Zeile mit gestrichelten Linien umrahmten Pyramiden vergrößert dar.

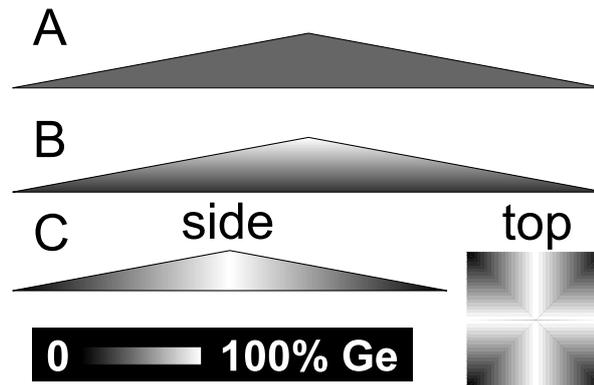


**Abbildung 4.5:** Schematische Darstellung der mittels FEM simulierten Geometrie. Es wurde die Verspannung in einem Modell berechnet, das aus einer freistehenden Pyramide, einer darunterliegenden SiGe Benetzungsschicht und einem Si Substrat besteht. Aufgrund von Symmetrieeigenschaften konnte der Berechnungsaufwand auf ein Achtel des Modells reduziert werden.

ten Pyramiden auf. Diese haben ein deutlich sichtbares Kreuz in der Mitte, das dadurch zustande kommt, dass die Mitte der Basiskanten und das Zentrum der Pyramiden stark geätzt wurde. Die dreidimensionale Vergrößerung zeigt besonders deutlich, dass von der Pyramide nach dem Ätzen vier Erhebungen zurückgeblieben sind, die den Ecken der vormaligen Pyramide entsprechen. Dieses Ergebnis deutet darauf hin, dass die Pyramidenecken stark mit Si vermischt sind, so dass die Ätzlösung in den Ecken das Material nicht entfernen kann, während der Rest der Pyramide komplett weggeätzt werden kann. Dies wirft die Frage auf, wie es zu dieser Si Anreicherung in den Ecken kommt. In Abschnitt 4.2.2 wird der Frage nachgegangen, ob die beobachtete Komposition die Verspannung der Pyramiden minimiert und somit energetische Ursachen hat. Dazu wird die Verspannung von Pyramiden mit verschiedenen Kompositionsprofilen (einschließlich des beobachteten) simuliert. Aus den Daten der Simulation werden die Verspannungsenergien für die verschiedenen Kompositionsprofile berechnet und verglichen. In Abschnitt 4.2.3 wird ein einfaches kinetisches Modell vorgestellt, mit dem die Vermischung während des Wachstums einer Pyramide simuliert werden kann. Die Ergebnisse dieser Simulation sind Kompositionsprofile, die mit den experimentellen Daten verglichen werden können.

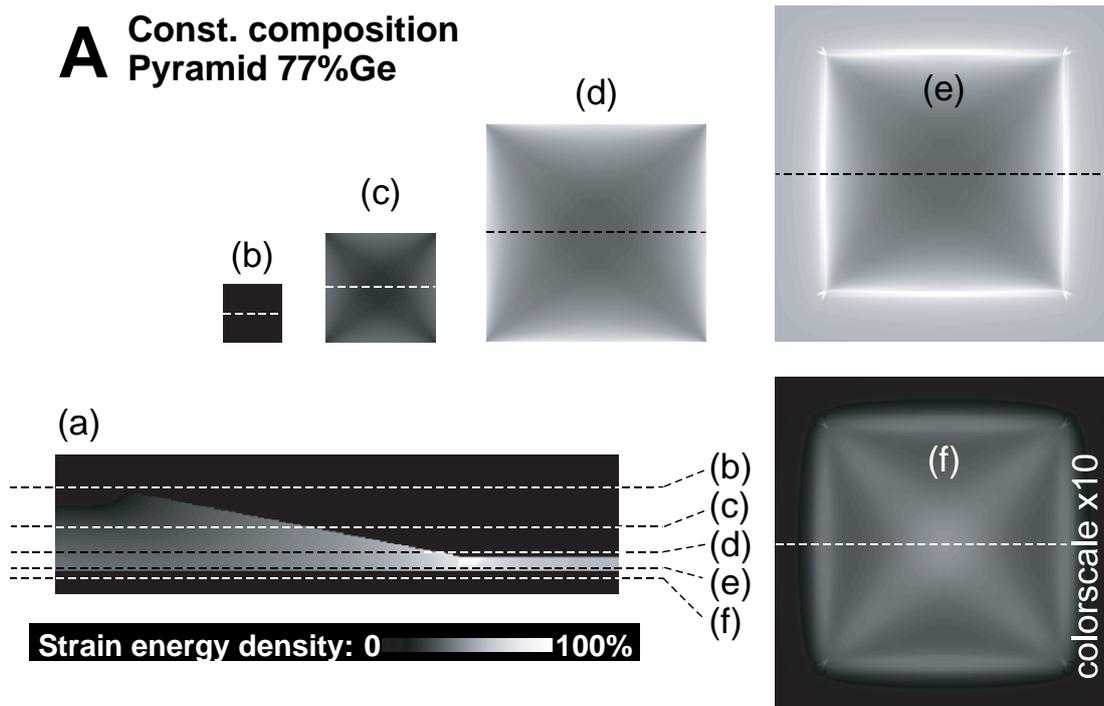
## 4.2.2 Verspannungsfeld einer freistehenden Pyramide

Zur Untersuchung der Verspannung einer mit Si vermischten Pyramide wurden FEM Rechnungen durchgeführt, in denen verschiedene 3D Profile für die Si Verteilung innerhalb der Pyramide verglichen wurden. Die Geometrie der simulierten Pyramide ist in Abb. 4.5 gezeigt. Die Pyramide hat eine Höhe von 5.6 nm und sitzt auf einer Benetzungsschicht von 1 nm Dicke. Darunter befindet sich das Si Substrat, das in der

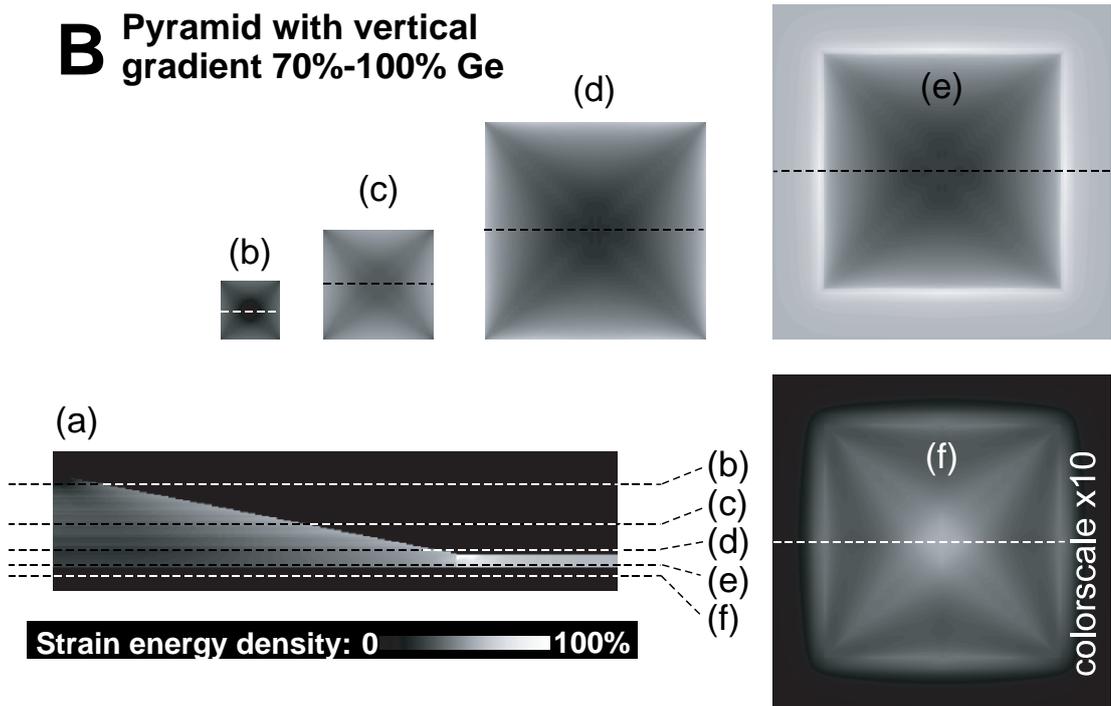


**Abbildung 4.6:** Seitenansicht dreier Vermischungsprofile innerhalb der Pyramide, für welche die resultierende Verspannung berechnet wurde. Profil A ist eine homogene Vermischung, B ein vertikaler Gradient und C ein horizontaler Gradient, bei dem der Ge Anteil zu den Ecken hin abnimmt, wie in der Aufsicht gezeigt.

FEM Rechnung wesentlich größer als in der Skizze war, damit die Randbedingungen keine Rückwirkungen auf die Verspannung der Pyramide haben. Die Randbedingungen für das Si Substrat waren, dass an der Unterseite und der Außenseite des Substrats keine Verspannungen auftreten dürfen. Für die Benetzungsschicht war die Randbedingung an den Außenseiten, dass nur rein biaxiale Verspannung erlaubt war. Aufgrund der Symmetrieeigenschaften der Struktur konnte die FEM Rechnung auf eine Achteckpyramide beschränkt werden, wie in der Skizze mit gepunkteten Linien gezeigt. Die dazu notwendige Randbedingung war die Forderung nach Spiegelsymmetrie entlang der Symmetrieachsen. Nach Beendigung der Rechnung wurden dann die übrigen Teile der Pyramide durch Spiegel- und Translationsoperationen rekonstruiert. Simuliert wurden drei verschiedene Vermischungsprofile, die in Abb. 4.6 gezeigt sind. Die gezeigte Seitenansicht ist jeweils ein diagonaler Schnitt durch die Pyramide, wie er in Abb. 4.5 durch die quer durch die Pyramide verlaufende, gestrichelte Linie angedeutet wird. In allen drei Profilen besteht die Pyramide insgesamt aus 77% Ge und 23% Si. Im Profil A wurde die Verspannung für eine Pyramide aus einer homogenen  $\text{Si}_{0,23}\text{Ge}_{0,77}$  Legierung berechnet. Im Profil B nimmt die Ge Konzentration von der Basis zur Spitze hin zu. Es wurde ein linearer, vertikaler Gradient angenommen, beginnend bei 70% Ge hinauf bis 100% Ge an der Spitze. Im Profil C schließlich wurde eine Si Anreicherung in den Ecken der Pyramiden berechnet, die Komposition ändert sich zu den Ecken hin linear von reinem Ge zu reinem Si. Dieses Kompositionsprofil ist zusätzlich zur Seitenansicht auch in der Aufsicht gezeigt. Für alle Pyramiden wurde mit FEM Simulationen die dreidimensionale Verspannungsenergiegedichte berechnet. Abbildung 4.7 zeigt Modell A, die Pyramide mit konstantem Ge Gehalt im gesamten Volumen. Dargestellt ist die Energiegedichte entlang verschiedener Schnitte. Abb. 4.7(a) zeigt einen vertikalen Schnitt durch die Mitte der Pyramide parallel zu den Basiskanten. Die Abbildungen



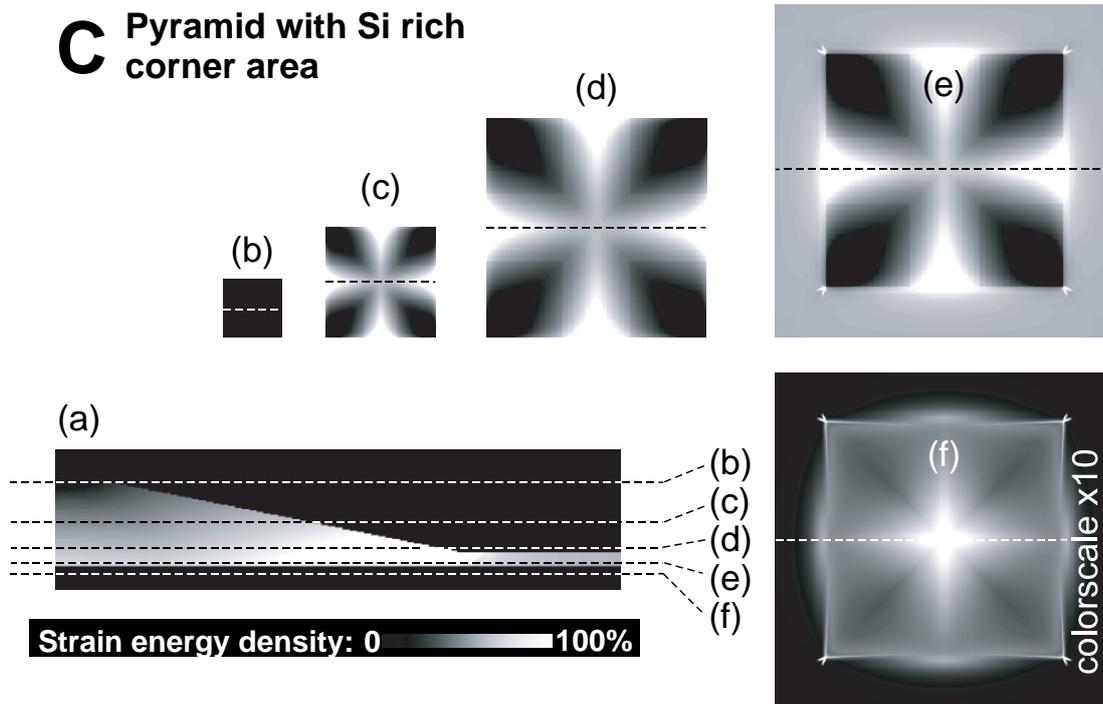
**Abbildung 4.7:** Verspannungsenergiedichte einer Pyramide mit konstantem Ge Anteil. Gezeigt sind (a) eine Seitenansicht und verschiedene dazu senkrechte Schnitte. Die Aufsichten (b)-(d) sind Schnitte durch die Pyramide, (e) ist ein Schnitt durch die Benetzungsschicht und (f) ein Schnitt durch das Si-Substrat.



**Abbildung 4.8:** Verspannungsenergiedichte einer Pyramide mit zur Spitze hin zunehmender Ge Konzentration. Gezeigt sind (a) eine Seitenansicht und verschiedene dazu senkrechte Schnitte. Die Aufsichten (b)-(d) sind Schnitte durch die Pyramide, (e) ist ein Schnitt durch die Benetzungsschicht und (f) ein Schnitt durch das Si-Substrat.

4.7(b) bis (d) zeigen horizontale Schnitte durch die Pyramide in verschiedenen Höhen. Abb. 4.7(d) schneidet die Pyramide knapp oberhalb der Oberfläche der Benetzungsschicht. Die Abb. 4.7(e) zeigt einen Schnitt durch die Benetzungsschicht unterhalb der Pyramide und Abb. 4.7(f) zeigt einen Schnitt im Si Substrat. Die vertikale Position der Schnittebenen ist in Abb. 4.7(a) skizziert. Die Spannungsfelder in Abb. 4.7(e) und (f) zeichnen sehr klar die Umrisse der Pyramide nach. Die Pyramidenspitze ist für das Modell mit konstantem Ge Gehalt der Bereich, in dem die größte Spannungsrelaxation beobachtet wird. Dies ist an der niedrigen Verspannungsenergie der Spitze in Abb. 4.7(a) und (b) zu sehen.

Abb. 4.8 zeigt die Verspannungsenergiedichte für Modell B, die Pyramide mit Ge Gradient in vertikaler Richtung. Die Verteilung der Energiedichte ist qualitativ sehr ähnlich zu Modell A. Bei genauerer Betrachtung fällt aber auf, dass die Abbildungen 4.8(d) und (e) dunkler sind, das heißt, die maximalen Werte der Energiedichte sind kleiner. Die Seitenansicht der Pyramide in Abb. 4.8(a) macht deutlich, dass die Pyramidenspitze in diesem Modell weniger relaxiert ist als im Modell A. Diese Beobachtungen sind unmittelbar plausibel: Im unteren Teil der Pyramide ist durch den hohen



**Abbildung 4.9:** Verspannungsenergiedichte einer Pyramide mit zu den Ecken hin zunehmender Si Konzentration. Gezeigt sind (a) eine Seitenansicht und verschiedene dazu senkrechte Schnitte. Die Aufsichten (b)-(d) sind Schnitte durch die Pyramide, (e) ist ein Schnitt durch die Benetzungsschicht und (f) ein Schnitt durch das Si-Substrat.

Si Gehalt die Verspannungsenergie geringer, da die Gitterfehlpassung zum Substrat reduziert ist. Dagegen ist in der Spitze die Gitterfehlpassung größer als in Modell A und die Relaxation des Materials fällt gegenüber Modell A kleiner aus.

Abb. 4.9 zeigt die Verteilung der Verspannungsenergie in Modell C, in dem eine zunehmenden Si Anreicherung zu den Ecken hin simuliert wurde. Im Vergleich zu den ersten beiden Modellen stellt sich diese Energieverteilung völlig anders dar. Die Ecken sind, wie durch den hohen Si Anteil zu erwarten, nur sehr gering verspannt. Dafür sind allerdings starke Maxima der Verspannungsenergiedichte durch die horizontale und vertikale Mittellinie der Pyramide zu erkennen. Hier besteht die Pyramide aus reinem Ge, das entsprechend stark verspannt ist. Besonders stark ist die Verspannung in den Mitten der Basiskanten, da hier das Ge keine Möglichkeit hat, elastisch zu relaxieren.

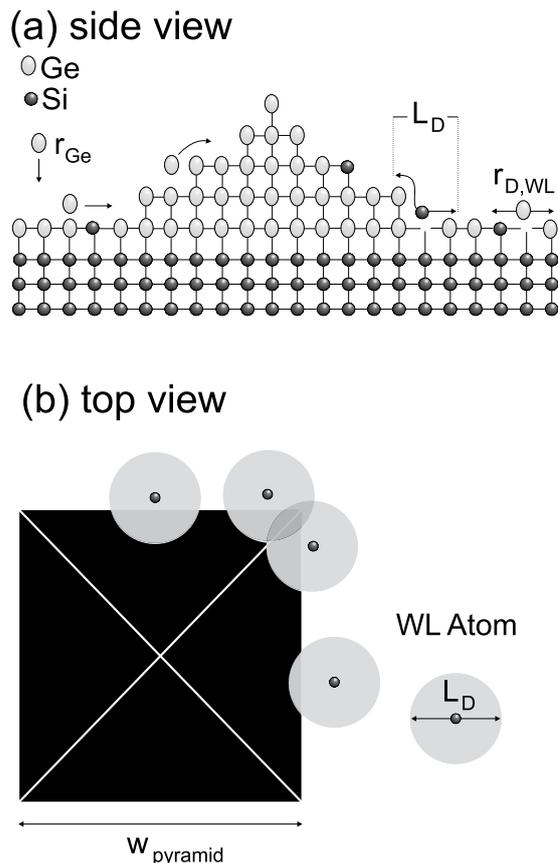
Für einen quantitativen Vergleich wurde die über das Volumen integrierte Verspannungsenergie  $E_{el} = \int_V 1/2 c_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} dV$  der drei Modelle berechnet. Dabei wurden verschiedene Volumina  $V$  ausgewertet: In einer Rechnung wurde die Auswertung auf die Pyramide selbst beschränkt, während bei einer zweiten Rechnung das Substrat und die Benetzungsschicht mit einbezogen wurden. In beiden Fällen ist das Ergebnis gleich:

Die Gesamtenergie ist für Modell B minimal, während Modell C keine Verringerung der Verspannungsenergie gegenüber Modell A liefert. Dass dieses Ergebnis plausibel ist, zeigt auch ein Vergleich der Abbildungen 4.7 und 4.8. In Modell B ist nur ein vergleichsweise kleiner Bereich nahe der Pyramidenspitze gegenüber Modell A stärker verspannt, während das große Volumen nahe der unteren Basis merklich weniger verspannt ist. Die kleinere Verspannung nahe der Basis ist besonders gut im direkten Vergleich der Verspannung in der Benetzungsschicht (Abbildung 4.7(e) und 4.8(e)) zu sehen. Modell A zeigt, dass die Verspannung in den Ecken nicht besonders stark ist, die maximalen Verspannungswerte werden bei konstanter Komposition der Pyramide in den Mitten der Kante erreicht (Abbildung 4.7(e)). Dies macht klar, dass die Anreicherung von Si in den Ecken die Gesamtverspannung nicht verringern kann. Die relativ schwache Verspannung der Ecken in Modell C wird mit einer sehr großen Verspannung in der Mitte der Kanten erkaufte. In dieser Betrachtung verspricht die beobachtete Si Anreicherung in den Ecken also schon vom Ansatz her keine Verringerung der Gesamtverspannung. Aus energetischen Gründen erscheint die beobachtete Si Verteilung nicht bevorzugt, daher muss für die experimentellen Ergebnisse eine kinetische Erklärung gefunden werden.

### 4.2.3 Wachstumsmodell zur Erklärung der beobachteten Vermischung

Das in diesem Kapitel vorgestellte Modell zur Erklärung der Si-Vermischung in Ge Pyramiden fußt auf der Annahme, dass die Vermischung allein durch Oberflächendiffusion verursacht wird. Die Wachstumstemperaturen in den Experimenten sind relativ gering und erheblich niedriger als bei typischen Experimenten, in denen Volumendiffusion untersucht wurde [124, 125]. Außerdem ist kein Grund ersichtlich, warum das Si aus dem Substrat nur in die Ecken der Pyramide diffundieren sollte und nicht in die Mitte der Pyramide. Ferner ist im Experiment eine deutliche Vertiefung in der Mitte der Insel zu sehen und somit ist klar, dass dieser Teil der Insel nicht stark mit Si vermischt sein kann. Dies zeigt, dass die Volumendiffusion an der unteren Grenzfläche vernachlässigbar ist. Diese Schlussfolgerung wird auch dadurch untermauert, dass sehr scharfe Grenzflächen zwischen dem Si des Substrats und dem SiGe der Insel in TEM Messungen (vgl. Abschnitt 3.1.3) und in Röntgenmessungen [108, 25] beobachtet wurden.

Im Fall der Oberflächendiffusion ist unmittelbar ersichtlich, dass die Pyramidenkanten stärker mit Si vermischen als der zentrale Bereich der Pyramide. Wenn nun die Diffusionslänge des eindiffundierenden Si hinreichend klein ist, werden die Ecken der Pyramide stärker mit Si vermischen als die Seiten, da in den Ecken das Si von zwei Seiten eindiffundieren kann. Auf dieser Grundidee wurde ein Wachstumsmodell für die Pyramide entworfen, das in Abb. 4.10 illustriert ist. Abb. 4.10(a) zeigt eine Seitenansicht mit den betrachteten atomaren Prozessen. Die Pyramide wächst über den Eintrag von Material, das aus zwei unterschiedlichen Quellen stammt und mit zwei



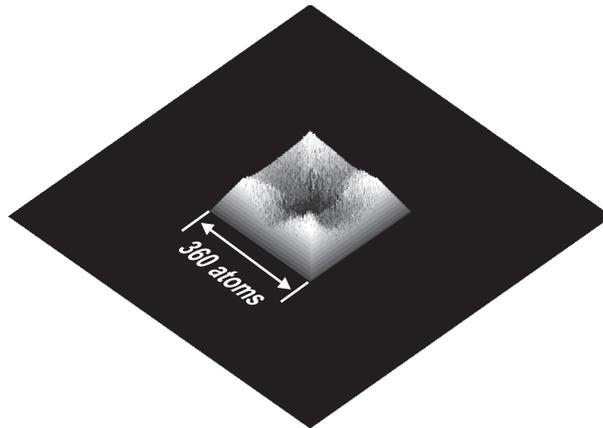
**Abbildung 4.10:** Skizze eines Wachstumsmodells zur Si Anreicherung in den Pyramidenecken. Die Seitenansicht (a) zeigt die beteiligten Prozesse: Ge-Wachstum mit einer Rate  $r_{Ge}$  und Diffusion aus der Benetzungsschicht mit einer Rate  $r_{D,WL}$ . Die Aufsicht (b) zeigt einige exemplarische Si Atome aus der Benetzungsschicht zusammen mit ihrer Diffusionslänge  $L_D$ .

Raten,  $r_{Ge}$  und  $r_{D,WL}$ , in die Pyramide gelangt. Die erste Rate  $r_{Ge}$  ist die Rate, mit der Ge deponiert wird. Diese Ge Atome erreichen die Oberfläche, diffundieren und werden in der Pyramide eingebaut. Zusätzlich wächst die Pyramide mit der Rate  $r_{D,WL}$  über die Eindiffusion von Material aus der vor dem Inselwachstum vorhandenen Benetzungsschicht. Die Benetzungsschicht ist zu einem gewissen Teil mit Si vermischt [126], das auf diese Weise in die Pyramide gelangen kann. Die Diffusionslänge  $L_D$  des Si ist in Abb. 4.10(a) und (b) eingezeichnet. In der Aufsicht in Abb. 4.10(b) wird deutlich, dass eine Diffusionslänge kleiner als die Seitenlänge der Pyramide  $w_{pyramid}$  dazu führt, dass sich das Si in den Ecken ansammelt. Dies geschieht einfach deswegen, weil die Atome von zwei Seiten kommen können, während sie sich in der Mitte der Basiskante nur von einer Seite der Pyramide nähern können.

Aufbauend auf diesem Modell wurde ein Programm erstellt, das die Si Vermi-

schung während des Wachstums einer Pyramide simuliert. Die Simulation wurde auf einem kubischen Gitter durchgeführt, die Pyramide wächst mit einem festgelegten Kontaktwinkel von  $11,3^\circ$ , der zu den experimentell beobachteten  $\{105\}$  Facetten korrespondiert. Der Wachstumszyklus wurde wie folgt simuliert: Die Ge Atome, die bei der Pyramide ankommen, werden gezählt und es wird der Pyramide jeweils eine vollständige Atomlage hinzugefügt, sobald genug Atome durch Deposition oder Eindiffusion hinzugekommen sind. Zwischen dem Wachstum sukzessiver Ge Schichten wird die Si Eindiffusion an der Oberfläche simuliert, indem zufällig eine Position an einer Stufenkante der Pyramide ausgewählt wird und als nächstes isotrop ein Atom in einem Abstand  $r$  von der Anfangsposition ausgesucht wird. Dabei ist die Wahrscheinlichkeit  $P(r)$ , ein Atom in einer Distanz  $r$  zu wählen, durch  $P(r) = \exp(-r/L_D)$  gegeben. Wenn das ausgesuchte Atom sich in der Benetzungsschicht befindet, wird es der Pyramide hinzugefügt. Wenn es ein Si Atom ist, wird es an der Position an der Stufenkante eingebaut, wenn es ein Ge Atom ist, wird es benutzt, um die nächste Atomlage zu vervollständigen. Jeder Wachstumslauf ergibt also eine Pyramide mit einer bestimmten Verteilung der Si Atome innerhalb der Pyramide. Für die Auswertung wurden eine große Anzahl Wachstumsläufe simuliert und für jede Position in der dreidimensionalen Pyramide die Wahrscheinlichkeit bestimmt, an dieser Stelle ein Si Atom zu finden. In der Simulation wurde isotrope Diffusion angenommen, obwohl die Diffusion auf einer rekonstruierten Oberfläche sicherlich zu einem gewissen Grad anisotrop sein wird. Es ist auch möglich, dass die Diffusion auf der  $\{105\}$  Facette der Pyramide anders ist als auf der  $M \times N$  rekonstruierten Benetzungsschicht. Was die Benetzungsschicht betrifft, so ist zu erwarten, dass die Anisotropie der Diffusion relativ gering ist. Auf reinen Si Oberflächen wird eine  $2 \times 1$  Rekonstruktion beobachtet [127], in der je zwei Si Atome an der Oberfläche ein Dimer bilden. Die Dimere sind in langen Reihen angeordnet, was dazu führt dass es eine Vorzugsrichtung gibt. Die Diffusionslängen sind sehr unterschiedlich, je nachdem ob die Diffusionsrichtung entlang oder orthogonal zu den Dimerreihen ist. Dagegen besteht die  $M \times N$  Rekonstruktion aus einem dichten, zweidimensionalen Gitter orthogonaler “dimer vacancy lines” (DVL) und “dimer row vacancies” (DRV). Hier gibt es also keine so ausgeprägte Vorzugsrichtung. Für das vorliegende, einfache Modell ist die Annahme einer isotropen Diffusion daher ausreichend.

Die Abb. 4.11 zeigt die Konturfläche innerhalb der Pyramide, an der die Wahrscheinlichkeit, ein Si Atom zu finden, 35% oder größer ist. Die Ähnlichkeit mit dem Oberflächenprofil der geätzten Pyramiden ist offensichtlich, auch in der Simulation zeigt sich ein tiefes Minimum in der Mitte der Pyramide und Einschnitte jeweils in der Mitte der Seitenflächen. Das tiefe Minimum in der Mitte der simulierten Pyramide ist eine Folge des anfänglich schnellen Wachstums der Pyramide. Aufgrund des kleinen Volumens am Anfang gelangen nur wenige Si Atome über Diffusion in die Pyramide bevor die nächste Monolage der Pyramide komplettiert ist. In späteren Phasen des Wachstums wird eine größere Anzahl Si Atome in die Pyramide eingebaut, bevor die nächste Monolage fertiggestellt wird. Aufgrund der inhomogenen Verteilung des Si kann dann die Si Konzentration an einigen Stellen über 35% steigen.



**Abbildung 4.11:** Simulierte Konturfläche 35%iger Si Konzentration innerhalb einer Pyramide mit 360 Atomen Basislänge.

Für die Berechnung des in Abb. 4.11 gezeigten Profils wurde eine Länge der Pyramidenbasis von 360 Atomen, eine Diffusionslänge von 90 Atomen und eine Si Konzentration in der Benetzungsschicht von 20% angenommen. Das Pyramidenwachstum während der Ge Deposition wurde simuliert indem  $r_{Ge} = 100r_{D,WL}$  gesetzt wurde. Zur Simulation der Wachstumsunterbrechung nach der Ge Deposition wurde  $r_{Ge}$  nach Erreichen eines festgelegten Volumens kontinuierlich reduziert. Am Ende der Simulation war  $r_{Ge} \approx r_{D,WL}$ , das heißt die Rate der noch nicht eingebauten Ge Atome, die auf der Oberfläche diffundieren, wurde im Vergleich zur Rate der aus der Benetzungsschicht eindiffundieren Atome stark verringert. Kompositionsprofile wurden auch für eine Reihe anderer Raten und Diffusionslängen berechnet, bei einigen Simulationen wurde das Verhältnis von  $r_{Ge}$  und  $r_{D,WL}$  während des ganzen Wachstums fixiert. Es stellte sich heraus, dass die grundsätzliche Form des Kompositionsprofils unabhängig von der konkreten Parameterwahl ist, solange die Diffusionslänge des Si klein gegen die Länge der Pyramidenbasis ist.

Eine im Verhältnis zur Inselgröße kleine Diffusionslänge für Si ist also eine wichtige Annahme für das Modell. Eine physikalische Begründung für diese kurze Diffusionslänge lässt sich folgendermaßen geben: Wie in Kapitel 3 gezeigt wurde, entstehen beim Wachstum von selbstorganisierten Inseln Gräben um die Inselbasis herum, deren Breite wesentlich kleiner ist als der Inseldurchmesser. Zwar konnte die Grabenbildung bei Pyramiden in Abschnitt 3.2 nicht unzweifelhaft bewiesen werden, aber vieles deutet darauf hin, dass auch um Pyramiden herum flache Gräben entstehen. Selbst wenn diese Gräben bei den in diesem Abschnitt benutzten Wachstumsbedingungen nur wenige Monolagen tief sind, führt dies zu einer Si-reichen Benetzungsschicht in unmittelbarer Umgebung der Pyramide. Denn die Vermischung in der Benetzungsschicht nimmt zur Grenzfläche zum Si hin zu [126]. Eine Reduktion der Benetzungsschichtdicke um die Pyramiden kann also dazu führen, dass Si nur aus der unmittelbaren

Umgebung in die Inseln hineindiffundiert.

Es sei darauf hingewiesen, dass im Modell nur die Diffusionslänge des Si klein gegen die Inselgröße ist, die Diffusionslänge des Ge geht nicht direkt in das Modell ein. Es wird nur angenommen, dass die Diffusionslänge für Ge groß genug ist, um das Wachstum perfekter Inselfacetten zu ermöglichen. Bei der Nukleation von selbstorganisierten Inseln muss die Diffusionslänge des Ge mindestens so groß sein wie der mittlere Inselabstand, also viel größer als die Inselgröße beim Ende des Wachstums. Hier ist allerdings zu beachten, dass bei der Nukleation einer Insel normalerweise das Ge beteiligt ist, das während des Wachstums neu auf der Oberfläche auftritt. Da dieses Ge aus einer heißen Effusionszelle stammt, hat es eine höhere Energie als Atome, die aus der Benetzungsschicht heraus zu diffundieren beginnen. Es scheint daher plausibel, dass beim Wachstum sehr unterschiedliche Diffusionslängen gelten, je nachdem woher die diffundierenden Atome stammen. Beim Si ist klar, dass dieses aus der Benetzungsschicht stammen muss, da im vorliegenden Experiment nach dem Pyramidenwachstum kein neues Si abgeschieden wurde. Für das Ge lässt sich diese Vermutung dagegen nur schwer experimentell belegen, da sich nicht feststellen lässt, ob die Atome schon einmal in der Benetzungsschicht eingebaut waren oder nicht.

Das Modell ist mit Sicherheit eine starke Vereinfachung der realen Prozesse während des Ge Wachstums, aber es reproduziert sehr gut die im Experiment beobachtete Vertiefung in der Mitte der Pyramide und die Erhöhungen in den Ecken. Dies deutet darauf hin, dass die entscheidenden Mechanismen während des Wachstums mit diesem einfachen Modell gut wiedergegeben werden.

### **4.3 Zusammenfassung dieses Kapitels**

In diesem Kapitel wurde die Interdiffusion von Hut Cluster, Pyramiden und Dome Inseln untersucht, die im Temperaturbereich von 520°C bis 620°C gewachsen wurden. Für Pyramiden und Domes konnte eine Si Vermischung experimentell für alle Temperaturen nachgewiesen werden, bei denen diese Inseln wachsen. Das gefundene Vermischungsprofil ist lateral nicht homogen und oft unsymmetrisch. Für Pyramiden zeigt sich, dass die stärkste Vermischung in den Ecken der Pyramiden beobachtet wird. Diese Si Anreicherung in den Ecken lässt sich nicht durch verspannungsinduzierte Diffusion erklären, welche die Verspannungsenergie der Inseln minimieren würde. Die Annahme, dass das eindiffundierende Si aus der unmittelbaren Umgebung der Pyramide kommt, führt rein geometrisch zu einer Si Anreicherung in den Ecken. Eine einfache Wachstumssimulation basierend auf diesem Modell kann das beobachtete Vermischungsprofil reproduzieren.

## Kapitel 4. Interdiffusion bei mittleren Temperaturen: Koexistenz von Domes und Pyramiden

# Kapitel 5

## Wachstum bei niedrigen Temperaturen: Hut Cluster Inseln

In diesem Kapitel werden Hut Cluster Inseln untersucht, die bei 500°C gewachsen wurden. Hut Cluster Inseln haben typischerweise die Form langgezogener Pyramiden. Die Oberflächen dieser Pyramiden sind  $\{105\}$  Facetten, die Grundflächen der Pyramiden sind entlang der  $\langle 100 \rangle$  Achsen des Kristalls orientiert. Schon in der ersten Veröffentlichung zu diesen Inseln wurde vermutet [3], dass Hut Cluster Inseln metastabile Strukturen sind, die durch kinetisch limitiertes Wachstum bei niedrigen Temperaturen entstehen. Es ist also zu erwarten, dass die Interdiffusion in diesen Inseln sich erheblich von den Vermischungspänomenen unterscheiden wird, die bei höherer Temperatur gefunden wurden.

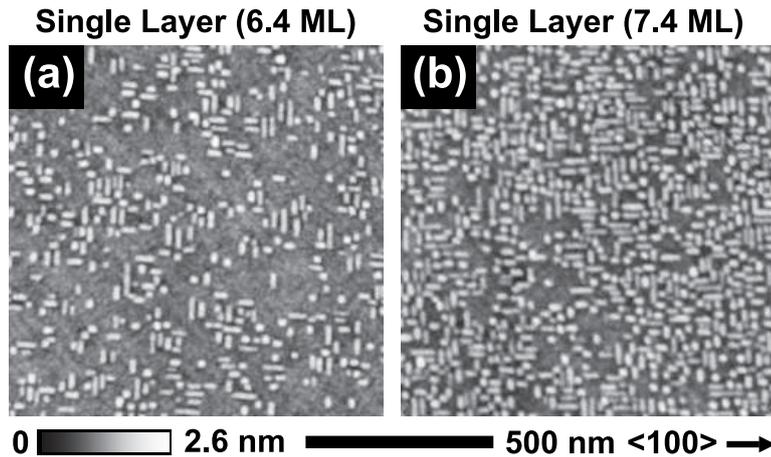
In diesem Kapitel wird zunächst in Abschnitt 5.1 die Interdiffusion einer einzelnen Lage von Hut Cluster Inseln untersucht. Abschnitt 5.2 beschäftigt sich mit der Untersuchung von Proben, in denen zwei Insellagen vertikal gestapelt wurden. Außerdem wird ein Vergleich zwischen Einzellage und Zweifach-Inselschicht gezogen. In Abschnitt 5.3 werden Proben vermessen, in denen die Inseln in bis zu neun Lagen vertikal gestapelt wurden.

### 5.1 Charakterisierung einer einzelnen Insellage

In diesem Abschnitt werden typische Ergebnisse von AFM- und PL-Messungen an Hut Cluster Inseln vorgestellt. Zum Wachstum der Inseln wurde reines Ge bei einer Substrattemperatur von 500°C auf Si abgeschieden. Für die PL-Messungen wurden die Inseln mit 100 nm Si bei 500°C Substrattemperatur überwachsen.

#### 5.1.1 Rasterkraftmikroskopie und Photolumineszenz

Abbildung 5.1 zeigt zwei AFM-Aufnahmen, in denen die Menge des abgeschiedenen Ge variiert wurde. Abb. 5.1(a) zeigt die Probenoberfläche nach Deposition von 6,4 ML



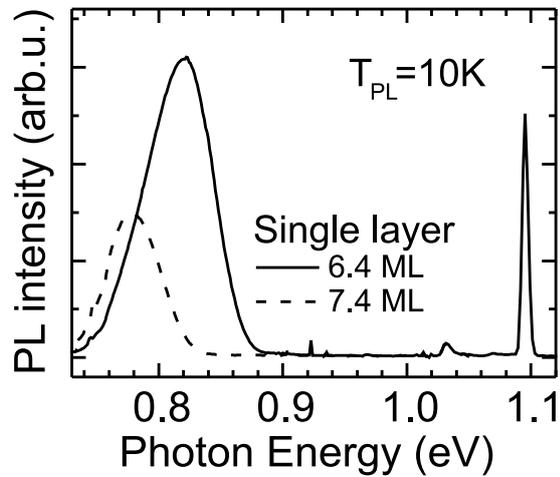
**Abbildung 5.1:** Repräsentative AFM-Aufnahmen von Hut Cluster Inseln, bei denen (a) 6,4 ML und (b) 7,4 ML Ge deponiert wurde. Der Vergleich zeigt, dass mit zunehmender Ge Deposition die Anzahl der Inseln rasch zunimmt, während die Form der einzelnen Inseln sich nur wenig ändert.

Ge. Es sind langgezogene Hut-Cluster Inseln zu erkennen. Das Verhältnis Länge zu Breite ist etwa 3:1 und die durchschnittliche Inselhöhe ist 1 nm. Die Inseldichte in dieser Probe ist ungefähr  $3,5 \times 10^{10}$  Inseln/cm<sup>2</sup>. In Abb. 5.1(b) ist zu sehen, dass sich an der Form der Inseln wenig ändert, wenn 1 ML mehr Ge abgeschieden wird, allerdings nimmt die Inseldichte drastisch zu. Die Inseldichte ist ungefähr  $8 \times 10^{10}$  Inseln/cm<sup>2</sup>.

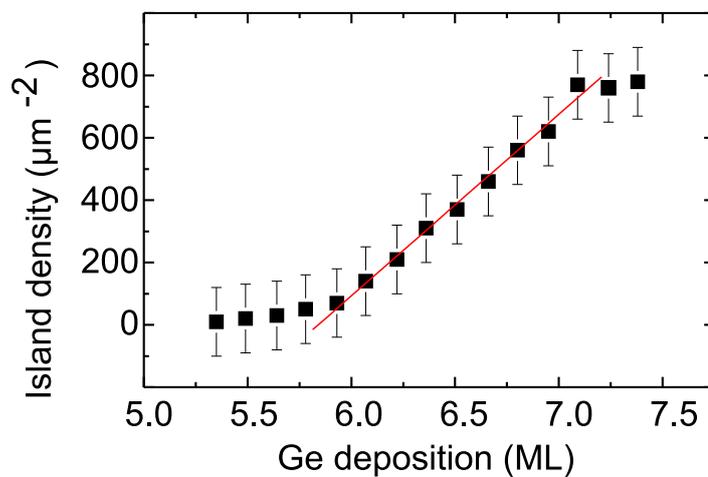
In Abb. 5.2 sind Photolumineszenzspektren von Proben gezeigt, in denen genauso viel Ge abgeschieden wurde, wie bei den Proben von denen AFM-Aufnahmen gemacht wurden. Die durchgezogene Linie zeigt ein Spektrum, bei dem 6,4 ML Ge abgeschieden wurden, die gestrichelte Linie zeigt ein Spektrum bei 7,4 ML Ge Deposition. In beiden Spektren ist ein breites Maximum bei etwa 800 meV zu erkennen, das den Hut Cluster Inseln zugeordnet wird [89]. Wenn 6,4 ML Ge deponiert werden, liegt das Maximum bei 820 meV, bei einer Deposition von 7,4 ML verschiebt sich das Maximum zu kleineren Energien und liegt dann bei 780 meV. Diese Verschiebung zu niedrigeren Energien ist wahrscheinlich dadurch zu erklären, dass die Inseln einen etwas höheren Ge Gehalt haben, wenn mehr Ge deponiert wird. In Abschnitt 6.8 wird nachgewiesen, dass die letztendliche Zusammensetzung der Inseln entscheidend durch die Interdiffusion während des Überwachsens mit Si bestimmt wird. Es ist plausibel anzunehmen, dass diese Interdiffusion leicht unterschiedlich ausfällt, je nachdem wie groß die Dichte der Inseln ist, mit denen das ankommende Si interdiffundiert.

### 5.1.2 Inseldichte als Funktion des deponierten Germaniums

Wenn mehr Ge abgeschieden wird, bleibt die Form der Hut Cluster etwa gleich, während die Dichte stark zunimmt [128]. Diese Zunahme der Inseldichte mit der Menge



**Abbildung 5.2:** Typische Photolumineszenzspektren einer Einzellschicht Hut Cluster Inseln. Das mit einer durchgezogenen Linie gezeichnete Spektrum stammt von einer Probe, in der 6,4 ML Ge abgeschieden wurden. Das gestrichelte Spektrum wurde bei einer Probe gemessen, bei der 7,4 ML Ge deponiert wurden.

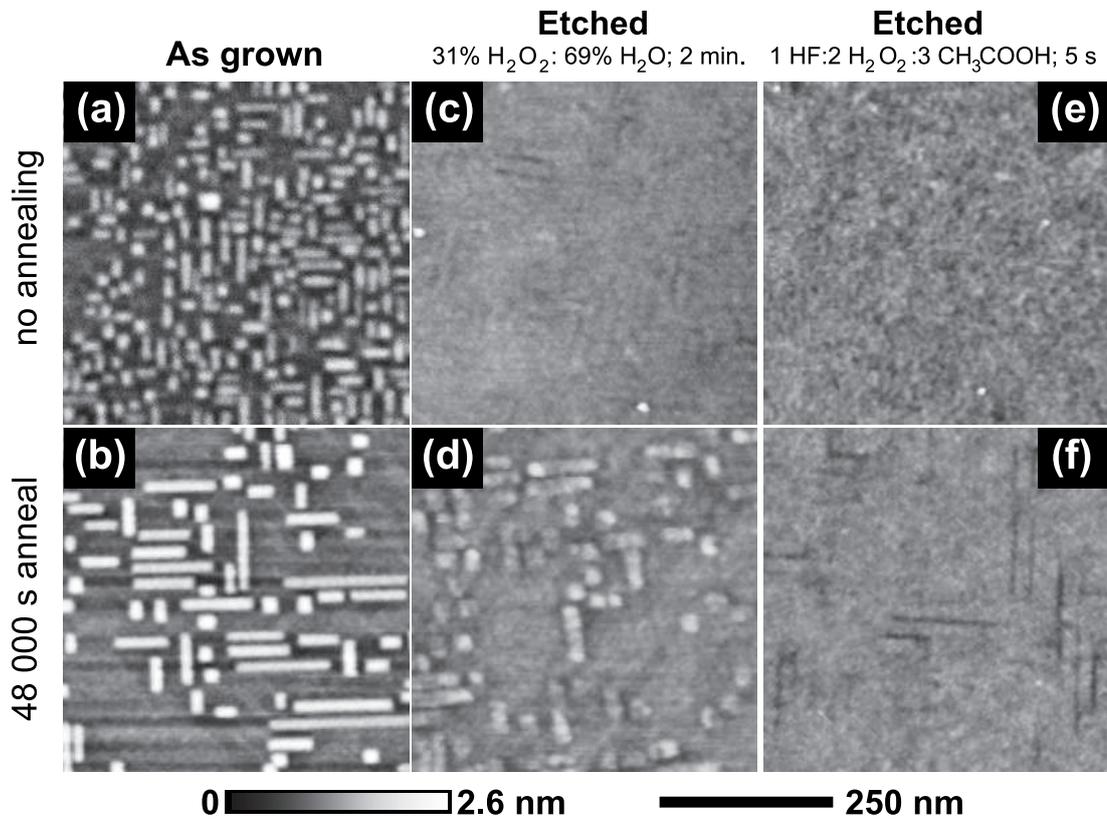


**Abbildung 5.3:** Die Anzahl der Hut-Cluster Inseln auf der Oberfläche nimmt im Bereich um 6 ML stark zu und erreicht bei etwa 7 ML eine Sättigung.

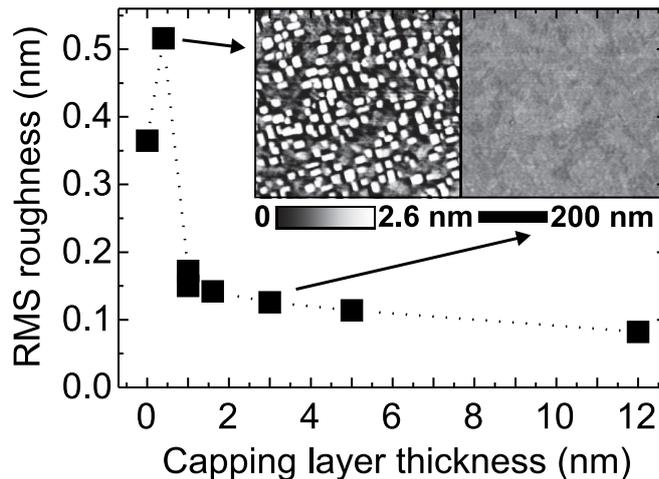
des deponierten Ge ist in Abb. 5.3 aufgezeichnet. Unterhalb einer Ge Schichtdicke von etwa 6 ML findet man nur eine sehr geringe Dichte an Inseln. Ab etwa 6 ML steigt die Inseldichte stark an. Die Dichte nimmt annähernd linear mit der Ge Schichtdicke zu und erreicht bei etwa 7 ML eine Sättigungsdichte von mehr als  $8 \times 10^{10}$  Inseln/cm<sup>2</sup>. In diesem Bereich ist die Oberfläche quasi vollständig mit Inseln belegt. Bei größeren Ge Schichtdicken kommt es zur Nukleation von versetzten Clustern [3]. Die versetzten Cluster haben zunächst nur eine geringe Dichte aber sie sind sehr groß im Vergleich zu den Hut Clustern und können daher das zusätzliche Ge aufnehmen. Für die folgenden Abschnitte wurde eine Ge Schichtdicke von 6,4 ML als Ausgangspunkt gewählt. Bei dieser Schichtdicke sind ausreichend große Teile der Oberfläche frei von Inseln, um eine zuverlässige Bezugsebene für die Bestimmung der Inselhöhe zu ergeben.

### 5.1.3 Chemische Zusammensetzung vor und nach Temperversuchen

Die Vermischung in Hut Cluster Inseln wurde mit einer Versuchsreihe untersucht, in der die Inseln nach dem Wachstum für verschiedene Zeiten auf Wachstumstemperatur gehalten wurden. Dabei zeigt sich, dass die Form der Inseln sich auch nach Temperzeiten von bis zu 20 Stunden nicht grundsätzlich ändert (Abb. 5.4(a) und (b)). Die Inseln behalten die Form langgestreckter Pyramiden, wobei sich durch das Tempern das Längen- zu Breitenverhältnis vergrößert. Die zunehmende Elongation der Inseln lässt sich dadurch erklären, dass die Energiebarriere für das Hinzufügen einer Atomlage auf der kleineren Facette niedriger ist als auf der großen Facette [128, 129]. Durch wiederholtes Hinzufügen einer kleinen Facette wachsen die Inseln dann in die Länge. Die Inselhöhe steigt nicht wesentlich. Trotzdem ändert sich die Komposition der Inseln signifikant, wie ein Ätzschritt in Wasserstoffperoxid zeigt. Wasserstoffperoxid ätzt Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> Legierungen mit  $x \geq 65\%$ . Ohne einen Tempersschritt werden die Inseln komplett weggeätzt, wie Abb. 5.4(c) zeigt. Bei der Probe, die mehr als 13 Stunden auf Wachstumstemperatur gehalten wurde, werden die Inseln nicht mehr komplett durch den Ätzschritt entfernt. Der Vergleich zwischen Abb. 5.4(b) und (d) zeigt, dass die Strukturen auf der Oberfläche die gleiche Grundfläche und Dichte wie die Inseln haben und daher als Inselreste nach dem Ätzen identifiziert werden können. Allerdings ist die Höhe durch das Ätzen mehr als halbiert. Die Inselreste bestehen aus einer Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> Legierung, deren Ge Konzentration geringer als etwa 65% ist. Ein weiterer Ätzversuch wurde mit einer SiGe Ätze (HF:H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>:CH<sub>3</sub>COOH) durchgeführt, die Ge bis hinunter zu einer Konzentration von 10% mit einer Rate von 3 nm/Min. ätzt [91]. Nach einem Ätzschritt von nur 5 Sekunden sind die Inseln in beiden Proben komplett entfernt (Abb. 5.4(e) und (f)). Wenn man die publizierten Ätzraten zugrunde legt, kann die minimale Ge Konzentration in den getemperten Inseln auf mindestens 15% abgeschätzt werden. Zusammenfassend kann also gefolgert werden, dass sich die freistehenden Hut Cluster Inseln mit einer endlichen, aber sehr geringen Rate mit dem Si Substrat vermischen.



**Abbildung 5.4:** AFM-Aufnahmen vor (obere Reihe) und nach (untere Reihe) einem Temperversuch. Verglichen mit (a) den Inseln direkt nach dem Wachstum sind (b) die getemperten Inseln etwas langgestreckter. Ätzen in Wasserstoffperoxid zeigt, dass (c) die nicht getemperten Inseln komplett weggeätzt werden, während von (d) den getemperten Inseln Reste zurückbleiben. Ätzen in BPA Lösung entfernt sowohl (e) die nicht getemperten als auch (f) die getemperten Inseln.



**Abbildung 5.5:** Die Oberflächenrauigkeit einer mit Si überwachsenen Lage Hut Cluster Inseln als Funktion der Si Deckschichtdicke. Bereits bei einer Schichtdicke von 3 nm Si sind keine Rauigkeiten auf der Oberfläche zu erkennen, die mit den Inseln in Zusammenhang gebracht werden könnten.

## 5.2 Vergleich zwischen Einzellage und zweifach gestapelten Inseln

In diesem Abschnitt werden Proben mit einer Einzelschicht Hut Cluster Inseln mit Proben verglichen, in denen zwei Lagen Hut Cluster gewachsen wurden. Die Wachstumsprozedur für diese Proben war wie folgt: Zunächst wurde nach einer 60 nm Si Pufferschicht eine Lage Ge Inseln gewachsen, dann wurde diese Inselnschicht mit 3 nm Si überwachsen und zum Schluss wurde eine zweite Ge Schicht gewachsen. Zwischen den einzelnen Wachstumsschritten wurden Wachstumspausen von 50 s eingelegt, in denen die RHEED Muster analysiert wurden.

### 5.2.1 Bestimmung der minimalen Deckschichtdicke zur Planarisierung der Probenoberfläche

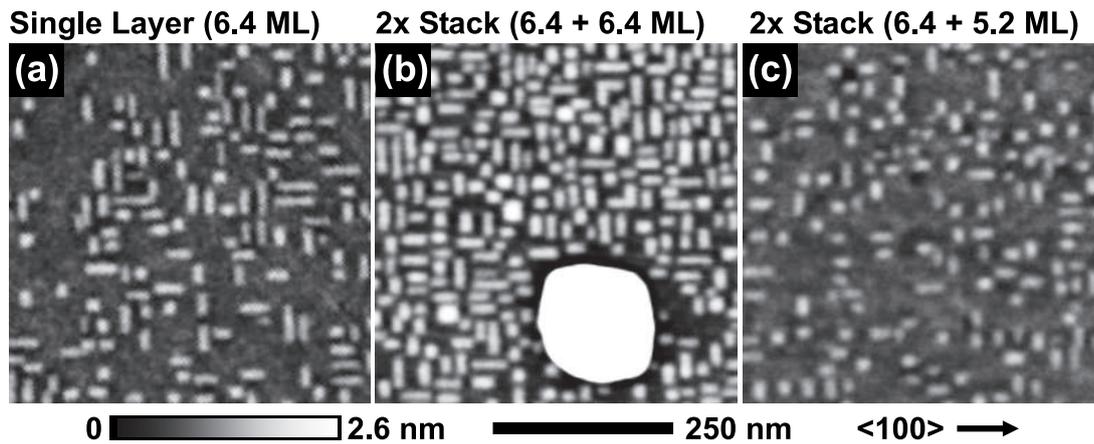
Als Vorversuch zum vertikalen Stapeln von Hut-Cluster Inseln wurde eine Reihe Proben gewachsen, in denen die Hut-Cluster Inseln mit einer Si Schicht überwachsen wurden. Hierbei wurde die Planarisierung der Oberfläche in Abhängigkeit der Dicke der Si Deckschicht untersucht. Die Si Schicht wurde in dieser Probenreihe in einem Bereich von 0,4 bis 12 nm variiert und ist in [Abbildung 5.5](#) dargestellt. Nach dem Abscheiden einer Si Schicht von 0,4 nm sind noch deutlich die Formen der Hut-Cluster Inseln zu erkennen, wie die entsprechende AFM-Aufnahme in [Abbildung 5.5](#) zeigt. Die RMS-Oberflächenrauigkeit ist mit 0,5 nm sogar etwas höher als bei freistehenden Inseln. Ab

einer Schichtdicke von etwa 1 nm Si erfolgt eine rasche Planarisierung der Oberfläche. Bei einer Schichtdicke von 3 nm Si weist die Oberfläche eine Rauigkeit von etwa 0,13 nm auf. Die Si Oberfläche ist damit etwas rauer als bei sehr dicken Si Schichten, die eine Rauigkeit von unter 0,1 nm haben. Wie die AFM-Aufnahme für die 3 nm Si Deckschicht aber zeigt, ist keinerlei Struktur auf der Oberfläche mehr zu erkennen, die mit den überwachsenen Inseln korreliert werden könnte. Daher wurde eine Deckschicht von 3 nm als ausreichend angesehen, um die Oberfläche zu planarisieren.

Das Messergebnis bei einer Deckschichtdicke von 0,4 nm scheint zunächst sehr überraschend. Ein ähnliches Verhalten wurde aber bei höheren Wachstumstemperaturen (550°C) beim Überwachsen von Pyramiden bereits beobachtet [63]. Dort wurde gezeigt, dass größere Pyramiden trotz Deposition von Si für eine gewisse Zeit ihre Form behalten. Dies wurde damit erklärt, dass es abhängig von der Ge Konzentration ein kritisches Volumen gibt, ab der die Inseln ihre Form ändern. Freistehenden Inseln ändern ihre Form während des Si-Wachstums zunächst nicht, wenn das Volumen der Inseln weit unter dem kritischen Volumen ist. Wie in Abschnitt 5.1 gezeigt, behalten Hut Cluster Inseln ihre Form, auch wenn sie sich teilweise mit Si vermischen. Es scheint also plausibel, dass auch beim Überwachsen erst bei einer gewissen Si Konzentration eine Änderung der Inselnform einsetzt. Sobald genug Si auf der Oberfläche vorhanden ist, setzt eine rapide Verflachung der Inseln ein [130]. Das Si lagert sich vorwiegend zwischen den Inseln an [131] und sorgt damit für eine beschleunigte Einebnung der Oberfläche. Dies erklärt, warum schon bei einer geringfügig größeren Deckschichtdicke die Oberfläche weitgehend planarisiert ist.

### 5.2.2 Zweifach gestapelte Inseln: Rasterkraftmikroskopie

Abbildung 5.6 zeigt die AFM-Aufnahme einer Einzelschicht im Vergleich mit zwei gestapelten Schichten. In Abbildung 5.6(a) ist die Einzelschicht zu sehen, die Hut Cluster Inseln mit einer Inseldichte von ungefähr  $3 \times 10^{10}$  Inseln/cm<sup>2</sup> zeigt. Zwischen den Inseln sind Bereiche zu erkennen, in denen die Oberfläche frei von Inseln ist. Dies ist anders in der Zweifachschicht in Abb. 5.6(b), dort ist die Oberfläche komplett mit Inseln belegt. Außerdem ist im unteren, rechten Teil der AFM-Aufnahme ein großer Cluster zu erkennen, der weiß dargestellt ist, da er die angezeigte Höhenskala übersteigt. Solche Cluster wachsen an Stellen, an denen sich Versetzungen gebildet haben [3]. In Einzellagen entstehen diese versetzten Cluster erst ab einer kritischen Schichtdicke  $d_{crit,dis}$ , die deutlich über der kritischen Schichtdicke  $d_{crit,hut}$  für die Bildung von Hut Cluster Inseln liegt. Die Beobachtung dieser versetzten Cluster zusammen mit der hohen Inseldichte führt also zu der Schlussfolgerung, dass sich die kritische Schichtdicke sowohl für die Insel- als auch für die Versetzungsbildung durch das Stapeln verringert. Die Verringerung der kritischen Schichtdicke für die Inselbildung wurde mittels RHEED auch direkt experimentell nachgewiesen. Der Umschlag des RHEED Musters in ein für Inseln typisches "spotty pattern" wurde in der zweiten Schicht deutlich früher beobachtet [132]. Dieses Phänomen ist für Dome Inseln wohl bekannt [75] und wurde dort durch die Spannungsfelder der vergrabenen Inseln erklärt. Direkt ober-



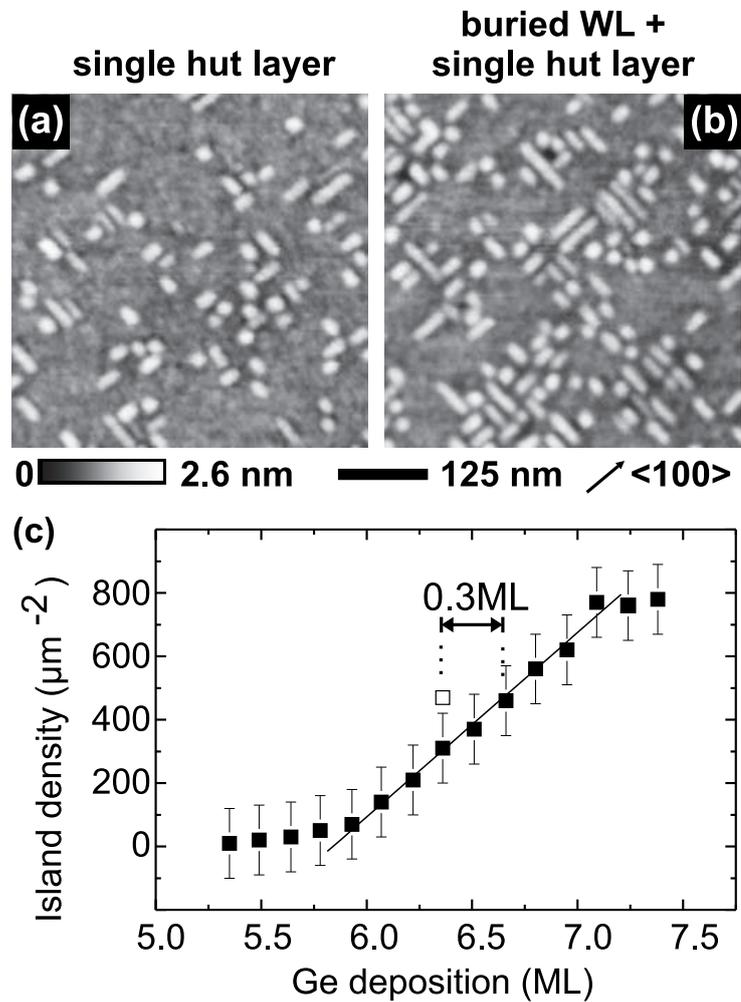
**Abbildung 5.6:** Vergleich einer (a) einzelnen Schicht Hut Cluster Inseln mit vertikal gestapelten Inseln, bei denen (b) zweimal dieselbe Menge Ge abgeschieden wurde und (c) die Ge Menge in der zweiten Schicht reduziert wurde. Vergleichbare Inseldichten lassen sich nur durch Reduktion der Ge-Deposition in der oberen Schicht erreichen.

halb einer vergrabenen Insel ist das Si an der Oberfläche dehnungsverspannt, was zu einer bevorzugten Migration von Ge an diese Stellen und damit einhergehend zu einer früheren Nukleation von Inseln führt.

In Abb. 5.6(c) wurde die Ge Deposition in der zweiten Schicht soweit reduziert, dass die Inseldichte in der ersten und zweiten Schicht gleich ist. Auf diese Weise wurde die Reduktion der kritischen Schichtdicke durch das Vorhandensein der vergrabenen Inseln quantitativ bestimmt, sie beträgt 1,2 ML für die hier benutzte Si Zwischenschichtdicke von 3 nm.

### 5.2.3 Einfluss der Segregation auf die Reduktion der kritischen Schichtdicke

Die beobachtete Reduktion der kritischen Schichtdicke in gestapelten Inselfschichten kann auch durch Ge Segregation beeinflusst sein [133]. Um diesen Einfluss zu untersuchen, wurde eine Ge Benetzungsschicht unterhalb der kritischen Schichtdicke gewachsen, diese mit 3 nm Si bedeckt und eine Inselfschicht mit 6,4 ML Ge gewachsen. Diese Probe wird in Abb. 5.7 mit einer Einzelschicht Hut Cluster Inseln verglichen, in der ebenfalls 6,4 ML Ge abgeschieden wurde. Abb. 5.7(a) zeigt die AFM-Aufnahme der Einzelschicht zum direkten Vergleich mit der in Abb. 5.7(b) gezeigten Schicht, in der vorher eine Benetzungsschicht deponiert wurde. Die Inseldichte in Abb. 5.7(a) ist etwas geringer als in Abb. 5.7(b). In Abb. 5.7(c) ist die in Abb. 5.7(b) gemessene Inseldichte als weißes Quadrat gezeigt, im Vergleich dazu sind nochmals die Daten aus Abb. 5.3 eingetragen. Aus der Inseldichte ergibt sich eine Differenz in der kritischen



**Abbildung 5.7:** Hut Cluster Inseln, die (a) direkt auf Si und (b) über einer vergrabenen Benetzungsschicht gewachsen wurden. Der Vergleich der Inseldichten zeigt, dass die kritische Schichtdicke etwa um 0,3 ML unterschiedlich ist.

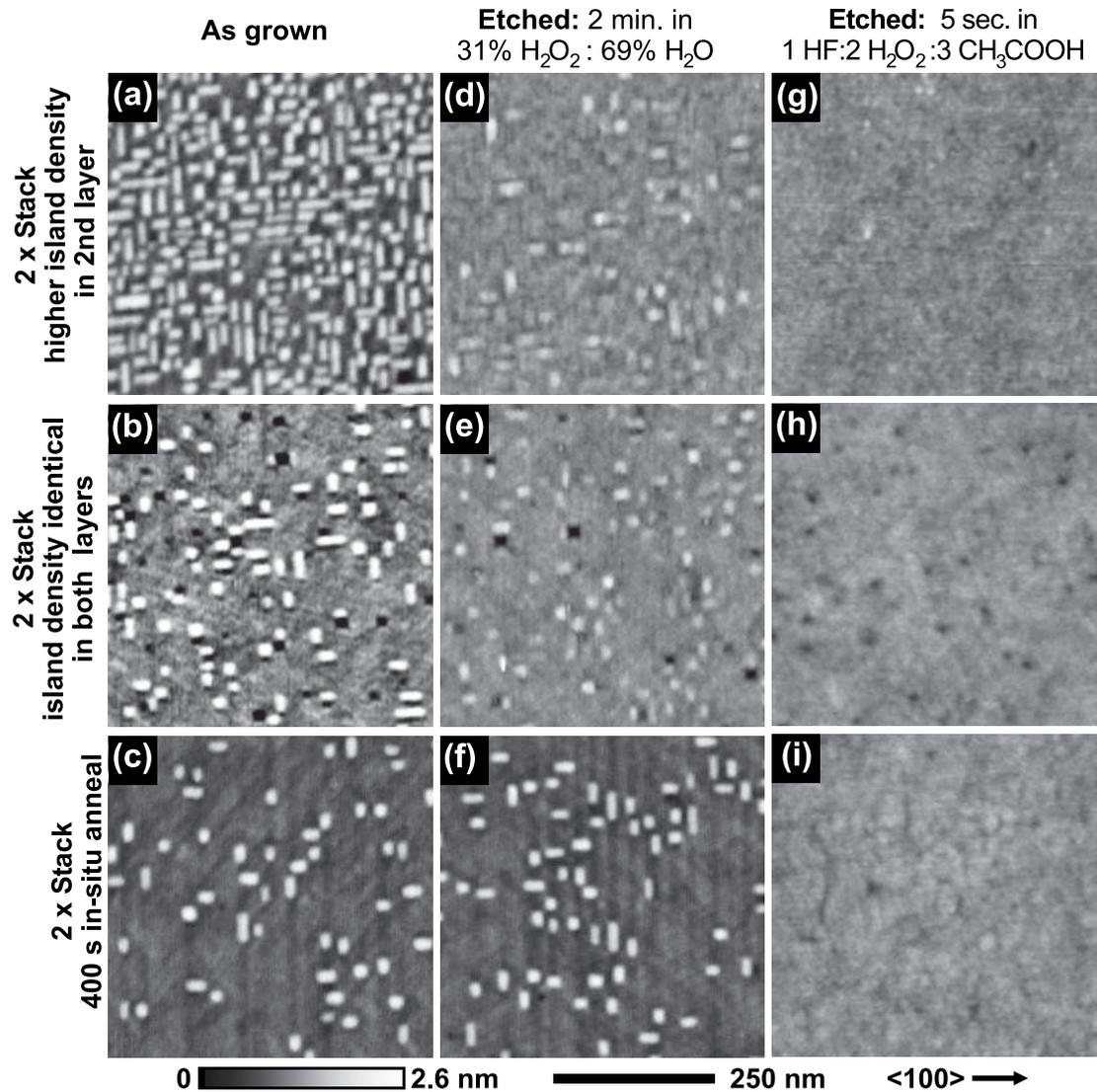
Schichtdicke von etwa 0,3 ML zwischen der einzelnen Hut Cluster Schicht und der Probe, in der vorher eine Benetzungsschicht deponiert wurde. Durch Segregation von Ge wäre also ein Unterschied der kritischen Schichtdicke von 0,3 ML in den gestapelten Schichten zu erklären, die beobachtete Änderung der kritischen Schichtdicke ist aber 1,2 ML. Die kritische Schichtdicke wird also selbst bei einer Si Deckschicht von nur 3 nm hauptsächlich durch die Spannungsfelder der vergrabenen Inseln und nicht durch Segregation bestimmt.

#### 5.2.4 Vergleich der Interdiffusion in einer Einzellschicht und einer Zweifachschicht

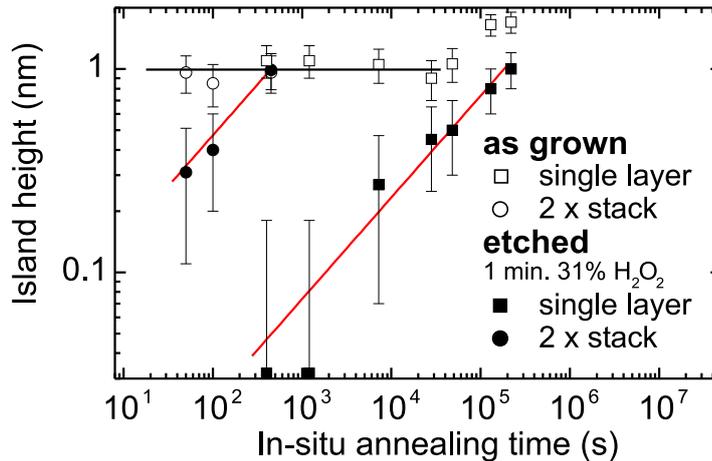
In diesem Abschnitt wird die Si Vermischung anhand von verschiedenen Proben untersucht, die zweifach gestapelte Hut Cluster Inseln enthalten. Der Vergleich dieser Experimente mit denen, die in Abschnitt 5.1 vorgestellt wurden, zeigt, dass die Si Vermischung durch das Vorhandensein vergrabener Inseln stark erhöht wird. Abbildung 5.8 zeigt AFM-Aufnahmen einer Probenserie, in denen zwei Inselschichten gestapelt wurden; die Wachstumsprozedur entspricht der in Abschnitt 5.2.2. Abb. 5.8(a) zeigt die Oberfläche einer Probe, in der in beiden Schichten dieselbe Menge Ge abgeschieden wurde. Die Inseldichte der zweiten Schicht ist daher höher als die der vergrabenen Schicht. In Abb. 5.8(b) ist die Inseldichte in der zweiten Schicht identisch mit der in der vergrabenen Schicht. Die Probe in Abb. 5.8(c) wurde genauso gewachsen wie die in Abb. 5.8(b), zusätzlich wurde diese Probe nach Abscheiden der zweiten Ge Schicht aber für 400 s auf der Wachstumstemperatur getempert. Wie der Vergleich der beiden Abbildungen zeigt, wird die äußere Form der Inseln nicht wesentlich durch den Tempersschritt beeinflusst.

Ein Ätzschritt in Wasserstoffperoxid gibt Einblick in die Komposition der gestapelten Inseln. Abb. 5.8(d) zeigt, dass nach dem Ätzen Inselreste sichtbar sind. Die Vermischung der Inseln mit Si ist im Vergleich zu einer Einzelschicht stark beschleunigt, da vergleichbare Strukturen in einer Einzelschicht erst nach einem langen Tempersschritt beobachtet werden. Allerdings sind nicht alle Inseln mit Si vermischt. Die Inseldichte der nicht geätzten Probe in Abb. 5.8(a) ist wesentlich höher als die in Abb. 5.8(d). Eine mögliche Erklärung dafür ist, dass nur diejenigen Inseln stärker mit Si vermischen, die einen Vorgänger in der vergrabenen Schicht haben. Diese Interpretation wird durch Abb. 5.8(e) unterstützt. Hier wurde die Probe geätzt, die einen Zweifachstapel mit identischer Inseldichte in beiden Lagen enthält. Die beobachtete Inseldichte nach dem Ätzen stimmt mit derjenigen vor dem Ätzen (Abb. 5.8(b)) und auch mit der Inseldichte in Abb. 5.8(d) überein. Die Dichte der vergrabenen Inseln ist identisch mit der in Abb. 5.8(d) gezeigten Probe, da die Wachstumsprozedur der ersten Inselschicht für beide Proben gleich war. Dies ist ein starker Hinweis darauf, dass die Dichte der vermischten Inseln von der Inseldichte der vergrabenen Inseln bestimmt wird.

Abb. 5.8(f) zeigt die getemperte Probe nach dem Ätzen. Die Ätzlösung zeigt keinen erkennbaren Effekt bei den getemperten Inseln. Ein Vergleich der Inselhöhen vor



**Abbildung 5.8:** AFM-Aufnahmen von zweifach gestapelten Inseln (a) mit gleicher Ge Deposition in beiden Schichten, (b) gleicher Inseldichte in beiden Schichten und (c) nach einem Tempersschritt. Dieselben Proben nach einem Ätzschritt in Wasserstoffperoxid (d)-(f) und in HF:H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>:CH<sub>3</sub>COOH (g)-(i).



**Abbildung 5.9:** Vergleich der Inselhöhe einer einzelnen Insellage (Kreise) mit einer Zweifachschicht (Quadrate) als Funktion der Temperzeit. Die offenen Symbole stellen die Proben direkt nach dem Wachstum dar, die gefüllten Symbole die geätzten Proben.

und nach dem Ätzen bestätigt, dass keine Ätzwirkung messbar ist. Daraus lässt sich schließen, dass nach einem Tempersschritt von nur 400 s Länge die Inseln so weit mit Si vermischt sind, dass die Ätzlösung die Inseln nicht mehr angreifen kann. Damit ist klar, dass die Si Vermischung wesentlich schneller abläuft, wenn vergrabene Inseln vorhanden sind. Aufgrund dessen muss auch der Abkühlvorgang der Proben beim Berechnen der Temperzeit berücksichtigt werden. Die maximale Abkühlrate der Proben in der MBE beträgt etwa 1-2 K/s, das heißt, dass auch die Proben, die direkt nach dem Wachstum abgekühlt wurden, effektiv einem kurzen Tempersschritt unterworfen sind. Wie in Kapitel 6 gezeigt wird, kann durch Reduktion der Substrattemperatur um 50 K die Interdiffusion mit Si während des Überwachsens bereits deutlich reduziert werden. Die Si-Interdiffusion in freistehenden Inseln sollte eher stärker reduziert werden, da in diesem Fall die Si Atome nicht aus einem einfallenden Si-Strahl stammen, sondern aus dem Substrat in die Inseln transportiert werden müssen. Daher erscheint das Einberechnen einer zusätzlichen Temperzeit in allen Proben von etwa 50 s als ausreichend, um der durch das Abkühlen verursachten Verlängerung der nominellen Temperzeit Rechnung zu tragen.

In Abbildung 5.9 ist die durchschnittliche Inselhöhe als Funktion der Temperzeit aufgetragen. Die offenen Symbole stehen dabei für die ungeätzten, die gefüllten Symbole für die geätzten Proben. Die Höhen in der Einzelschicht sind durch Kreise, die in der Zweifachschicht durch Quadrate dargestellt. In der ersten Insellage wurde in allen Proben gleich viel Ge abgeschieden. In den Zweifachschichten wurde in der zweiten Lage die Ge Deposition so angepasst, dass die Inseldichte mit der in der ersten Schicht übereinstimmt.

Die Höhe der nicht geätzten Proben bleibt für Temperzeiten bis 24 Stunden konstant. Bei noch längeren Temperzeiten nimmt die Inselhöhe leicht zu, es kann aber nicht ausgeschlossen werden, dass dabei Oberflächenkontaminationen eine Rolle spielen. Die Höhe der geätzten Proben zeigt die Geschwindigkeit, mit der die Si-Vermischung vonstatten geht. Um diese Geschwindigkeit zu quantifizieren, wurde für beide Probenserien ein Diffusionskoeffizient ausgerechnet. Dazu wird als einfaches Modell FICKsche Diffusion an einer Si/Ge Heterogrenzfläche angenommen. Die Si-Konzentration  $C$  nach einer Zeit  $t$  ist gegeben durch

$$C(x, t) = 0,5 \operatorname{erfc}(x / (2\sqrt{Dt})). \quad (5.1)$$

Da die Ätzlösung bei einer Si-Konzentration von 35% und mehr stoppt, entspricht die Höhe der geätzten Inseln der Höhe, an der die Si Konzentration in den Inseln diesen Wert erreicht. Wenn die Konzentration in Gleichung 5.1 als festgelegt betrachtet wird, lässt sich  $x$  als Funktion von  $t$  angeben. Für eine Konzentration  $C_{stop} = 35\%$  ergibt sich

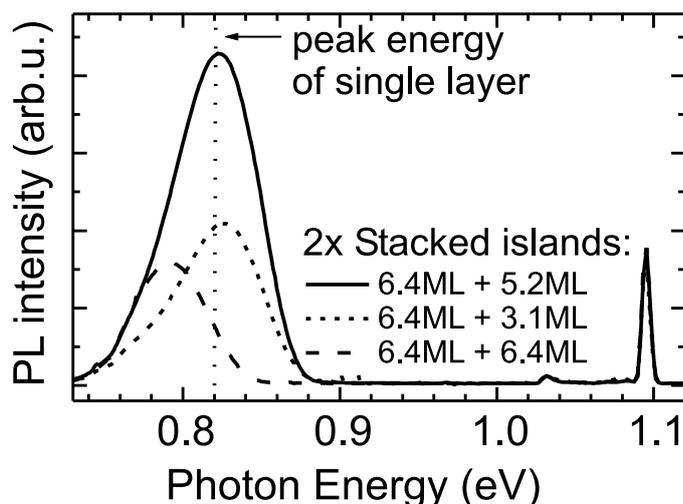
$$x = 2k\sqrt{Dt}, \quad (5.2)$$

wobei  $k \approx 0,2723$  ist. Mit Hilfe der Formel 5.2 kann aus den gemessenen Daten der Diffusionskoeffizient  $D$  bestimmt werden, wobei  $x$  der Höhe der geätzten Inseln und  $t$  der Temperzeit entspricht. In Abbildung 5.9 sind die so berechneten Wurzelfunktionen durch die doppelt logarithmische Auftragung Geraden mit der Steigung 0.5. Der Wert des Diffusionskoeffizienten ist  $D = 1,8 \times 10^{-19} \text{ cm}^2/\text{s}$  für die Einzelschicht und  $D = 7,5 \times 10^{-17} \text{ cm}^2/\text{s}$  für die Zweifachschicht. Durch die vergrabenen Inseln wird die Eindiffusion von Si also um mehr als zwei Größenordnungen beschleunigt.

Für pseudomorphe Schichten wurde eine verspannungsinduzierte Erhöhung der Ge Diffusion berichtet [134, 135, 136, 137, 138]. Durch Interdiffusion kann lokal die Verspannung reduziert werden, aber die durch die Diffusion eines Atoms erreichte Relaxation der Verspannungsenergie ist klein gegenüber typischen Aktivierungsenergien für Diffusionsprozesse [139]. Außerdem ist ein Einfluss der Verspannung auf die Vermischung bei freistehenden Pyramiden nicht nachzuweisen, wie in Kapitel 4 gezeigt wurde. Es erscheint daher nicht konsistent, die Verspannungsrelaxation als treibende Kraft für die beobachtete Vermischung zu betrachten. Eher wahrscheinlich ist es, dass durch die Verspannung das Wachstum der Si Deckschicht und der gestapelten Inseln modifiziert wird. Die vergrabenen Inseln könnten eine lokal höhere Anzahl Punktdefekte induzieren [140, 138]. Da Diffusion in Si [141], Ge [142] und SiGe Legierungen [143, 144, 145] über diese Defekte vermittelt wird, ist eine höhere Interdiffusion die natürliche Folge einer erhöhten Anzahl Punktdefekte.

### 5.2.5 Photolumineszenz

Abb. 5.10 zeigt die PL Spektren von drei Zweifachschichten, in denen die Ge Deposition in der zweiten Insellage variiert wurde. Die erste Insellschicht enthielt in allen Proben 6,4 ML Ge. In der zweiten Schicht wurden 5,2 ML (durchgezogene Linie),



**Abbildung 5.10:** PL Spektren zweifach gestapelter Hut Cluster Inseln. Die Inseldichte in der oberen, zweiten Lage war dabei kleiner (gepunktete Linie), identisch (durchgezogene Linie) oder größer (gestrichelte Linie) als in der unteren, ersten Lage.

3,1 ML (gepunktete Linie) und 6,4 ML (gestrichelte Linie) Ge abgeschieden. Solange die Inseldichte in der zweiten Schicht kleiner (gepunktete Linie) oder gleich (durchgezogene Linie) der Inseldichte in der Einzelschicht ist, befindet sich das PL Maximum an derselben energetischen Position wie das Maximum der einzelnen Insellschicht mit 6,4 ML Ge. Ein Vergleich der PL Spektren mit denen einer Einzelschicht (siehe Abb. 5.2) zeigt, dass die Spektren bemerkenswert ähnlich aussehen, obwohl die Proben strukturell deutlich unterschiedlich sind. Eine Erklärung dafür könnte das Tunneln von Ladungsträgern zwischen den Insellschichten sein. Wie in Abschnitt 5.2.4 gezeigt, sind die Inseln in der oberen Schicht eines Stapels mit Si vermischt. Daher ist der Bandkantensprung in der oberen Insellage kleiner und die Ladungsträger relaxieren vor der Rekombination in die untere Insellage. Da auf diese Weise nur die unterste Insellage in der PL sichtbar ist, ist das Spektrum quasi identisch zu dem einer Einzellschicht Inseln.

Für Dome Inseln wurde blauverschobene PL aus den oberen Lagen eines Inselstapels experimentell beobachtet [110]. Allerdings waren in diesen Experimenten die Si Zwischenschichten 15 nm oder dicker, so dass die Ladungsträger nicht in die untere Insellage tunneln konnten. Bei einer Zwischenschichtdicke von 10 nm wurde auch bei Dome Inseln keine blauverschobene PL mehr gemessen, da in diesem Fall die Ladungsträger tunneln können. Aufgrund der geringeren Dimensionen der Hut Cluster Inseln haben vergrabene Hut Cluster, die mit 15 nm Si oder mehr bedeckt sind, keinen Einfluss auf die nächste Insellschicht. Blauverschobene PL kann daher bei Hut Clustern nicht beobachtet werden.

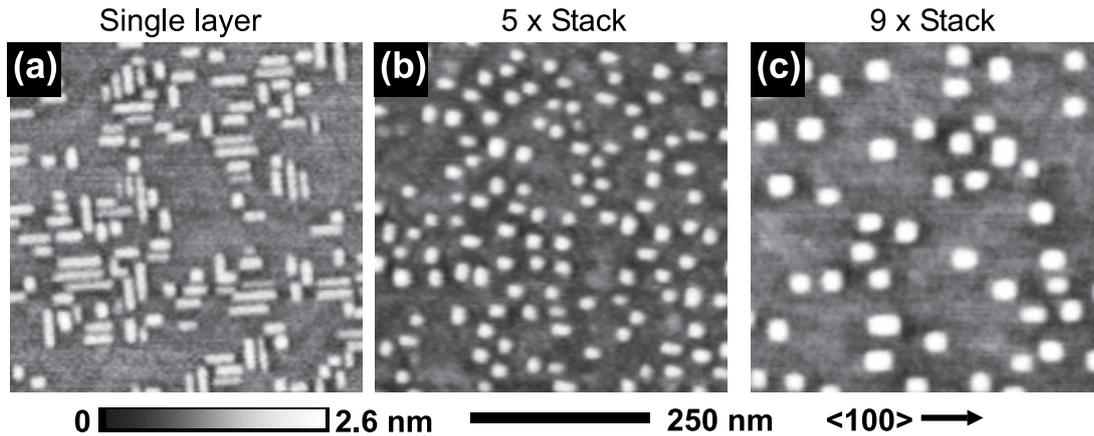
Eine höhere Inseldichte verursacht eine signifikante Rotverschiebung der PL, wie das Spektrum einer Einzellschicht mit 7,4 ML Ge (s. Seite 5.2, Abb. 5.2, gestrichelte Linie) zeigt. Sehr ähnlich diesem Spektrum ist das Spektrum der Zweifachschicht mit 6,4 ML Ge in beiden Lagen (Abb. 5.10, gestrichelte Linie). In beiden Proben wird eine höhere Inseldichte als in der Einzelschicht mit 6,4 ML Ge beobachtet. In der Einzelschicht mit 7,4 ML ist die Dichte höher, weil mehr Ge deponiert wurde, in der Zweifachschicht ist die Inseldichte in der zweiten Lage größer, weil die kritische Schichtdicke reduziert ist. Aufgrund der höheren Inseldichte ist die Interdiffusion mit Si während des Überwachens etwas niedriger, was zu einer Verschiebung der PL zu niedrigeren Energien führt. Die Beobachtung, dass einige freistehende Inseln in der oberen Schicht von vornherein mit Si vermischt sind, steht dazu nicht in Widerspruch. Denn wie in Abb. 5.8 (s. Seite 95) gezeigt wurde, ist die überwiegende Zahl der freistehenden Inseln in der oberen Schicht nicht mit Si vermischt, da keine Vorgänger in der vergrabenen Schicht existieren. Die rotverschobene PL der Zweifachschicht wird daher der oberen Lage zugeordnet.

### 5.3 Mehrfach gestapelte Hut Cluster Inseln

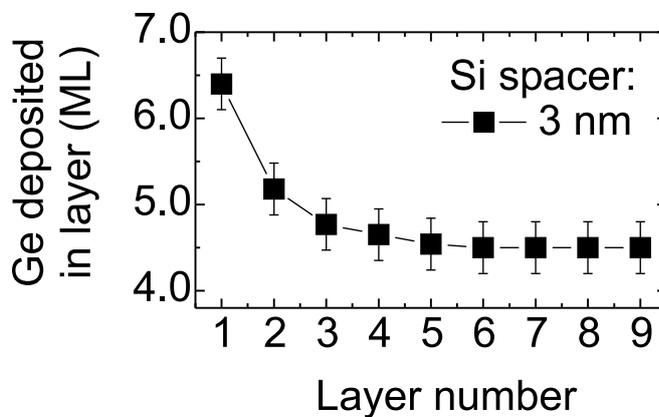
In diesem Abschnitt werden Hut Cluster Inseln untersucht, die in vertikalen Stapeln aus bis zu neun Inselschichten gewachsen wurden. Der Einfluss des Stapelns auf die strukturellen und optischen Eigenschaften der Inseln wird diskutiert. In den Abschnitten 5.3.1, 5.3.2 und 5.3.3 werden Inselstapel untersucht, die mit einer 3 nm dicken Si Zwischenschicht gewachsen wurden. Abschnitt 5.3.4 zeigt den Einfluss verschiedener Zwischenschichtdicken. In Abschnitt 5.3.5 wird ein Modell vorgestellt, das die in gestapelten Inseln beobachtete Reduktion der kritischen Schichtdicke mit der durch vergrabene Inseln erzeugten Verspannung in Zusammenhang bringt.

#### 5.3.1 Strukturelle Messungen und Photolumineszenz

In Abbildung 5.11 werden AFM-Aufnahmen verglichen, in denen die Inseln in bis zu neun Schichten vertikal gestapelt wurden. Die Si Zwischenschicht war dabei immer 3 nm dick. Abbildung 5.11(a) zeigt nochmals eine typische Einzelschicht. Im Vergleich dazu sind in Abb. 5.11(b) eine fünffach gestapelte Schicht und in (c) eine neunfach gestapelte Schicht dargestellt. Man erkennt, dass die gestapelten Inseln im Gegensatz zu der Einzelschicht eine fast quadratische Grundfläche haben, Längen- zu Breitenverhältnisse von mehr als zwei treten in den gestapelten Inseln nicht auf. Dadurch sind in den gestapelten Proben auch die Größenunterschiede zwischen den größten und kleinsten Inseln kleiner als in der Einzelschicht. In der Einzelschicht grenzen viele Inseln direkt aneinander, während andere Bereiche der Oberfläche frei von Inseln sind. Dagegen sind in den gestapelten Proben die Inseln viel gleichmäßiger über die Oberfläche verteilt. Eine solche Homogenisierung der Inselgröße und eine gleichmäßigere Inselverteilung in gestapelten Schichten wurde bereits für Inseln beobachtet, die durch



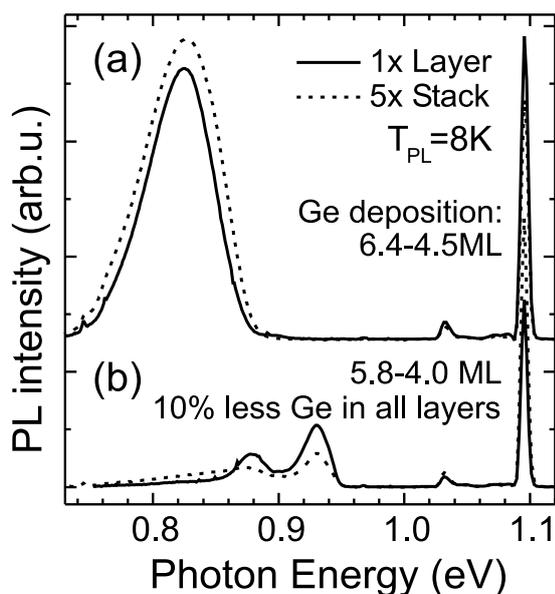
**Abbildung 5.11:** Vergleich von Hut Cluster Inseln, die in (a) einer einzelnen Lage gewachsen wurden, mit (b) fünffach und (c) neunfach gestapelten Inseln.



**Abbildung 5.12:** Ge Deposition, die zum Wachstum gestapelter Inseln mit 3 nm Si Zwischenschichten benutzt wurde.

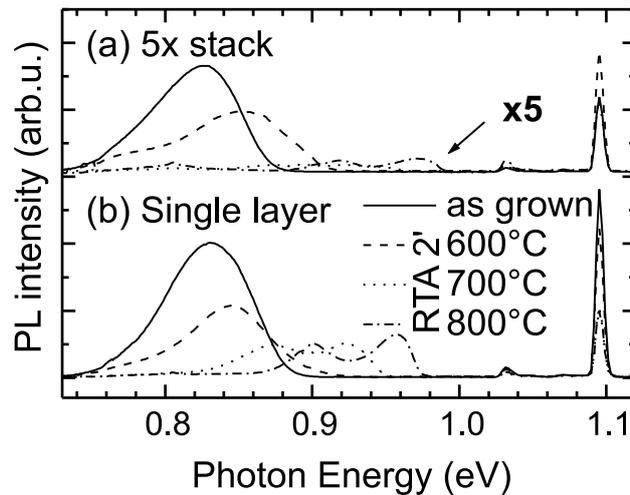
Deposition einer  $\text{Si}_{0.25}\text{Ge}_{0.75}$  Legierung gewachsen wurden [146]. Als Ursache für die Homogenisierung der Inselverteilung wurde die Überlagerung der Verspannungsfelder der vergrabenen Inseln vorgeschlagen. Diese Erklärung lässt sich auch auf das Wachstum von elementarem Ge übertragen, nur dass im hier vorliegenden Fall die Größen der Inseln aufgrund der höheren Verspannung kleiner sind.

Wie die AFM-Aufnahmen zeigen, ist die Inseldichte in allen Proben etwa gleich. Dies konnte nur durch Anpassen der Ge Deposition in jeder Schicht erreicht werden. Wie in Abschnitt 5.2.2 erläutert, ändert sich die kritische Schichtdicke durch das Stapeln der Inseln. Gegenüber einem Zweifachstapel nimmt die kritische Schichtdicke in Mehrfachstapeln noch weiter ab. Mit zusätzlichen Inselstapeln ändert sich die kritische Schichtdicke aber immer weniger, und ab einer Stapelhöhe von etwa fünf Inseln



**Abbildung 5.13:** Photolumineszenzspektren einer Einzelschicht und einer fünf-fach gestapelten Ge Schicht im Vergleich. (a) Photolumineszenz gestapelter Inseln, (b) PL von Benetzungsschichten.

bleibt die kritische Schichtdicke konstant. Die Ge-Deposition in jeder Inselnschicht ist für eine Zwischenschichtdicke von 3 nm Si in Abb. 5.12 aufgetragen. Es wurde in allen Schichten eine definierte Menge Ge mehr (etwa 1 ML) als die kritische Schichtdicke abgeschieden, so dass die angegebene Ge Deposition in allen Schichten eine konstante Inseldichte ergibt. Man erkennt, dass die notwendige Ge Menge zwischen erster und zweiter Insellage stark abnimmt und dann recht schnell eine Sättigung erreicht. Die Photolumineszenzspektren einer fünf-fach gestapelten Ge Schicht wird in Abb. 5.13 mit einer Einzelschicht verglichen. Wie bei den Zweifachschichten ist die in Abb. 5.13(a) gezeigte PL aus den gestapelten Inseln sehr ähnlich zur Einzelschicht. Auch hier ist davon auszugehen, dass die Ladungsträger in die unterste Inselnschicht tunneln, bevor sie rekombinieren. In Abb. 5.13(b) wurde in allen Lagen 10% weniger Ge abgeschieden. Die Schichtdicke liegt in diesem Fall in allen Lagen unterhalb der kritischen Schichtdicke für die Bildung von Hut Cluster Inseln. Die Photolumineszenzspektren zeigen daher die typische Struktur einer pseudomorphen SiGe Schicht: Zwei schmale Maxima, die der dem TO-Phonon assistierten und dem NP Übergang in der Benetzungsschicht zugeordnet werden. Auch hier zeigt sich, dass die Ladungsträger in die unterste Schicht tunneln, da die dünneren Benetzungsschichten in den oberen Lagen des Stapels in der PL nicht sichtbar sind.



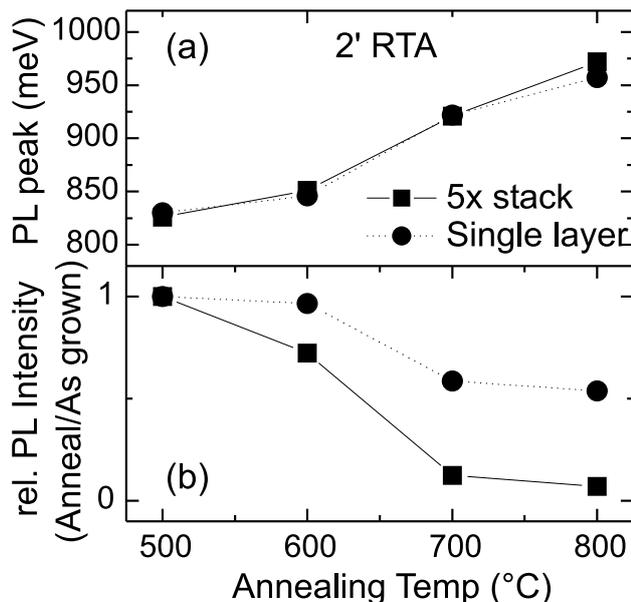
**Abbildung 5.14:** PL Spektren einer (a) Fünffachschicht und einer (b) Einzelschicht vor und nach ausgewählten Temperschritten von zwei Minuten Länge.

### 5.3.2 Temperversuche: Photolumineszenz

Um die Photolumineszenz der einzelnen und gestapelten Hut Cluster Schichten im direkten Vergleich genauer zu untersuchen, wurden diese Proben bei verschiedenen Temperaturen für kurze Zeit getempert. Dabei wurde ein RTA Ofen und Temperaturen zwischen  $600^{\circ}\text{C}$  und  $800^{\circ}\text{C}$  benutzt, die Temperzeiten lagen jeweils bei zwei Minuten. In Abb. 5.14 sind die Spektren gezeigt, die oberen Spektren zeigen die PL einer Fünffach-Schicht, die unteren die PL einer Einzelschicht. Mit steigender Temperatur verschiebt sich die PL zu höheren Energien, da die Inseln sich zunehmend mit dem sie umgebenden Si vermischen. Bei Temperung über  $600^{\circ}\text{C}$  spaltet sich die Lumineszenz in zwei Maxima auf, da die Ge Inseln durch die zunehmende Vermischung den Charakter einer pseudomorphen, inhomogenen SiGe Schicht annehmen [147]. Die Positionen der Maxima in Einzel- und Fünffach-Schicht sind bei gleicher Temperatur nahezu identisch.

Abb. 5.15(a) zeigt die Position des NP Maximums als Funktion der Temperatur des Temperschritts, die Quadrate stellen die Fünffach-Schicht, die Kreise die Einzelschicht dar. Die Messergebnisse der nicht getemperten Proben sind bei der Wachstumstemperatur von  $500^{\circ}\text{C}$  eingetragen. Nur bei  $800^{\circ}\text{C}$  ist eine kleine Differenz in der Position des Maximums erkennbar. Dagegen zeigt sich zwischen Einfach- und Mehrfachschicht ein deutlicher Unterschied in der Intensität der Lumineszenz. Die Lumineszenz der bei  $800^{\circ}\text{C}$  getemperten Fünffach-Schicht wurde um den Faktor fünf auf der Y-Achse gestreckt, damit die PL Maxima erkennbar bleiben.

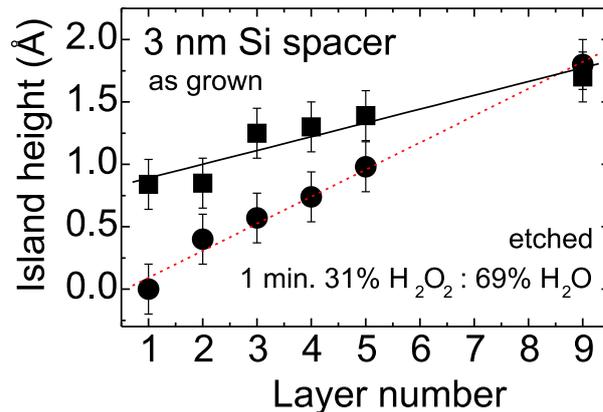
In Abb. 5.15(b) ist die relative PL Intensität der Einzel- und Fünffach-Schicht vor und nach dem Tempern gezeigt. Dazu wurde für jede Probe die PL vor und nach dem



**Abbildung 5.15:** Einfluss eines zweiminütigen Temperschnitts auf die PL einer Einzellige Hut Cluster (Kreise) und eines Fünffach Stapels (Quadrate). Gezeigt ist (a) die Position des PL Maximums und (b) die relative PL Intensität als Funktion der Temperatur.

Temperschnitt gemessen und das integrierte PL Signal im Bereich von 0.7 bis 1 eV ins Verhältnis gesetzt. Während die PL Intensität bei der Einzelschicht nach 800°C Temperung um 46% abnimmt, nimmt sie in der Fünffach-Schicht um 92% ab.

Diese Beobachtungen lassen sich wie folgt erklären: Der grundsätzliche PL-Mechanismus bleibt in allen Proben gleich, die Ladungsträger tunneln weiterhin in die unterste Schicht. In einem Inselstapel ist die Verspannung der untersten Insellage durch die darüber liegenden Inseln erhöht [148]. Daher sollte das Maximum der gestapelten Probe eine größere Blauverschiebung zeigen als die Einzelschicht, falls Verspannung eine Rolle bei der Volumeninterdiffusion spielt. Eine verspannungsinduzierte Erhöhung der Interdiffusion wird in den vergrabenen Inseln aber nicht beobachtet. Die höhere Verspannung in der gestapelten Schicht führt allerdings zu einer höheren Defektdichte [149]. Durch das Stapeln der Inseln überlagern sich die Spannungsfelder und daher kann es sein, dass an vielen Stellen die Verspannung groß genug ist, um die Nukleation eines nichtstrahlenden Defekts zu ermöglichen, sobald durch das Tempern eine ausreichende Aktivierungsenergie dafür vorhanden ist. In der Umgebung eines nichtstrahlenden Defekts wird die Rekombination von Ladungsträgern über diesen Defekt ablaufen, so dass die Lumineszenzintensität sinkt. Die im Vergleich zu einer Einzelschicht geringere Lumineszenz mit steigender Temperatur während des Temperschnitts wird also einer verspannungsinduzierten höheren Defektdichte in den getemperten Proben zugeordnet.



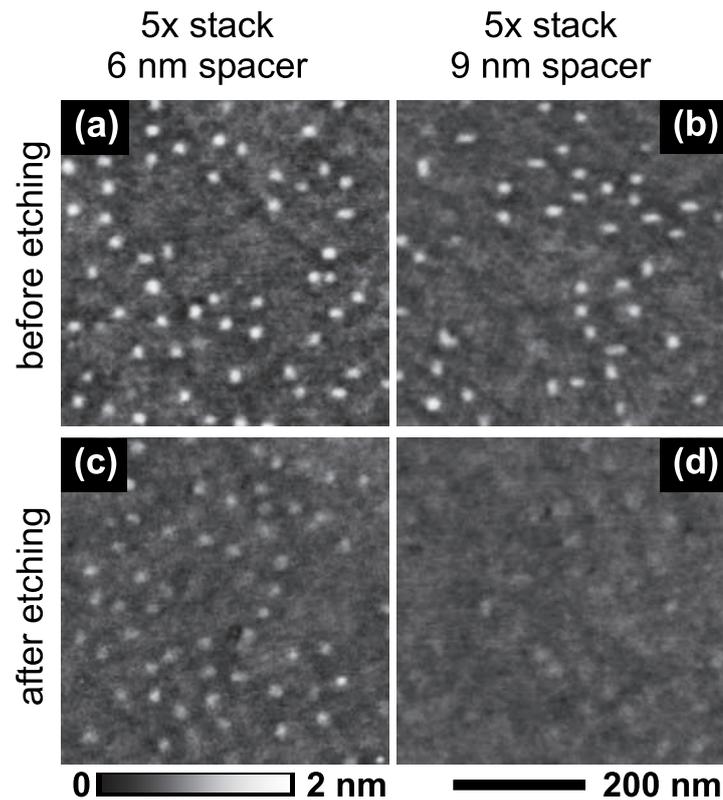
**Abbildung 5.16:** Durchschnittliche Inselhöhe vor (Quadrate) und nach (Kreise) einem Ätzschritt in Wasserstoffperoxid als Funktion der Anzahl gestapelter Inseln.

### 5.3.3 Interdiffusion in Mehrfach-Stapeln

Die Interdiffusion in freistehenden, gestapelten Hut Cluster Inseln wurde durch Ätzen in Wasserstoffperoxidlösung untersucht. Die Ergebnisse sind in Abb. 5.16 zusammengefasst. Die Höhe sowohl der nicht geätzten Inseln (als Quadrate gezeichnet) als auch der geätzten Inseln (Kreise) nimmt mit der Anzahl der gestapelten Insellagen zu [19]. Die durchgezogenen und gestrichelten Linien sind lineare Regressionen durch die Datenpunkte. Beim Neunfach-Stapel werden die Inseln nicht mehr geätzt. Die Inseln vermischen also zunehmend mit Si, je mehr vergrabene Inseln vorhanden sind. Die Zunahme der Inselhöhe bei nicht geätzten Inseln lässt sich ebenfalls mit der zunehmenden Vermischung erklären. Die durchschnittliche Inselgröße von Inseln ohne Versetzungen wächst mit kleiner werdender Gitterfehlpassung  $\varepsilon$  [16], das heißt, eine weniger verspannte Insel kann ein größeres Volumen erreichen. Dies wird sehr gut bei der Deposition von SiGe Legierungen auf Si sichtbar. Wenn kein reines Ge abgeschieden wird, ist die durchschnittliche Inselgröße deutlich größer als im elementaren Si/Ge System [150]. Die vermischten Hut Cluster Inseln sind ähnlich zu den Inseln, bei denen von vornherein SiGe abgeschieden wurde. Daher ist eine Größenzunahme zu erwarten, da die Verspannung durch die Interdiffusion abnimmt und die maximale Inselgröße wächst.

### 5.3.4 Fünffach-Stapel mit verschiedenen Zwischenschichtdicken

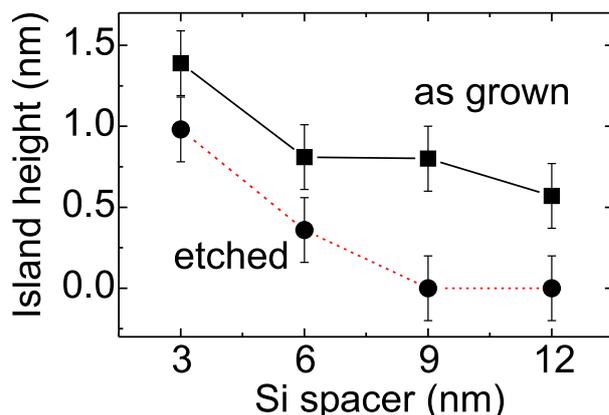
Die zunehmende Vermischung in mehrfach gestapelten Hut-Cluster Inseln wurde in den vorhergehenden Abschnitten der zunehmenden Verspannung durch Überlagerung der Verspannungsfelder vergrabener Inseln erklärt. Da das Verspannungsfeld einer vergrabenen Insel mit zunehmender Deckschichtdicke abnimmt, sollte die Vermischung



**Abbildung 5.17:** AFM-Aufnahmen von fünffach gestapelten Hut Cluster Inseln mit Si Zwischenschichten von (a) 6 nm und (b) 9 nm Dicke. Nach dem Ätzen in Wasserstoffperoxid sind im Stapel (c) mit 6 nm Si Inselreste zu erkennen während die Inseln bei der Probe (d) mit 9 nm Si Schichten verschwunden sind.

auch abnehmen, wenn das Si dicker gewachsen wird. Dies wurde mit einer Probenserie untersucht, in der die Si Zwischenschichtdicke von 3 bis 12 nm variiert wurde. Die Anzahl der Inselstapel wurde hier auf fünf fixiert.

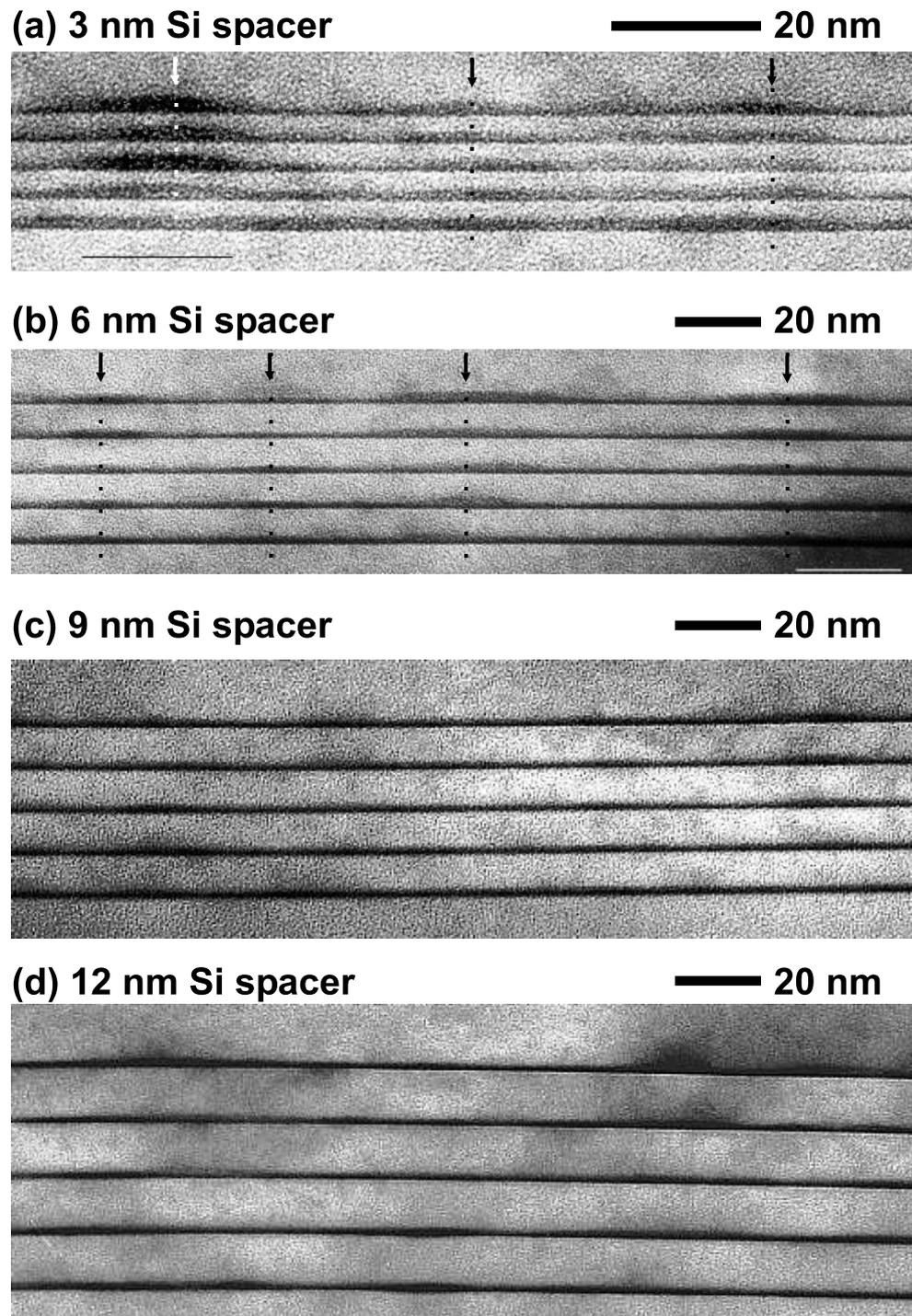
Die AFM-Aufnahmen in Abbildung 5.17 zeigen fünffach gestapelte Hut Cluster Inseln, die durch Si Zwischenschichten von unterschiedlicher Dicke getrennt sind. In Abb. 5.17(a) ist die Si Schicht zwischen aufeinander folgenden Inseln 6 nm dick, in (b) ist sie 9 nm dick. Wie man in der Abbildung sieht, sind die Inseln direkt nach dem Wachstum sehr ähnlich. Dagegen zeigt ein zweiminütiger Ätzschritt in Wasserstoffperoxid, dass die Si Vermischung in den Inseln verschieden ist. Die Probe mit 6 nm Si Zwischenschichten weist nach dem Ätzen noch deutlich sichtbare Inselreste auf (Abb. 5.17(c)). Die Höhe der Inseln ist durch das Ätzen etwa halbiert, trotzdem zeigt dies, dass die Inseln messbar mit Si vermischt sind. Dagegen ist die Oberfläche der Probe mit 9 nm Si Schichten fast glatt (Abb. 5.17(d)). Es sind zwar noch schwach sichtbare Strukturen erkennbar, die von den Inseln stammen könnten, aber eine Inselhöhe ist nicht mehr definierbar. In Abb. 5.18 ist die durchschnittliche Inselhöhe vor



**Abbildung 5.18:** Höhe der Inseln direkt nach dem Wachstum (Quadrate) und nach einem Ätzschritt in Wasserstoffperoxid (Kreise) für fünffach gestapelte Hut Cluster als Funktion der Si Zwischenschichtdicke.

und nach dem Ätzen als Funktion der Si Zwischenschichtdicke aufgetragen. Die Quadrate zeigen die nicht geätzten Inseln, die Kreise nach Ätzen in Wasserstoffperoxid. Man erkennt, dass die Vermischung mit zunehmender Dicke der Si Schicht schnell abnimmt. Schon bei einer Si Schicht von 9 nm sind nach dem Ätzen keine Inseln mehr zu identifizieren. Für Si Schichtdicken von 9 nm ist die Inselhöhe daher Null. Wie in Abschnitt 5.3.3 gezeigt wurde, nimmt die Höhe der nicht geätzten Inseln mit zunehmender Vermischung zu. Bei dem Stapel mit 3 nm Si Zwischenschichten ist die Höhe am größten, mit zunehmender Dicke des Si, und damit gleichzeitig abnehmenden Spannungsfeldern durch vergrabene Inseln, nimmt die Höhe ab. Dieses Ergebnis stützt die in den vorigen Abschnitten vorgestellte Interpretation, dass die Vermischung durch die Spannungsfelder der vergrabenen Inseln beschleunigt wird. Durch das Ätzen konnte in den Proben mit 9 nm Zwischenschichten keine Vermischung nachgewiesen werden, allerdings ist durch das Ätzen in Wasserstoffperoxid auch nur ein signifikanter Si Anteil von etwa 35% nachweisbar. Aus dem Versuchsergebnis kann daher nicht geschlossen werden, dass die Ge Inseln mit 9 nm Si Zwischenschichten überhaupt nicht mit Si vermischt sind. Im Gegenteil, es scheint sehr wahrscheinlich, dass auch die Inseln mit 9 nm Si Schichten vermischt sind, da die durchschnittliche Inselhöhe zu den 12 nm Zwischenschichten hin noch abnimmt. Die Vermischung ist in diesem Fall aber nur indirekt nachweisbar.

Abb. 5.19 zeigt TEM-Aufnahmen der gestapelten Schichten. In der Aufnahme zeigen die Pfeile und die gestrichelten Linien die Position der Inselstapel an. Für Zwischenschichten von 3 und 6 nm ist deutlich eine perfekte vertikale Korrelation der Inseln zu sehen. Die vertikale Korrelation konnte für 3 nm dicke Zwischenschichten auch mittels Ramanspektroskopie gezeigt werden [98]. Diese Messmethode mittelt über eine große Anzahl Inselstapel und stellt damit sicher, dass die im TEM gefundenen Inselstapel repräsentativ für die Probe sind. Wie in Abschnitt 5.2.1 gezeigt wurde,



**Abbildung 5.19:** TEM-Aufnahme fünffach gestapelter Inseln mit Si Zwischenschichten zwischen 3 und 12 nm.

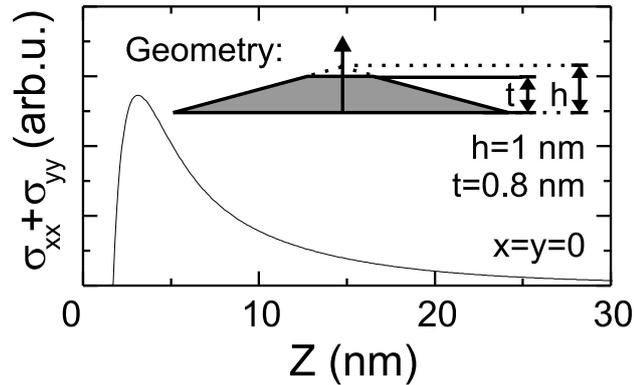
wird die Oberfläche durch eine 3 nm Si Deckschicht planarisiert. Die vertikale Anordnung muss daher durch das Spannungsfeld der vergrabenen Inseln verursacht sein [151]. Die Verspannungsmodulation an der Oberfläche induziert eine bevorzugte Inselnukleation direkt über den vergrabenen Inseln, trotz des großen Einflusses kinetischer Effekte während des Wachstums von Hut Cluster Inseln [129].

Für die dickeren Zwischenschichten lässt sich leider keine eindeutige Aussage treffen, da die Inseln zu schlecht erkennbar sind. Bei Dome Inseln [69, 70, 152] und in großen SiGe Pyramiden [146, 150] wurde eine perfekte vertikale Korrelation bis zu Zwischenschichtdicken von etwa 70 nm [152] beobachtet. Allerdings sind Dome Inseln größer und haben eine geringere Dichte als Hut Cluster Inseln. Das Spannungsfeld einer einzelnen Dome Insel reicht daher wesentlich weiter in das umgebende Substrat als das einer Hut Cluster Insel [132]. Es ist daher plausibel anzunehmen, dass die vertikale Korrelation in gestapelten Hut Cluster Inseln abnimmt, wenn die Zwischenschichten 9 nm oder größer sind.

### **5.3.5 Modellierung der verspannungsinduzierten Reduktion der kritischen Schichtdicke**

Die kritische Schichtdicke, ab der die Inselbildung einsetzt, ändert sich, wenn vergrabene Inseln vorhanden sind. Die Ge Deposition muss daher in gestapelten Inseln für jede Insellage angepasst werden. Die nötigen Ge Schichtdicken für fünfmal gestapelte Inseln mit gleicher Inseldichte wurden in einem Vorversuch ermittelt. Dabei wurde für jede Si Zwischenschichtdicke eine Serie gestapelter Inseln, beginnend bei einem Zweifachstapel, gewachsen und die nötige Ge Deposition in der jeweils obersten Insellage bestimmt. Dazu wurde die Ge Deposition so optimiert, dass das RHEED Bild nach Deposition des Inselstapels möglichst gut mit dem RHEED Bild nach Deposition der ersten Insellage übereinstimmte [153]. Zusätzlich wurden AFM-Messungen an den Proben durchgeführt, da RHEED nicht sehr sensitiv auf die Bildung von Hut Cluster Inseln ist. Mittels Vergleich von STM-Aufnahmen und RHEED Messungen ist gezeigt worden, dass der Beginn des Hut Cluster Wachstums nicht genau mit RHEED bestimmt werden kann [154]. Denn damit die Beugungssignale der Hut Cluster Inseln im RHEED sichtbar werden, muss erst eine gewisse Inseldichte auf der Probenoberfläche vorhanden sein. An ausgewählten Inselstapeln wurde daher anschließend mittels AFM kontrolliert, welche Inseldichte die Proben haben. Es zeigte sich, dass die Inseln die gewünschte konstante Dichte in allen Schichten haben. Eine feste Inseldichte lässt sich also mit RHEED recht gut reproduzieren, auch wenn der Beginn des Inselwachstums und der Absolutwert der Inseldichte damit nicht festgestellt werden kann.

Eine Erklärung für die Reduktion der kritischen Schichtdicke bei Vorhandensein vergrabener Inseln ist, dass das Ge bevorzugt in die Bereiche über einer vergrabenen Inseln diffundiert, in denen das Si dehnungsverspannt ist [155] und sich dort dann eher ein kritischer Nukleus für eine Insel bildet, weil lokal mehr Ge vorhanden ist [146]. In diesem Fall sollte die gemessene Reduktion der kritischen Schichtdicke von der



**Abbildung 5.20:** Verspannung parallel zur Pyramidenbasisfläche, berechnet für eine abgeschnittene Pyramide. Die Geometrie der Pyramide und die gezeigte Schnittlinie ist im Einsatz skizziert.

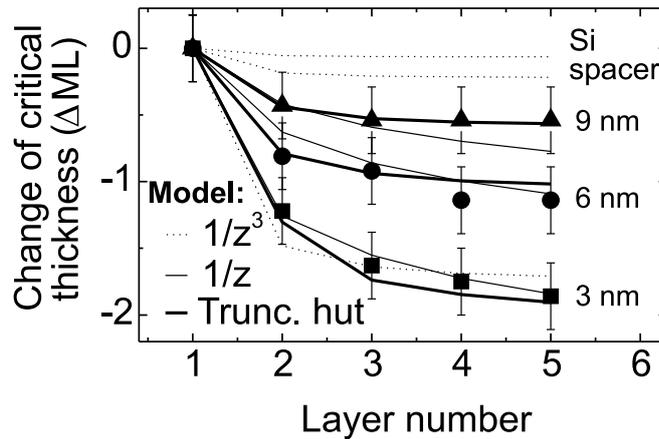
Verspannung an der Oberfläche abhängen. Um dies zu überprüfen, wurde ein Modell aufgestellt, das die kritische Schichtdicke als Funktion der tangentialen Verspannung der vergrabenen Inseln beschreibt, und getestet, ob die experimentellen Daten mit diesem Schichtdickenmodell in Übereinstimmung gebracht werden können. Wie in den Abschnitten 5.3.3 und 5.3.4 gezeigt, haben die Inseln in den Stapeln eine unterschiedliche Komposition.

Das Schichtdickenmodell berücksichtigt daher auch eine verspannungsinduzierte Vermischung der Inseln. Die Verspannung  $s_n$ , die auf eine Insel wirkt, unter der sich  $n$  vergrabene Inseln befinden, wird wie folgt berechnet:

$$s_n = \sum_{k=1}^n b_k \sigma_{||}(z).$$

Dabei ist  $\sigma_{||}(z)$  die tangentialen Verspannung  $\sigma_{||}$  durch eine Ge Insel in der Tiefe  $z$ . Der Koeffizient  $b_k$  ist definiert als  $b_1 = 1$  und  $b_k = (1 - cs_{k-1})$  für  $k > 1$ . Damit wird die beobachtete Si Vermischung der Ge Inseln einbezogen, die die Verspannung verglichen mit puren Ge Inseln reduziert. Die Vermischung der Insel  $k$  hängt von der Verspannung ab, die während des Wachstums dieser Insel galt. Die Definition von  $b_k$  ist deswegen rekursiv, da die Verspannung der obersten Insel von der Vermischung der vergrabenen Inseln abhängt. Die Relation zwischen Verspannung und Vermischung ist durch einen freien Parameter  $c$  gegeben, der für alle  $b_k$  gleich ist. Es wird angenommen, dass die Änderung der kritischen Schichtdicke  $\Delta d_{crit,n+1}$  in der Lage  $n+1$  linear von der Verspannung  $s_n$  durch die vergrabenen Inseln abhängt, das heißt  $\Delta d_{crit,n+1} = as_n$ , wobei  $a$  ein freier Parameter ist.

Für die konkrete Rechnung wird die Verspannung  $\sigma_{||}$  tangential zur Oberfläche direkt über einer vergrabenen Insel als Funktion der Si Zwischenschichtdicke benö-



**Abbildung 5.21:** Experimentelle Daten zur Reduktion der kritischen Schichtdicke in gestapelten Inseln mit Si Zwischenschichtdicken von 3 nm (Quadrats), 6 nm (Kreise) und 9 nm (Dreiecke). Die Kurven zeigen die berechnete Änderung der kritischen Schichtdicke für drei verschiedene Verspannungsmodelle, deren Parameter an die experimentellen Daten für 3 nm Schichtdicke angepasst wurden.

tigt. Hierfür werden drei verschiedene Verspannungsmodelle aus der Literatur benutzt, die für unterschiedliche Geometrien vergrabener Inseln entwickelt wurden. Das erste Verspannungsmodell ist aus der Kontinuumsmechanik abgeleitet und gilt für eine Punktquelle oder eine sphärische Insel in einem elastischen Medium. In diesem Fall skaliert die Verspannung  $\sigma_{||} \sim 1/z^3$  [155, 156]. Das zweite Verspannungsmodell benutzt eine  $\sigma_{||} \sim 1/z$  Skalierung, die von Makeev [26] für eine pyramidenförmige Insel berechnet wurde. Es ist unwahrscheinlich, dass die Hut Cluster die ideale Form einer Pyramide mit  $\{105\}$  Facetten während des Überwachsens bei  $500^\circ\text{C}$  behalten [67], wie in den Abschnitten 5.2.1 und 6.1 ausführlicher diskutiert wird. Daher wurde als drittes Verspannungsmodell die Verspannung einer abgeschnittenen Pyramide berechnet. Dazu wurde zunächst mit der von FAUX und PEARSON [34] entwickelten Methode die durch die Pyramide verursachte Verzerrung  $\epsilon_{kl}$  berechnet. Anschließend wurde die tangentielle Verspannung  $\sigma_{||} = \sigma_{xx} + \sigma_{yy}$  mit der Relation  $\sigma_{ij} = c_{ijkl}\epsilon_{kl}$  und den elastischen Konstanten  $c_{ijkl}$  für Si aus der berechneten Verzerrung abgeleitet. Die berechnete Geometrie war ein Pyramidenstumpf mit  $11,3^\circ$  geneigten Seitenkanten, dies entspricht  $\{105\}$  Facetten an den Kanten und einer  $\{100\}$  Facette an der Oberseite. In der kompletten Pyramide hätte die Spitze eine Höhe  $h = 1$  nm, der Pyramidenstumpf ist auf einer Höhe von  $t = 0,8$  nm abgeschnitten.

Die Verspannung des Si Substrats in der Umgebung der Insel ist in Abb. 5.20 aufgezeichnet. Gezeigt ist die tangentielle Verspannung  $\sigma_{||}$  entlang einer Linie durch das Zentrum der Pyramide. Die Schnittlinie ist im Einsatz, der die berechnete Geometrie illustriert, mit einem Pfeil eingezeichnet.

Die Parameter des Schichtdickenmodells wurden so angepasst, dass die Übereinstimmung zwischen berechneter und gemessener Änderung der kritischen Schichtdicke für eine Si Zwischenschicht von 3 nm möglichst gut war. Die Anpassung wurde für alle drei Verspannungsmodelle durchgeführt, die Ergebnisse sind in Abb. 5.21 zusammen mit den experimentellen Daten gezeigt. Änderungen in der kritischen Schichtdicke wurden nur bis zu einer Si Zwischenschichtdicke von 9 nm gemessen. Die experimentellen Daten für 3, 6 und 9 nm Si Schichten sind als Quadrate, Kreise und Dreiecke eingezeichnet, die  $1/z^3$  Skalierung ist als dünne gepunktete Linie, die  $1/z$  Skalierung als dünne durchgezogene Linie und das Pyramidenstumpf-Modell als dicke durchgezogene Linie gezeigt.

Es ist offensichtlich, dass die  $1/z^3$  Skalierung nicht mit den experimentellen Ergebnissen übereinstimmt. Für die 3 nm Si Zwischenschichten sagt dieses Modell eine sehr große Änderung der kritischen Schichtdicke zwischen erster und zweiter Insellage und dann nur noch sehr geringe Änderungen mit zunehmender Anzahl gestapelter Inseln voraus. Die experimentellen Ergebnisse deuten dagegen auf eine graduelle Sättigung mit zunehmender Anzahl Inselstapel hin. Für dickere Si Schichten sagt die  $1/z^3$  Skalierung nur minimale Änderungen der kritischen Schichtdicke voraus, ein klarer Widerspruch zum Experiment. Die  $1/z$  Skalierung produziert für kleinere Si Zwischenschichten akzeptable Resultate. Die graduelle Abnahme der kritischen Schichtdicke für 3 nm und 6 nm Si Schichten wird hier gut wiedergegeben. Für eine Si Schichtdicke von 9 nm sagt das Modell ebenfalls eine graduelle Abnahme der kritischen Schichtdicke voraus, die im Experiment aber nicht beobachtet wird. Das Pyramidenstumpfmodell ergibt für alle Messpunkte eine etwas bessere Übereinstimmung mit dem Experiment. Obwohl die Übereinstimmung besser ist, wenn die realistische Geometrie eines Pyramidenstumpfs benutzt wird, zeigt der Vergleich doch, dass die einfache  $1/z$  Skalierung für die Interpretation experimenteller Daten nützlich sein kann. Insbesondere für Si-Schichtdicken, deren Größenordnung vergleichbar mit der Inselhöhe ist, liefert diese einfache Skalierung eine sehr gute Übereinstimmung.

## 5.4 Zusammenfassung dieses Kapitels

In diesem Kapitel wurde die Interdiffusion in Hut Cluster Inseln untersucht, die bei einer Temperatur von 500°C gewachsen wurden. In freistehenden Inseln konnte eine messbare Interdiffusion mit Si erst nach langem Tempern beobachtet werden. Daraus lässt sich schlussfolgern, dass diese Inseln direkt nach dem Wachstum aus reinem Ge bestehen. Wenn sich unter einer freistehenden Insel eine mit einer dünnen Si Deckschicht vergrabene Insel befindet, ist die Interdiffusion stark erhöht. Experimentell wurde für eine 3 nm Si Zwischenschicht eine Erhöhung des Diffusionskoeffizienten um zwei Größenordnungen nachgewiesen. Diese Interdiffusion steigt mit der Anzahl gestapelter Inseln ab und nimmt mit zunehmender Dicke der Si Zwischenschicht ab. Wegen der Vermischung der Inseln in den oberen Lagen eines Stapels ist in Photolumineszenzmessungen nur die unterste Insellage direkt sichtbar.

In gestapelten Inseln wird eine reduzierte kritische Schichtdicke für die Inselbildung beobachtet. Die Reduktion der kritischen Schichtdicke lässt sich mit der durch die vergrabenen Inseln generierten Verspannung korrelieren. Dazu muss allerdings die Geometrie der vergrabenen Inseln berücksichtigt werden. Eine Modellierung als punktförmige bzw. sphärische Verspannungsquelle ist nicht ausreichend, dagegen führt die Annahme der Form einer Pyramide oder eines Pyramidenstumpfs zu einer akzeptablen Übereinstimmung zwischen Modell und Experiment.

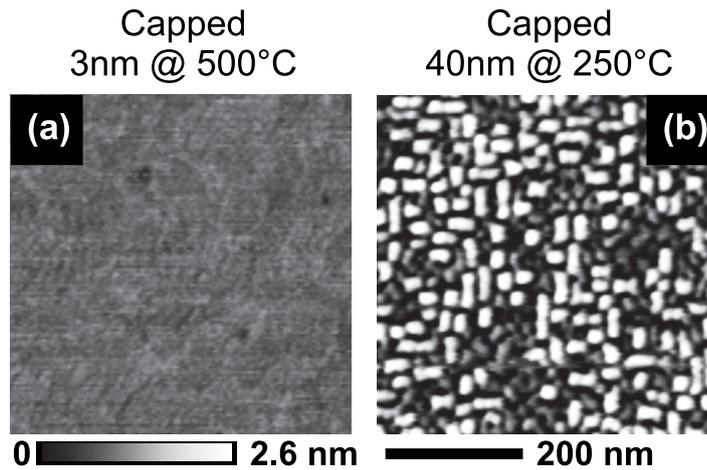
## Kapitel 6

# Reduzierte Interdiffusion in selbstorganisierten Inseln durch Überwachsen bei verminderter Substrattemperatur

Wie in Kapitel 5 gezeigt wurde, sind freistehende Hut Cluster Inseln direkt nach dem Wachstum nicht mit Si vermischt. Die fundamentalen optoelektronischen Eigenschaften von Ge Inseln werden normalerweise anhand von Inseln untersucht, die in einer Si Matrix eingeschlossen sind. Für diese Messungen müssen die freistehenden Inseln mit einer Si Deckschicht überwachsen werden. Bei diesem Schritt kann es auch zur Interdiffusion mit Si kommen. Daher wird im Abschnitt 6.1 zunächst der Einfluss der Substrattemperatur während des Deckschichtwachstums auf die strukturellen Eigenschaften der Hut Cluster untersucht. In Abschnitt 6.2 wird die PL von Proben verglichen, die bei verschiedenen Temperaturen überwachsen wurden [157]. Es zeigt sich, dass die Inseln stark mit Si vermischen, wenn die Substrattemperatur nicht vor dem Bedecken der Inseln abgesenkt wird. Die anfängliche Temperatur während des Wachstums der Deckschicht hat entscheidenden Einfluss auf die Energie, bei der die Inseln emittieren. In Abschnitt 6.3 wird gezeigt, dass die bei niedriger Deckschichttemperatur gefundene Lumineszenzenergie in guter Übereinstimmung mit den Voraussagen theoretischer Modelle für diese Inseln ist. In Abschnitt 6.4 wird gezeigt, dass, auch wenn das Inselwachstum bei höheren Temperaturen abläuft, die Substrattemperatur beim Überwachsen eine wichtige Rolle spielt.

### 6.1 Strukturelle Messungen an Hut Cluster Inseln

Die Oberflächenmorphologie nach dem Überwachsen von Ge Hut Clustern mit Si ist sehr stark von der Temperatur während des Si Wachstums abhängig, wie Abb. 6.1 zeigt. In Abb. 6.1(a) ist eine AFM-Aufnahme gezeigt, die die Oberfläche einer Probe

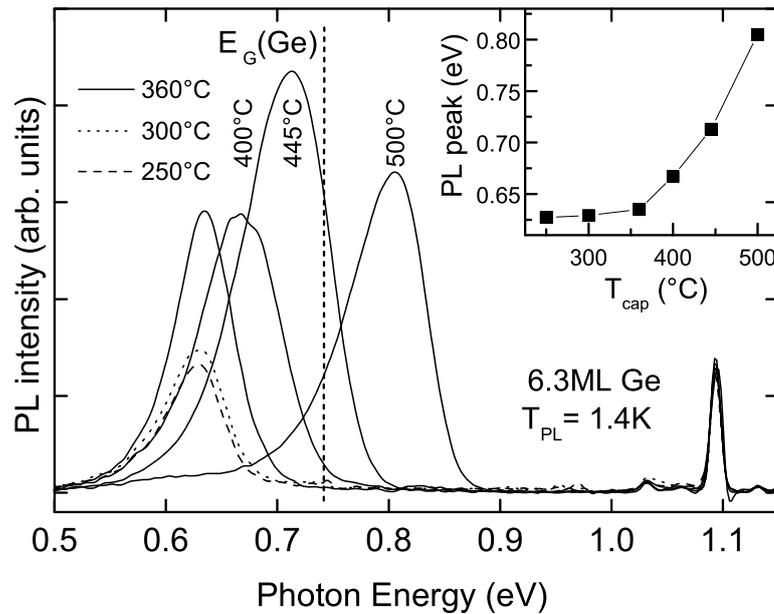


**Abbildung 6.1:** AFM-Aufnahmen von Hut Cluster Inseln, die bei (a) 500°C und (b) 250°C überwachsen wurden.

zeigt, in der die Hut Cluster mit 3 nm Si bei 500°C überwachsen wurden. Auf der Aufnahme sind keine Spuren der Inseln zu sehen und wie in Abschnitt 5.2.1 gezeigt, ist die Oberfläche von ähnlicher Rauigkeit wie nach dem Wachstum einer dicken Si Schicht bei 500°C. Ganz anders sieht dagegen die Oberfläche aus, wenn das Si bei 250°C deponiert wurde. In Abb. 6.1(b) wurden 40 nm Si abgeschieden, trotzdem sind die Formen der Hut Cluster Inseln im AFM deutlich erkennbar. Die durchschnittliche Höhe der Si Strukturen ist vergleichbar mit der Höhe der freistehenden Ge Inseln. Diese Ergebnisse zeigen, dass die Diffusionslänge des Si bei dieser Temperatur so klein ist, dass die Si Schicht nicht mehr planarisiert, sondern an allen Stellen mit gleicher Dicke wächst. Dadurch wird das Oberflächenprofil der vergrabenen Inseln trotz der großen Si-Schichtdicke konserviert. Dies lässt erwarten, dass die Interdiffusion zwischen den Ge Hut Clustern und dem ankommenden Si bei dieser Wachstumstemperatur sehr klein sein wird.

## 6.2 Photolumineszenz von Hut Cluster Inseln

In diesem Abschnitt werden PL-Messungen an Hut Cluster Inseln vorgestellt, die bei verschiedenen Temperaturen mit Si überwachsen wurden. Die Hut Cluster selbst wurden in einem zweistufigen Prozess gewachsen, der zu einer höheren Lumineszenzintensität führt [158]. Dazu wurden zunächst die ersten 2,6 ML der Benetzungsschicht bei einer Substrattemperatur von 360°C gewachsen, dann wurde die Substrattemperatur auf 500°C erhöht und weitere 2,2–3,7 ML Ge deponiert. Die benutzten Substrattemperaturen beim Überwachsen mit Si lagen zwischen 250°C und 500°C. Vor dem Si Wachstum wurde eine Wachstumspause eingelegt, um das Substrat auf der gewünschten Temperatur zu stabilisieren. Diese Pause betrug 400 s für die Inseln, die bei 360°C

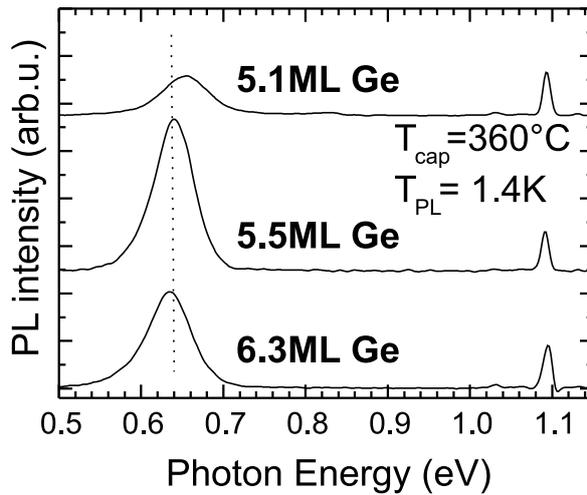


**Abbildung 6.2:** PL Spektren von Hut Cluster Inseln, die bei 250°C bis 500°C überwachsen wurden. Einsatz: Position der maximalen PL Intensität als Funktion der Deckschichttemperatur.

bis 500°C überwachsen wurden, und 800 s für die Inseln, die bei 250°C und 300°C überwachsen wurden. Aus Gründen der Vergleichbarkeit wurde eine Wachstumspause auch bei der Probe eingelegt, in der die Substrattemperatur konstant gehalten wurde. Der Vergleich mit den in Abschnitt 5.1 vorgestellten Spektren zeigt aber, dass diese Wachstumspause keinen wesentlichen Effekt auf die PL hat.

### 6.2.1 Einfluss der Substrattemperatur während des Überwachens

In Abb. 6.2 sind die bei 1,4 K gemessenen PL Spektren zusammengefasst. Alle Spektren wurden normiert, dabei wurde die Intensität der TO-Phonon Linie des Si Substrat bei 1,097 eV als Referenz genommen. Die bei einer Temperatur von 500°C überwachsene Probe zeigt ein breites Maximum bei 0,8 eV, der den Inseln zugeordnet wird (vgl. Kap. 5.1). Die Halbwertsbreite des Maximums (engl. full width at half maximum, FWHM) ist 70 meV. Mit sinkender Deckschichttemperatur verschiebt sich die Insellumineszenz systematisch zu niedrigeren Energien. Die maximale Intensität liegt schon für eine Deckschichttemperatur von 445°C unterhalb der Ge Bandkante im Volumenkristall (0,74 eV bei 1,4 K Messtemperatur). Bei Deckschichttemperaturen unter 360°C werden nur noch minimale Verschiebungen beobachtet und das Lumineszenzmaximum sättigt bei 0,63 eV oder 1,96  $\mu\text{m}$  bei einer FWHM von 56 meV. Bei jeder



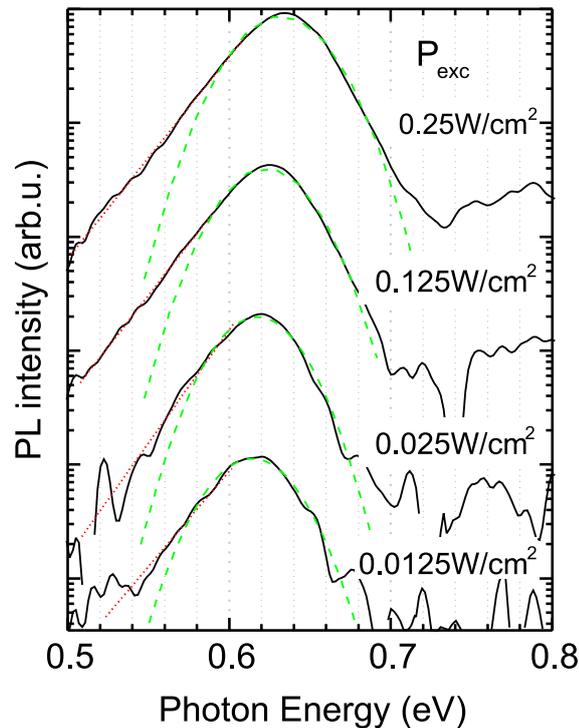
**Abbildung 6.3:** PL Spektren dreier Proben mit Hut Cluster Inseln, in denen die Ge Deposition variiert wurde. Alle Proben sind bei  $360^\circ\text{C}$  überwachsen.

Deckschichttemperatur wurden mehrere Proben untersucht, in denen die Ge Schichtdicke zwischen 5,4 und 6,3 ML variierte. Dabei wurde beobachtet, dass die Lumineszenz sich mit zunehmender Ge Schichtdicke zu niedrigeren Energien hin verschiebt, maximal etwa um 30 meV. Abbildung 6.3 zeigt drei Proben, die bei  $360^\circ\text{C}$  überwachsen wurden und in denen unterschiedlich viel Ge abgeschieden wurde. Das PL Maximum liegt bei der Probe mit 5,1 ML Ge bei 0,66 eV, die Probe mit 5,5 ML hat ihr Maximum bei 0,64 eV und die Probe mit 6,3 ML zeigt maximale Lumineszenz bei 0,63 eV.

Die Lumineszenzmaxima der beiden bei  $250^\circ\text{C}$  und  $300^\circ\text{C}$  gewachsenen Proben sind signifikant kleiner als die der anderen Proben. Dieser Intensitätsunterschied wird der langen Wachstumsunterbrechung zugeordnet, die zum Erreichen dieser außergewöhnlich niedrigen Substrattemperaturen nötig war. Die niedrigen Wachstumstemperaturen selbst haben nur einen geringen Einfluss, denn der Intensitätsunterschied zwischen der Probe, die bei  $250^\circ\text{C}$  überwachsen wurde, und derjenigen, die bei  $300^\circ\text{C}$  überwachsen wurde, ist nur klein.

### 6.2.2 Laseranregungsabhängige PL

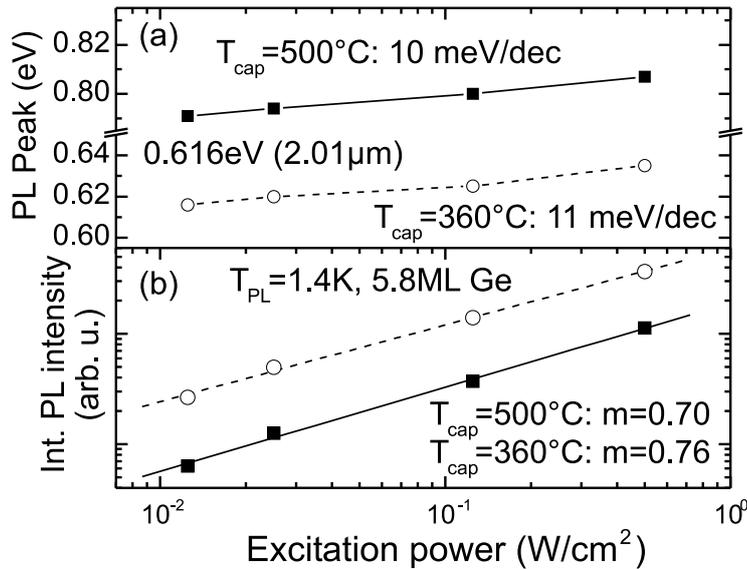
Abb. 6.4 zeigt die PL einer bei  $360^\circ\text{C}$  überwachsenen Probe bei verschiedenen Laseranregungsdichten. Mit zunehmender Laserleistung verschiebt sich das PL Maximum zu höheren Energien. Diese Blauverschiebung wurde sowohl bei SiGe Quantentopfstrukturen [81] als auch bei selbstorganisierten SiGe Inseln [55] beobachtet und wird durch einen Typ-II Bandverlauf an den Si/SiGe Grenzflächen erklärt. Durch den Typ II Verlauf sind die Ladungsträger an unterschiedlichen Stellen im Ortsraum lokalisiert.



**Abbildung 6.4:** PL Spektren einer bei 360°C überwachten Probe bei Anregungsdichten zwischen 12.5 mW/cm<sup>2</sup> und 0.5 W/cm<sup>2</sup>.

Diese Trennung der Ladungsträger induziert bei höheren Anregungsdichten eine Bandverbiegung, die wiederum dazu führt, dass die Rekombinationsenergie größer wird. Eine Blauverschiebung kann auch beobachtet werden, wenn höhere angeregte Zustände zur Lumineszenz beitragen. In diesem Fall müsste die Halbwertsbreite der Lumineszenz aber zunehmen, da die niedrigsten Zustände ja weiterhin emittieren. Wie Abb. 6.4 zeigt, nimmt die Breite des Maximums bei den vorliegenden Proben mit zunehmender Anregung nicht zu. Daher wird die Blauverschiebung Bandbiegungseffekten zugeordnet.

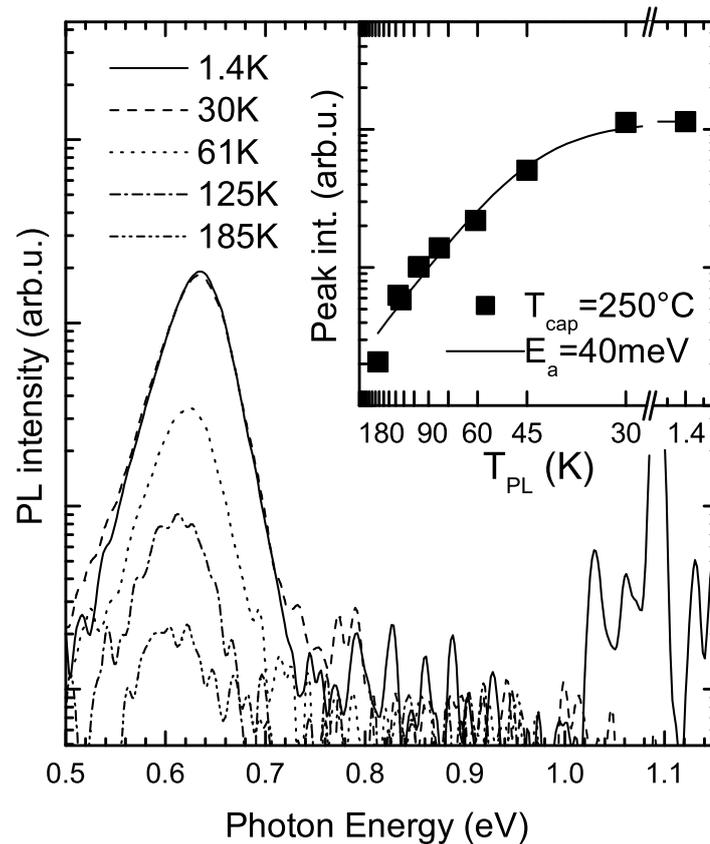
Bei der niedrigsten Anregungsdichte liegt das Lumineszenzmaximum bei 616 meV bzw. 2,01  $\mu\text{m}$ . Die gestrichelten Linien sind Gaußfunktionen, die an die PL Maxima angefitet wurden. Im Bereich oberhalb des Maximums ist die Übereinstimmung zwischen gefitteter Funktion und PL Spektrum sehr gut, im niederenergetischen Bereich gibt es eine systematische Abweichung vom gaußförmigen Verlauf. Hier nimmt die Intensität exponentiell ab. Diese Asymmetrie des PL Maximums wird bei allen Deckschichttemperaturen (vgl. Abb. 6.2) beobachtet und ist auch unabhängig von der Temperatur während der PL-Messung (vgl. Abb. 6.6). Messungen an Hut Cluster Inseln aus anderen Probenserien zeigen ebenfalls denselben Verlauf. Die Asymmetrie



**Abbildung 6.5:** (a) Position des PL Maximums und (b) integrierte Intensität als Funktion der Laseranregung.

muss also eine intrinsische Eigenschaft der PL des Inselensembles sein. Zur Zeit kann nur eine spekulative Erklärung für diese Asymmetrie gegeben werden: Die Lokalisierung der Ladungsträger ist hauptsächlich durch die Höhe der Inseln bestimmt. Mit Auswertung von AFM-Aufnahmen konnte bestätigt werden, dass die Höhenverteilung ungefähr einer Gaußverteilung folgt. Zusätzlich gibt es aber noch eine laterale Lokalisierung in den Inseln. Die Breite der Inseln ergibt sich aus der Inselhöhe, da die Inseln von  $\{105\}$  Facetten begrenzt sind. Die Länge der Inseln dagegen hängt nicht von der Höhe ab, sondern variiert wegen der Elongation der Inseln über einen großen Bereich. Für stark elongierte Inseln sind die Ladungsträger in Richtung der Insellänge praktisch nicht lokalisiert, während für quadratische Inseln ein Beitrag der Insellänge zur Lokalisierungsenergie zu erwarten ist. Die Verbreiterung des PL-Maximums zu niedrigeren Energien hin wird daher der Lumineszenz elongierter Inseln zugeordnet, die verglichen mit quadratischen Inseln einen kleineren Lokalisierungsenergie für die Ladungsträger haben und daher bei niedrigeren Energien emittieren.

In Abb. 6.5 ist die Position des Maximums und die integrierte Intensität des PL Signals zwischen 0,5 und 1 eV als Funktion der Laseranregungsdichte aufgetragen. Die Datenpunkte der bei  $360^\circ\text{C}$  überwachsenen Probe sind als offene Kreise gezeichnet. Im Vergleich dazu sind die Daten der bei  $500^\circ\text{C}$  überwachsenen Referenzprobe als gefüllte Quadrate eingezeichnet. Mit zunehmender Anregungsdichte schiebt die Position des Maximums 11 meV pro Dekade zu höheren Energien, die entsprechende Verschiebung der Referenzprobe ist praktisch identisch. Die Gesamtintensität zeigt eine sublineare Abhängigkeit von der Anregungsleistung. Der Kurvenfit mit einer Funktion  $x^m$  ergibt einen Exponenten von  $m=0.7$  für die Referenzprobe und  $m=0.76$  für die bei  $360^\circ\text{C}$

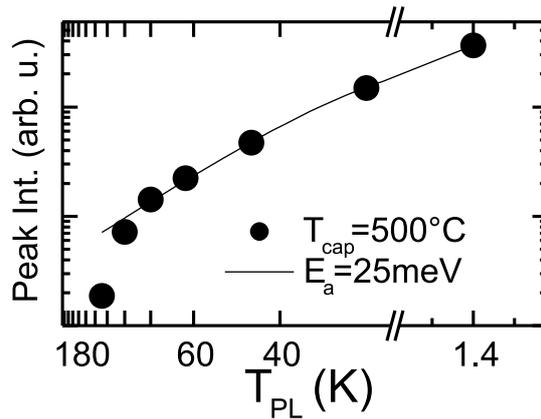


**Abbildung 6.6:** PL Spektren einer bei 250°C überwachten Probe bei verschiedenen Temperaturen zwischen 1,4 K und 185 K. Einsatz: Integrierte PL Intensität als Funktion der Temperatur und daran angepasste Kurve, aus der eine Anregungsenergie von 40 meV abgeleitet wurde.

überwachte Probe. Diese Exponenten sind vergleichbar mit denen, die für Dome Inseln gefunden wurden [159, 160, 161]. Wenn die PL durch konkurrierende Auger-Rekombinationsprozesse beschränkt ist, ist ein Exponent von 0,66 zu erwarten [85]. Andererseits nimmt die Lumineszenz von Ge-Inseln bei extrem niedriger Anregungsdichte linear mit der Anregungsleistung zu, da keine Augerrekombination möglich ist, wenn nur ein einziges Elektron-Loch Paar an einer Insel lokalisiert ist. Es ist zu vermuten, dass die hier benutzten Anregungsdichten in einem Übergangsbereich liegen und bei höherer Anregung die PL durch Augerprozesse begrenzt ist.

### 6.2.3 PL-Messungen im Temperaturbereich 1,4K-185K

Abbildung 6.6 zeigt die PL-Spektren einer Messreihe, in der die Temperatur während der Messung von 1,4 K bis 185 K variiert wurde. Die Inseln zeigen eine messbare



**Abbildung 6.7:** Integrierte PL Intensität der bei  $500^\circ\text{C}$  überwachsenen Referenzprobe als Funktion der Temperatur.

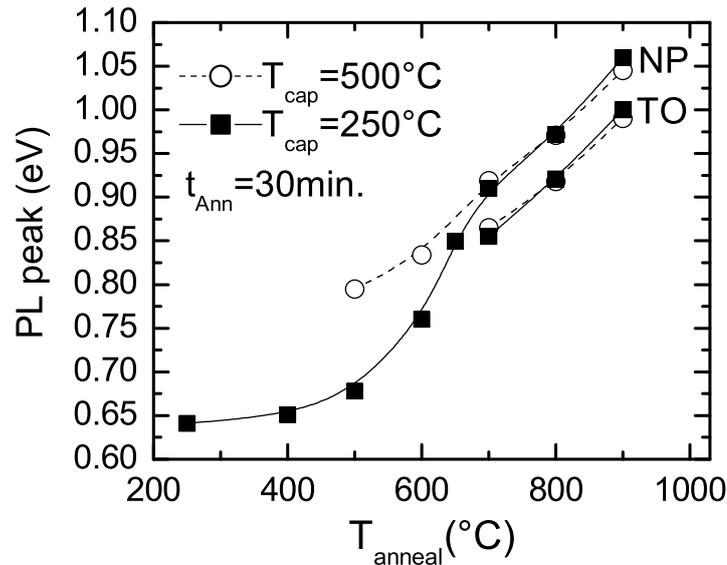
PL bis zu einer Temperatur von 185 K, während das Signal des Si-Substrats schon bei Temperaturen über 30 K nicht mehr detektiert wird. Das PL-Maximum verschiebt sich zwischen 1,4 K und 185 K um etwa 25 meV zu niedrigeren Energien hin. Die integrierte PL-Intensität der Inseln zwischen 0,5 und 1 eV ist im Einsatz von Abb. 6.6 als Funktion der Temperatur eingezeichnet. Die Abnahme der Intensität wurde mit der Formel

$$I(T_{PL})/I(0) = (1 + C \exp(-E_a/kT_{PL}))^{-1}$$

gefittet, die Übergänge zwischen zwei Zuständen in quasi-thermischem Gleichgewicht beschreibt, die durch eine Energie  $E_a$  getrennt sind. Die beiden beteiligten Zustände sind im hier vorliegenden Fall ein gebundener Zustand, bei dem ein Exziton an der Insel lokalisiert ist, und ein freier Zustand, bei dem kein gebundenes Exziton an der Insel vorliegt. Die weiteren Variablen der Formel haben folgende Bedeutung:  $I(0)$  bezeichnet die Anfangsintensität der PL,  $I(T_{PL})$  bezeichnet die Intensität bei der Temperatur  $T_{PL}$ , und  $C$  ist eine Konstante, die das effektive Verhältnis zwischen strahlenden und nicht strahlenden Übergängen angibt. Die aus der Formel abgeleitete Aktivierungsenergie beträgt 40 meV. Für die in Abb. 6.7 gezeigte Referenzprobe, die bei  $500^\circ\text{C}$  überwachsen wurde, beträgt die entsprechende Aktivierungsenergie nur 25 meV.

#### 6.2.4 PL-Messungen an getemperten Proben

In einer weiteren Versuchsreihe wurde die thermische Stabilität der Hut Cluster Lumineszenz untersucht. Dazu wurden zwei Serien mit Proben bei Temperaturen zwischen  $400$  und  $800^\circ\text{C}$  für 30 Minuten getempert. Die Proben der ersten Serie wurden bei  $250^\circ\text{C}$  überwachsen, die zweite Serie waren Referenzproben, die bei  $500^\circ\text{C}$  überwachsen wurden. Die Position der PL Maxima nach dem Tempern ist in Abb. 6.8 als Funktion der Temper-Temperatur aufgezeichnet. Die gefüllten Quadrate stehen für die



**Abbildung 6.8:** Position des PL Maximums nach ex-situ Temperversuchen in bei  $500^{\circ}\text{C}$  (offene Kreise) und bei  $250^{\circ}\text{C}$  (gefüllte Quadrate) überwachsenen Proben.

bei  $250^{\circ}\text{C}$  überwachsenen Proben, die offenen Kreise für die Referenzproben. Man erkennt eine systematische Blauverschiebung der PL Maxima mit zunehmender Temperatur. Nach Temperung bei  $700^{\circ}\text{C}$  oder höher spaltet sich das breite PL Maximum in zwei schmalere Maxima auf, die  $58\text{ meV}$  voneinander entfernt sind. Bei diesen hohen Temperaturen geht die dreidimensionale Lokalisierung der Ladungsträger durch die starke Interdiffusion während des Temperschritts verloren. Die Struktur der Inseln wird verschmiert und nach der Temperung ähnelt die Probe einer pseudomorphen SiGe Schicht mit Dickenvariationen [158]. Die beiden Maxima werden daher den NP und TO Linien zugeordnet, die typischerweise in SiGe Quantentopfstrukturen beobachtet werden [79]. In den Spektren sind  $D_1$ - und  $D_2$ -Linien zu sehen, wenn die Temperung bei  $600^{\circ}\text{C}$  oder höher durchgeführt wird. Diese Linien weisen auf Kristalldefekte im Si hin und überlagern bei  $700^{\circ}\text{C}$  teilweise das TO Maximum. Bei niedrigerer Temperatur wird dagegen keine Defektlumineszenz beobachtet. Es ist also davon auszugehen, dass die bei  $250^{\circ}\text{C}$  überwachsene Schicht metastabil ist und durch das Tempern bei hoher Temperatur Defekte entstehen können.

Die Positionen der PL Maxima sind deutlich verschieden, wenn die Temperung bei  $700^{\circ}\text{C}$  oder weniger durchgeführt wird. Nach einem Temperschritt bei  $500^{\circ}\text{C}$  liegt das PL Maximum der bei  $250^{\circ}\text{C}$  überwachsenen Probe immer noch knapp  $120\text{ meV}$  niedriger als das der Referenzprobe, die bei etwa  $0,8\text{ eV}$  emittiert. Die Verschiebung durch den Temperschritt beträgt nur etwa  $40\text{ meV}$ . Dies beweist eindeutig, dass die Position des PL Maximums hauptsächlich durch die Interdiffusion zu Beginn des Überwachsens bestimmt wird. Die Temperzeit ist deutlich länger gewählt als die Zeit, die zum Wachsen der Si-Deckschicht benötigt wird ( $400\text{ s}$ ). Wenn Volumendiffusion während

des Überwachsens einen signifikanten Einfluss auf die Position des PL Maximums hätte, sollte die Position des PL Maximums durch das ex-situ Tempern mindestens bis 0,8 eV verschoben werden. Dies wird nicht beobachtet. Die Position des PL Maximums ist daher hauptsächlich durch die Vermischung während des Wachstums der ersten Si Monolagen bestimmt. Nachdem die Inseln mit Si zugedeckt sind, ist die Interdiffusion klein.

In der hier vorgestellten Versuchsreihe wurden die Inseln mit konstanter Temperatur überwachsen. Dies führt dazu, dass die Oberfläche bei den niedrigsten Deckschichttemperaturen nicht mehr glatt wächst. Eine glatte Si-Oberfläche ist aber für viele Experimente wünschenswert. Die Temperexperimente zeigen, dass eine Temperatur unter 600°C die PL Eigenschaften nicht wesentlich verändert, wenn die Inseln eingebettet sind. Es ist also prinzipiell problemlos möglich, eine glatte Si Oberfläche zu erhalten, indem während des Wachstums die Substrattemperatur heraufgesetzt wird.

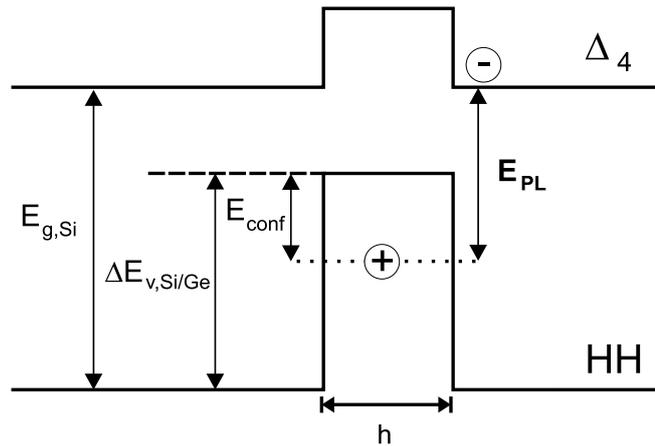
Zum Schluss dieses Abschnitts sei noch darauf hingewiesen, dass Si Schichten mit schlechter Kristallqualität ebenfalls ein breites Lumineszenzmaximum unterhalb 1 eV zeigen. Die Zuordnung der Lumineszenz zu den Inseln kann daher nicht einfach aus der Existenz eines PL Maximums unterhalb der Si Bandkante gefolgert werden, sondern erfordert eine systematischen Untersuchung der PL Eigenschaften. Die gezeigte Blauverschiebung durch das Tempern und die Rotverschiebung mit zunehmender Ge-Deposition beweisen, dass die Lumineszenz von den Ge-Inseln hervorgerufen wird und Defekte in den hier vorgestellten Proben keine Rolle spielen.

### 6.3 Vergleich mit theoretischen Voraussagen für SiGe Inseln

Die in den vorigen Abschnitten vorgestellten Messungen sollen in diesem Abschnitt mit vorhandenen Modellen zur Photolumineszenz in niedrigdimensionalen Si-Ge Strukturen verglichen werden.

Verspannte SiGe Heterostrukturen auf Si(001) Substraten zeigen einen Typ-II Bandverlauf [48], dies führt an den Grenzflächen dazu, dass sich dort Exzitonen bilden können, in denen die Ladungsträger an unterschiedlichen Stellen im Ortsraum lokalisiert sind. Sogenannte neighboring confinement structures (NCS) wurden auf relaxierten  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  Puffern demonstriert und zeigten dort eine intensive PL. In diesen Quantentopf Strukturen sind die Elektronen in verspannten Si Schichten lokalisiert. Die Löcher befinden sich in angrenzenden, verspannten  $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$  Schichten, die einen höheren Ge Anteil  $y$  als die Puffer haben. Trotz des indirekten Übergangs sowohl im Orts- als auch im K-Raum lässt sich in den NCS eine höhere PL messen, da beide Ladungsträger lokalisiert sind. In SiGe Töpfen auf Si(001) sind nur die Löcher lokalisiert, während die Elektronen nur durch die Coulomb-Wechselwirkung an die Löcher gebunden sind.

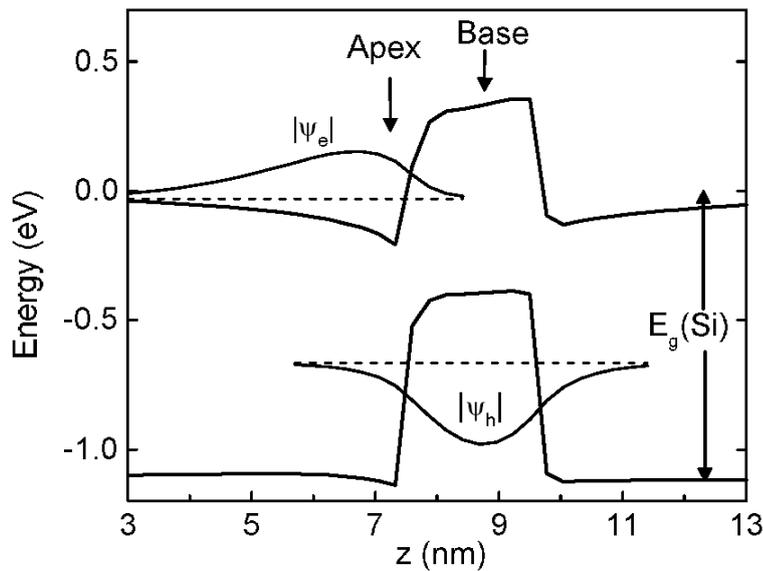
Die Übergangsenergie der PL in den Ge Hut Clustern kann in einem einfachen Mo-



**Abbildung 6.9:** Bandschema zur Berechnung der PL Energie von Hut Cluster Inseln in einer Quantentopf-Näherung.

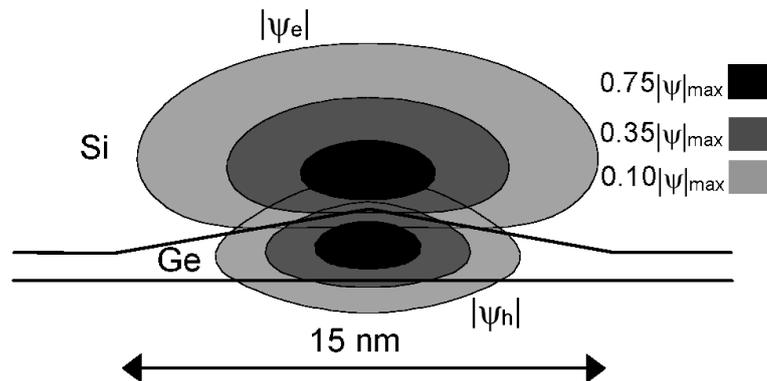
dell berechnet werden, indem man annimmt, dass die Löcher in einem verspannten Ge Quantentopf auf Si(001) lokalisiert sind und dass die Rekombination dieser Löcher mit Elektronen im umgebenden Si stattfindet. Dieses Modell ist schematisch in Abb. 6.9 gezeigt. Die Inseln werden als Quantentopf aus puren, verspannten Ge angenähert. Die untersuchten Hut Cluster haben eine durchschnittliche Höhe von 0,8 nm und wachsen auf einer Ge-Benetzungsschicht von etwa 4 ML ( $\approx 0.5$  nm) Dicke. Die Dicke des Quantentopfs  $h = 1,3 \pm 0,3$  nm ist die Summe aus Inselhöhe und Benetzungsschicht. Ge Segregation kann selbst bei den niedrigsten benutzten Wachstumstemperaturen nicht ausgeschlossen werden [162, 163, 133]. Die Unsicherheit in der Dicke ist daher hinreichend groß gewählt, um mögliche Segregationseffekte mit einzuberechnen. Der Valenzbandkantensprung zwischen Si(001) und tetragonal verspanntem Ge auf diesem Substrat ist  $\Delta E_{v,Si/Ge} = 0,84 \pm 0,05$  eV [45]. Der Grundzustand eines schweren Lochs mit einer effektiven Masse  $m_z^* = 0,2 m_0$  in einem Ge Quantentopf der Dicke  $h$  hat eine Lokalisierungsenergie von  $E_{conf} = 0,34 \pm 0,09$  eV. Die Rekombination der in den Inseln lokalisierten Löcher mit den in den Si-Barrieren befindlichen Elektronen führt damit zu einer PL-Energie von  $E_{PL} = E_{g,Si} - \Delta E_{v,Si/Ge} + E_{conf} = 0,67 \pm 0,14$  eV. Die beobachtete PL Energie stimmt im Rahmen der Unsicherheiten des Modells mit der zu erwartenden PL Energie überein. Wie in Abb. 6.2 (s. Seite 115) gezeigt, ist die beobachtete PL Energie unterhalb von 360°C praktisch unabhängig von der Deckschichttemperatur. Wie die einfache Rechnung zeigt, ist dies wahrscheinlich dadurch zu erklären, dass durch das Überwachsen bei tiefer Temperatur reines Ge in den Inseln konserviert wurde.

Im einfachen Quantentopfmodell sind die Elektronen nur sehr schwach gebunden, da das Si nicht verspannt ist. Durch die inhomogene Verspannung in der Umgebung einer in einer Si-Matrix eingeschlossenen Insel kommt es zu einer verstärkten Bin-



**Abbildung 6.10:** Bandverlauf durch die Spitze einer in einer Si Matrix eingeschlossenen Ge-Pyramide und Wahrscheinlichkeitsdichte der Elektron- und Lochwellenfunktionen eines Exzitons (aus [37]).

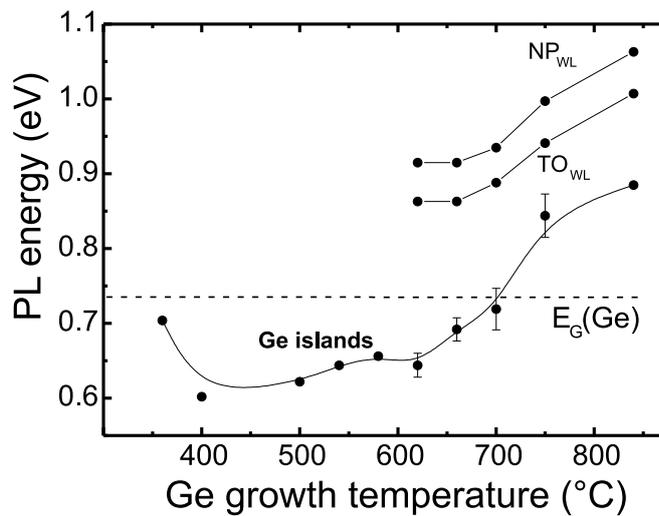
derung der Elektronen. Die Dehnungsverspannung im Si induziert eine Absenkung der  $\Delta(2)$  Minima im Leitungsband [148]. Die dreidimensionale Verspannung einer Ge-Pyramide mit  $\{105\}$  Facetten, die in einer Si Matrix eingeschlossen ist, wurde von mehreren Autoren berechnet [37, 36, 38]. Mittels der von VAN DE WALLE und MARTIN [45] berechneten Deformationspotentiale lässt sich aus der Verspannung der Bandverlauf ableiten. Es zeigt sich, dass der Leitungsbandverlauf stark durch die Verspannung an der Pyramidenspitze beeinflusst ist und sich ein Dreieckspotentialtopf für die Elektronen bildet. In Abb. 6.10 ist der Bandverlauf entlang einer Linie durch das Zentrum einer 1,5 nm hohe Ge Pyramide zu sehen. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten eines Elektrons  $|\Psi_e|$  und eines Lochs  $|\Psi_h|$  sind ebenfalls eingezeichnet. Bandverlauf und Aufenthaltswahrscheinlichkeiten wurden durch selbstkonsistente Lösung eines Sets gekoppelter Effektivmassen-Schrödingergleichungen mit Hilfe der Hartree-Näherung berechnet [37]. Die Wahrscheinlichkeitsdichte der Loch- und Elektronwellenfunktionen entlang eines Querschnitts durch die Pyramide ist in Abb. 6.11 gezeigt. Die Energiedifferenz zwischen der Grundzustandsenergie des Elektrons und des Lochs wurde mit 629 meV berechnet [38]. Diese Energiedifferenz entspricht der zu erwartenden Rekombinationsenergie für NP-Übergänge und stimmt recht gut mit der beobachteten PL Energie überein. Die Differenz mit der experimentell bestimmten Energie ist kleiner als die Unsicherheit durch den nicht genau bekannten Bandkantensprung zwischen Si und Ge. Eine weitere Voraussage aus der Rechnung ist die Bindungsenergie des Elektrons an der Pyramide, die 38 meV beträgt [37]. Diese Energie stimmt bemer-



**Abbildung 6.11:** Wahrscheinlichkeitsdichte eines Elektron/Loch Paares, das an einer Ge Pyramide lokalisiert ist (aus [37]).

kenswert gut mit der experimentell bestimmten Anregungsenergie überein, die aus der Temperaturabhängigkeit der PL bestimmt wurde. Daraus lässt sich schließen, dass die PL Effizienz bei höheren Temperaturen dadurch begrenzt ist, dass die relativ schwach gebundenen Elektronen durch thermische Anregungen von den Inseln wegdiffundieren und die zurückbleibenden Löcher durch fehlende Elektronen nicht strahlend rekombinieren können. Frühere Experimente an pseudomorphen SiGe Strukturen kamen zum Ergebnis, dass die Lumineszenz auch in diesen Strukturen durch die Evaporation von Elektronen beschränkt ist [80]. In Quantentopfstrukturen hat das Leitungsband allerdings praktisch den in Abb. 6.9 skizzierten, flachen Verlauf, welcher nur eine sehr schwache Bindung des Elektrons zur Folge hat. Die gefundenen Anregungsenergien waren daher mit 3 meV sehr viel kleiner als hier.

Die Anregungsenergie von nur 25 meV für die Referenzprobe lässt sich dadurch erklären, dass in der bei höheren Temperaturen überwachsenen Probe durch Interdiffusion die Verspannung kleiner ist und dadurch auch das Lokalisierungspotential für die Elektronen verringert wird. Außerdem kann es durch Interdiffusion zu einer größeren Separation zwischen Elektronen und Löchern kommen, was die Coulomb Anziehung zwischen den Ladungsträgern verringert. Der Messpunkt bei 185 K liegt bei beiden Proben unterhalb der Fitkurve. Dies könnte durch das schlechte Signal/Rauschverhältnis bei dieser Temperatur verursacht sein, möglicherweise hat diese Abweichung aber eine systematische Ursache. Es könnte sich hier um einen Prozess mit größerer Anregungsenergie handeln, der erst bei höheren Temperaturen in der PL sichtbar wird und der zu einem beschleunigten Abfall der PL mit steigender Temperatur führt.



**Abbildung 6.12:** PL Maximum selbstorganisierte Ge Inseln als Funktion der Wachstumstemperatur. Alle Inseln wurden bei 300°C oder weniger mit Si überwachsen.

## 6.4 Photolumineszenzmaxima von Inseln, die bei höheren Temperaturen gewachsen wurden

In den vorhergehenden Abschnitten wurden niedrige Temperaturen während des Wachstums der Si Deckschicht nur für Hut Cluster Inseln bei 500°C benutzt. In einer Probenreihe wurden Inseln bei verschiedenen Wachstumstemperaturen gewachsen und dann anschließend bei 300°C oder weniger mit Si überwachsen [164]. Abbildung 6.12 zeigt die Ergebnisse dieser Studie. Die Abbildung zeigt die Energie des PL Maximums in Abhängigkeit von der Temperatur während des Wachstums der Inseln. Bei Wachstumstemperaturen über 600°C ist zusätzlich die Position der PL Linien eingezeichnet, die durch die Benetzungsschicht verursacht werden. Es ist zu sehen, dass die Inseln bis zu einer Wachstumstemperatur von 700°C unterhalb der Bandlücke eines Ge Volumenkristalls emittieren. Bei höheren Wachstumstemperaturen verschiebt sich das PL Maximum stark zu höheren Energien. Dies ist nach den in Kapitel 3 vorgestellten Ergebnissen auch zu erwarten. Dort wurde gezeigt, dass die freistehenden Inseln bei 850°C überwiegend aus Si bestehen, was dazu führt, dass die Interdiffusion während des Überwachsens nur noch geringe Auswirkungen hat. Unterhalb von 700°C, so zeigen es die Messungen, wird die Position des PL Maximums entscheidend von der Interdiffusion während des Überwachsens dominiert [65, 165, 166]. Bei extrem geringen Wachstumstemperaturen unter 400°C nimmt die Energie des PL Maximums wieder zu. Die bei weniger als 400°C wachsenden Inseln sind extrem klein [147] und die Zunahme der Lokalisierungsenergie im Vergleich mit Hut-Clustern, die bei höheren Temperaturen gewachsen wurden, erklärt die Blauverschiebung des PL Maximums.

## 6.5 Zusammenfassung dieses Kapitels

In diesem Kapitel wurde die Lumineszenz von Inseln untersucht, die bei reduzierter Substrattemperatur mit Si überwachsen wurden. Es wurde eine Probenserie mit bei 500°C gewachsenen Hut Clustern vermessen, in der die Temperatur während des Wachstums der Deckschicht bis 250°C abgesenkt wurde. Es zeigte sich, dass die Interdiffusion während des Überwachsens entscheidende Auswirkungen auf die optischen Eigenschaften der Inseln hat. Die maximale Photolumineszenz-Intensität verschiebt sich mit sinkender Deckschichttemperatur zu niedrigeren Energien und sättigt für Deckschichttemperaturen kleiner als 360°C bei etwa 0,63 eV. Bei niedriger Anregungsleistung liegt das Maximum der Inselphotolumineszenz oberhalb einer Wellenlänge von 2  $\mu\text{m}$ .

Aus der Temperaturabhängigkeit der Photolumineszenz konnte geschlossen werden, dass die PL durch die Evaporation von Elektronen limitiert ist, die bei höheren Temperaturen durch thermische Anregung von den Inseln wegdiffundieren können und nicht mehr für strahlende Rekombination zur Verfügung stehen. Nachträgliche Temperversuche haben ergeben, dass die Komposition der vergrabenen Inseln sich erst bei weit höheren Temperaturen als 500°C ändert. Für die Zusammensetzung der Inseln ist daher entscheidend, wie groß die Interdiffusion während des Wachstums der ersten Atomlagen Si ist.

Die Deckschichttemperatur hat auch bei Inseln, die bei höherer Temperatur gewachsen wurden, einen großen Einfluß auf die Lumineszenzeigenschaften. Es wurde gezeigt, dass die Inseln bis zu einer Wachstumstemperatur von 700°C unterhalb der Bandlücke eines Ge Volumenkristalls emittieren.



# Kapitel 7

## Schlussbemerkungen und Ausblick

Die Ergebnisse dieser Arbeit zeigen, dass die Interdiffusion in selbstorganisierten Inseln im Materialsystem Germanium/Silizium eine entscheidende Rolle spielt. Sowohl die strukturellen und als auch die elektronischen Eigenschaften der Inseln werden durch die Interdiffusion stark beeinflusst. Als Fazit dieser Arbeit kann gelten, dass bei der Analyse von Experimenten Interdiffusionseffekte unbedingt mit einbezogen werden sollten.

Es wurde gezeigt, dass freistehende Inseln, die durch Deposition von reinem Ge gewachsen wurden, signifikant mit Si vermischt sind. In allen Proben, die bei Wachstumstemperaturen größer als 550°C gewachsen wurden, konnte eine Vermischung mit Si direkt nachgewiesen werden. Ferner wurde gezeigt, dass die Vermischung nicht homogen ist, sondern der Si Gehalt innerhalb der Inseln variiert und statistischen Schwankungen unterworfen ist. Diese Ergebnisse wurden aus Experimenten abgeleitet, in denen die Inseln selektiv nasschemisch geätzt wurden. Das Ätzen der Inseln liefert, wie hier gezeigt wurde, reproduzierbare Ergebnisse und eignet sich aufgrund seiner einfachen Anwendung für die Standardcharakterisierung von selbstorganisierten Inseln.

Bei Hut Cluster Inseln, die bei niedriger Temperatur gewachsen wurden, ist die Interdiffusion in freistehenden Inseln sehr schwach. Es wurde gezeigt, dass die Photolumineszenzeigenschaften dieser Inseln durch die Vermischung mit Si während des Überwachsens bestimmt werden. Durch Überwachsen bei niedriger Substrattemperatur lässt sich die Interdiffusion weitgehend unterdrücken. Die Ergebnisse der Photolumineszenzmessungen zeigen, dass die Inseleigenschaften gut mit vorhandenen theoretischen Modellen für reine Ge Inseln beschreibbar sind, vorausgesetzt die Annahme reinen Ge ist infolge der Wachstumsbedingungen auch gerechtfertigt.

Durch Überwachsen bei tiefer Temperatur konnten sehr hohe Ge Gehalte in den Inseln erreicht werden. Dies eröffnet neue Perspektiven für den Einbau dieser Inseln in komplexere Strukturen. So sind mit diesen Inseln wesentlich stärkere Lokalisierungsenergien und auch größere Verspannungen erreichbar als bisher. Alternativ könnte das Überwachsen bei tiefer Temperatur auch genutzt werden, um die Gestaltungsfreiheit für inselbasierende Bauteile zu vergrößern. Zum Beispiel kann das thermische Budget für das nachträgliche Prozessieren der Inseln erhöht werden. Dazu werden die Inseln

zunächst so gewachsen, dass die Ge Gehalte höher sind als gewünscht. Der gewünschten Ge Gehalt wird dann erst durch die Interdiffusion während des Prozessierens erreicht.

Das Verständnis der atomaren Prozesse, die während des Wachstums ablaufen, steht erst am Anfang. Eine interessante Frage ist zum Beispiel, inwieweit der viel diskutierte Übergang von Pyramiden zu Dome Inseln durch die Komposition beeinflusst wird. Außerdem bleibt zu klären, welchen Einfluss die Gräben, die sich um die Inseln bilden, auf die Größenverteilung der Inseln haben.

Ein Hauptziel für das Wachstum selbstorganisierter Inseln wird es in Zukunft sein, die Inseln in lateraler Richtung anzuordnen. Eine gezielte Adressierung und Messung einzelner Inseln ist nur möglich, wenn diese an definierten Positionen auf dem Substrat wachsen. Experimente im SiGe System haben perfekte laterale Anordnung in einer Dimension demonstriert. Dabei konnten geordnete Inseln auf Si Oberflächen erzeugt werden, die vor dem Wachstum glatt waren. Die Anordnung entlang von vorgegebenen Linien wurde durch vergrabene SiGe Schichten hervorgerufen, die einer Verspannungsmodulation auf der Oberfläche erzeugen [167]. Im III/V System wurden vor kurzem perfekte, zweidimensional angeordnete Inselfelder gewachsen [168]. Dies lässt erwarten, dass auch im SiGe System die komplett kontrollierte Anordnung in lateraler Richtung machbar ist.

# Literaturverzeichnis

- [1] J. D. MEINDL, C. QIANG UND J. A. DAVIS: *Limits on silicon nanoelectronics for terascale integration*. Science **293**, 2044 (2001).
- [2] D. J. EAGLESHAM UND M. CERULLO: *Dislocation-Free Stranski-Krastanow Growth of Ge on Si(100)*. Phys. Rev. Lett. **64**, 1943 (1990).
- [3] Y. W. MO, D. E. SAVAGE, B. S. SWARTZENTRUBER UND M. G. LAGALLY: *Kinetic Pathway in Stranski-Krastanov Growth of Ge on Si(001)*. Phys. Rev. Lett. **65**, 1020 (1990).
- [4] O. G. SCHMIDT UND K. EBERL: *Self-assembled Ge/Si dots for faster field-effect transistors*. IEEE Trans. Electron Devices **48**, 1175 (2001).
- [5] C. MIESNER, K. BRUNNER UND G. ABSTREITER: *Lateral photodetectors with Ge quantum dots in Si*. Infrared Phys. Technol. **42**, 461 (2001).
- [6] K. L. WANG, J. L. LIU UND G. JIN: *Self-assembled Ge quantum dots on Si and their applications*. J. Cryst. Growth **237**, 1892 (2002).
- [7] F. C. FRANK UND J. H. VAN DER MERWE. Proc. Roy. Soc. London A **198**, 205 (1949).
- [8] I. N. STRANSKI UND L. KRASTANOV: *Zur Theorie der orientierten Ausscheidung von Ionenkristallen aufeinander*. Akad. Wiss. Lit. Mainz Math.-Natur. Kl. IIb **146**, 797 (1939).
- [9] M. VOLLMER UND A. WEBER. Zeitschrift für Physikalische Chemie **119**, 277 (1926).
- [10] O. LEIFELD, E. MÜLLER, D. GRÜTZMACHER, B. MÜLLER UND K. KERN: *In situ scanning tunneling microscopy study of C-induced Ge quantum dot formation on Si(100)*. Appl. Phys. Lett. **74**, 994 (1999).
- [11] M. STOFFEL, L. SIMON, J. L. BISCHOFF, D. AUBEL, L. KUBLER UND G. CASTELEIN: *Ge growth mode modification on carbon-induced Si(001)-c(4 x 4) surfaces*. Thin Solid Films **380**, 32 (2000).

- [12] E. BAUER UND J. H. VAN DER MERWE: *Structure and growth of crystalline superlattices: from monolayer to superlattice*. Phys. Rev. B **33**, 3657 (1986).
- [13] J. TERSOFF UND F. K. LEGOUES: *Competing Relaxation Mechanisms in Strained Layers*. Phys. Rev. Lett. **72**, 3570 (1994).
- [14] F. M. ROSS, J. TERSOFF UND R. M. TROMP: *Coarsening of self-assembled Ge quantum dots on Si(001)*. Phys. Rev. Lett. **80**, 984 (1998).
- [15] M. ZINKEALLMANG, L. C. FELDMAN UND M. H. GRABOW: *Clustering on Surfaces*. Surf. Sci. Rep. **16**, 377 (1992).
- [16] V. A. SHCHUKIN, N. N. LEDENTSOV, P. S. KOPEV UND D. BIMBERG: *Spontaneous Ordering of Arrays of Coherent Strained Islands*. Phys. Rev. Lett. **75**, 2968 (1995).
- [17] G. MEDEIROS-RIBEIRO, A. M. BRATKOVSKI, T. I. KAMINS, D. A. A. OHLBERG UND R. S. WILLIAMS: *Shape transition of germanium nanocrystals on a silicon (001) surface from pyramids to domes*. Science **279**, 353 (1998).
- [18] Y. CHEN UND J. WASHBURN: *Structural transition in large-lattice-mismatch heteroepitaxy*. Phys. Rev. Lett. **77**, 4046 (1996).
- [19] O. G. SCHMIDT, U. DENKER, S. CHRISTIANSEN UND F. ERNST: *Composition of self-assembled Ge/Si islands in single and multiple layers*. Appl. Phys. Lett. **81**, 2614 (2002).
- [20] G. WEDLER, J. WALZ, T. HESJEDAL, E. CHILLA UND R. KOCH: *Stress and relief of misfit strain of Ge/Si(001)*. Phys. Rev. Lett. **80**, 2382 (1998).
- [21] F. M. ROSS, R. M. TROMP UND M. C. REUTER: *Transition states between pyramids and domes during Ge/Si island growth*. Science **286**, 1931 (1999).
- [22] G. MEDEIROS-RIBEIRO, T. I. KAMINS, D. A. A. OHLBERG UND R. S. WILLIAMS: *Equilibrium size distributions of clusters during strained epitaxial growth*. Mater. Sci. Eng. B-Solid State Mater. Adv. Technol. **67**, 31 (1999).
- [23] R. E. RUDD, G. A. D. BRIGGS, A. P. SUTTON, G. MEDEIROS-RIBEIRO UND R. STANLEY WILLIAMS: *Equilibrium Model of Bimodal Distributions of Epitaxial Island Growth*. Phys. Rev. Lett. **90**, 146101 (2003).
- [24] J. STANGL, A. DANIEL, V. HOLY, T. ROCH, G. BAUER, I. KEGEL, T. H. METZGER, T. WIEBACH, O. G. SCHMIDT UND K. EBERL: *Strain and composition distribution in uncapped SiGe islands from x-ray diffraction*. Appl. Phys. Lett. **79**, 1474 (2001).

- [25] T. U. SCHÜLLI, J. STANGL, Z. ZHONG, R. T. LECHNER, M. SZTUCKI, T. H. METZGER UND G. BAUER: *Direct Determination of Strain and Composition Profiles in SiGe Islands by Anomalous X-Ray Diffraction at High Momentum Transfer*. Phys. Rev. Lett. **90**, 066105 (2003).
- [26] M. A. MAKEEV UND A. MADHUKAR: *Simulations of atomic level stresses in systems of buried Ge/Si islands*. Phys. Rev. Lett. **86**, 5542 (2001).
- [27] P. RAITERI, L. MIGLIO, F. VALENTINOTTI UND M. CELINO: *Strain maps at the atomic scale below Ge pyramids and domes on a Si substrate*. Appl. Phys. Lett. **80**, 3736 (2002).
- [28] P. RAITERI, D. B. MIGAS, L. MIGLIO, A. RASTELLI UND H. VON KÄNEL: *Critical role of the surface reconstruction in the thermodynamic stability of <105> Ge pyramids on Si(001)*. Phys. Rev. Lett. **88**, 256103 (2002).
- [29] P. SONNET UND P. C. KELIRES: *Monte Carlo studies of stress fields and intermixing in Ge/Si(100) quantum dots*. Phys. Rev. B **66**, 205307 (2002).
- [30] C. KITTEL: *Einführung in die Festkörperphysik*. Oldenbourg. München (1996).
- [31] L. D. LANDAU UND L. M. LIFSCHITZ: *Elastizitätstheorie* Band VII der Reihe *Lehrbuch der theoretischen Physik*. Akademie Verlag. Berlin (1970).
- [32] S. CHRISTIANSEN, M. ALBRECHT, H. P. STRUNK UND H. J. MAIER: *Strained State of Ge(Si) Islands on Si - Finite-Element Calculations and Comparison to Convergent-Beam Electron- Diffraction Measurements*. Appl. Phys. Lett. **64**, 3617 (1994).
- [33] J. P. DISMUKES, R. J. PAFF UND L. EKSTROM: *Lattice Parameter + Density in Germanium-Silicon Alloys*. J. Phys. Chem. **68**, 3021 (1964).
- [34] D. A. FAUX UND G. S. PEARSON: *Green's tensors for anisotropic elasticity: Application to quantum dots*. Phys. Rev. B **62**, R4798 (2000).
- [35] B. TUCK: *Introduction to Diffusion in Semiconductors* Band 16 der Reihe *IEE Monograph Series*. Peregrinus. Stevenage (1974).
- [36] J. H. SEOK UND J. Y. KIM: *Electronic structure and compositional interdiffusion in self- assembled Ge quantum dots on Si(001)*. Appl. Phys. Lett. **78**, 3124 (2001).
- [37] A. I. YAKIMOV, N. P. STEPINA, A. V. DVURECHENSKII, A. I. NIKIFOROV UND A. V. NENASHEV: *Excitons in charged Ge/Si type-II quantum dots*. Semicond. Sci. Technol. **15**, 1125 (2000).

- [38] A. V. DVURECHENSKII, A. V. NENASHEV UND A. I. YAKIMOV: *Electronic structure of Ge/Si quantum dots*. *Nanotechnology* **13**, 75 (2002).
- [39] C. PRYOR: *Eight-band calculations of strained InAs/GaAs quantum dots compared with one-, four-, and six-band approximations*. *Phys. Rev. B* **57**, 7190 (1998).
- [40] O. STIER, M. GRUNDMANN UND D. BIMBERG: *Electronic and optical properties of strained quantum dots modeled by 8-band k.p theory*. *Phys. Rev. B* **59**, 5688 (1999).
- [41] O. MADELUNG: *Physics of Group IV Elements and III-V Compounds Band III/17a, III/22a, und III/41 der Reihe Landolt-Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*. Springer. Berlin (1982-2001).
- [42] F. SCHÄFFLER: *High-mobility Si and Ge structures*. *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 1515 (1997).
- [43] J. W. MATTHEWS UND A. E. BLAKESLEE: *Defects in epitaxial multilayers. I. Misfit dislocations*. *J. Cryst. Growth* **27**, 118 (1974).
- [44] J. R. CHELIKOWSKY UND M. L. COHEN: *Nonlocal pseudopotential calculations for the electronic structure of eleven diamond and zinc-blende semiconductors*. *Phys. Rev. B* **14**, 556 (1976).
- [45] C. G. VAN DE WALLE UND R. M. MARTIN: *Theoretical calculations of heterojunction discontinuities in the Si/Ge system*. *Phys. Rev. B* **34**, 5621 (1986).
- [46] C. G. VAN DE WALLE: *Properties of strained and relaxed Silicon Germanium*. In E. Kasper, editor, *emis Data Review Series*. Band 12. INSPEC London (1995).
- [47] O. G. SCHMIDT: *Fundamental studies of self-assembled nanostructures based on the SiGeC and SiGe material system*. Dissertation, Technische Universität Berlin (1999).
- [48] M. L. W. THEWALT, D. A. HARRISON, C. F. REINHART, J. A. WOLK UND H. LAFONTAINE: *Type II Band Alignment in  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}(001)$  Quantum Wells: The Ubiquitous Type I Luminescence Results from Band Bending*. *Phys. Rev. Lett.* **79**, 269 (1997).
- [49] H. IBACH UND H. LÜTH: *Festkörperphysik*. Springer Verlag. Heidelberg (1995).
- [50] G. D. GILLILAND: *Photoluminescence spectroscopy of crystalline semiconductors*. *Mater. Sci. Eng. R-Rep.* **R18**, 99 (1997).

- [51] P. J. DEAN, J. R. HAYNES UND W. F. FLOOD: *New Radiative Recombination Processes Involving Neutral Donors and Acceptors in Silicon and Germanium*. Physical Review **161**, 711 (1967).
- [52] J. DRUCKER: *Self-assembling Ge(Si)/Si(100) quantum dots*. IEEE J. Quantum Electron. **38**, 975 (2002).
- [53] I. GOLDFARB, P. T. HAYDEN, J. H. G. OWEN UND G. A. D. BRIGGS: *Competing growth mechanisms of Ge/Si(001) coherent clusters*. Phys. Rev. B **56**, 10459 (1997).
- [54] B. VOIGTLÄNDER: *Fundamental processes in Si/Si and Ge/Si epitaxy studied by scanning tunneling microscopy during growth*. Surf. Sci. Rep. **43**, 127 (2001).
- [55] O. G. SCHMIDT, C. LANGE UND K. EBERL: *Photoluminescence study of the 2D-3D growth mode changeover for different Ge/Si island phases*. Phys. Status Solidi B-Basic Res. **215**, 319 (1999).
- [56] J. A. FLORO, E. CHASON, R. D. TWESTEN, R. Q. HWANG UND L. B. FREUND: *SiGe coherent islanding and stress relaxation in the high mobility regime*. Phys. Rev. Lett. **79**, 3946 (1997).
- [57] J. A. FLORO, G. A. LUCADAMO, E. CHASON, L. B. FREUND, M. SINCLAIR, R. D. TWESTEN UND R. Q. HWANG: *SiGe island shape transitions induced by elastic repulsion*. Phys. Rev. Lett. **80**, 4717 (1998).
- [58] J. A. FLORO, E. CHASON, L. B. FREUND, R. D. TWESTEN, R. Q. HWANG UND G. A. LUCADAMO: *Evolution of coherent islands in Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>/Si(001)*. Phys. Rev. B **59**, 1990 (1999).
- [59] P. SUTTER UND M. G. LAGALLY: *Nucleationless three-dimensional island formation in low-misfit heteroepitaxy*. Phys. Rev. Lett. **84**, 4637 (2000).
- [60] P. SUTTER UND M. G. LAGALLY: *Nucleationless island formation in Si-Ge/Si(100) heteroepitaxy*. Mater. Sci. Eng. B-Solid State Mater. Adv. Technol. **89**, 45 (2002).
- [61] P. SUTTER UND M. G. LAGALLY: *Embedding of nanoscale 3D SiGe islands in a Si matrix*. Phys. Rev. Lett. **81**, 3471 (1998).
- [62] G. PATRIARCHE, I. SAGNES, P. BOUCAUD, V. LE THANH, D. BOUCHIER, C. HERNANDEZ, Y. CAMPIDELLI UND D. BENSACHEL: *Strain and composition of capped Ge/Si self-assembled quantum dots grown by chemical vapor deposition*. Appl. Phys. Lett. **77**, 370 (2000).

- [63] A. RASTELLI, M. KUMMER UND H. VON KÄNEL: *Reversible shape evolution of Ge islands on Si(001)*. Phys. Rev. Lett. **87**, 256101/1 (2001).
- [64] M. KUMMER, B. VÖGELI UND H. VON KÄNEL: *Si overgrowth of self-assembled Ge clusters on Si(001) - a scanning tunnelling microscopy study*. Mater. Sci. Eng. B-Solid State Mater. Adv. Technol. **69**, 247 (2000).
- [65] O. G. SCHMIDT, U. DENKER, K. EBERL, O. KIENZLE UND F. ERNST: *Effect of overgrowth temperature on the photoluminescence of Ge/Si islands*. Appl. Phys. Lett. **77**, 2509 (2000).
- [66] G. ABSTREITER, P. SCHITTENHELM, C. ENGEL, E. SILVEIRA, A. ZRENNER, D. MEERTENS UND W. JAGER: *Growth and characterization of self-assembled Ge-rich islands on Si*. Semicond. Sci. Technol. **11**, 1521 (1996).
- [67] L. KUBLER, D. DENTEL, J. L. BISCHOFF, C. GHICA, C. ULHAQ-BOUILLET UND J. WERCKMANN: *Si adatom surface migration biasing by elastic strain gradients during capping of Ge or Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> hut islands*. Appl. Phys. Lett. **73**, 1053 (1998).
- [68] A. RASTELLI, E. MÜLLER UND H. VON KÄNEL: *Shape preservation of Ge/Si(001) islands during Si capping*. Appl. Phys. Lett. **80**, 1438 (2002).
- [69] L. VESCAN, W. JÄGER, C. DIEKER, K. SCHMIDT, A. HARTMANN UND H. LÜTH: *Formation of heterogeneous thickness modulations during epitaxial growth of LPCVD-Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>/Si quantum well structures*. Mechanisms of Heteroepitaxial Growth Symposium. Mater. Res. Soc. (1992).
- [70] B. RAHMATI, W. JÄGER, H. TRINKAUS, R. LOO UND L. VESCAN: *Vertical ordering of islands in Ge-Si multilayers*. Appl. Phys. A-Mater. Sci. Process. **62**, 575 (1996).
- [71] A. A. DARHUBER, P. SCHITTENHELM, V. HOLY, J. STANGL, G. BAUER UND G. ABSTREITER: *High-resolution x-ray diffraction from multilayered self-assembled Ge dots*. Phys. Rev. B **55**, 15652 (1997).
- [72] E. MATEEVA, P. SUTTER, J. C. BEAN UND M. G. LAGALLY: *Mechanism of organization of three-dimensional islands in SiGe/Si multilayers*. Appl. Phys. Lett. **71**, 3233 (1997).
- [73] P. SUTTER, E. MATEEVA-SUTTER UND L. VESCAN: *Oblique stacking of three-dimensional dome islands in Ge/Si multilayers*. Appl. Phys. Lett. **78**, 1736 (2001).
- [74] E. SUTTER, P. SUTTER UND L. VESCAN: *Organization of self-assembled quantum dots in SiGe/Si multilayers: effect of strain and substrate curvature*. Mater. Sci. Eng. B-Solid State Mater. Adv. Technol. **89**, 196 (2002).

- [75] O. G. SCHMIDT, O. KIENZLE, Y. HAO, K. EBERL UND F. ERNST: *Modified Stranski-Krastanov growth in stacked layers of self-assembled islands*. Appl. Phys. Lett. **74**, 1272 (1999).
- [76] J. C. STURM, H. MANOHARAN, L. C. LENCHYSHYN, M. L. W. THEWALT, N. L. ROWELL, J. P. NOEL UND D. C. HOUGHTON: *Well-resolved band-edge photoluminescence of excitons confined in strained  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  quantum wells*. Phys. Rev. Lett. **66**, 1362 (1991).
- [77] J. BRUNNER, U. MENCZIGAR, M. GAIL, E. FRIESS UND G. ABSTREITER: *Band gap luminescence in pseudomorphic  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  quantum wells grown by molecular beam epitaxy*. Thin Solid Films **222**, 27 (1992).
- [78] J. SPITZER, K. THONKE, R. SAUER, H. KIBBEL, H. J. HERZOG UND E. KASPER: *Direct observation of band-edge luminescence and alloy luminescence from ultrametastable silicon-germanium alloy layers*. Appl. Phys. Lett. **60**, 1729 (1992).
- [79] X. XIAO, C. W. LIU, J. C. STURM, L. C. LENCHYSHYN, M. L. W. THEWALT, R. B. GREGORY UND P. FEJES: *Quantum confinement effects in strained silicon-germanium alloy quantum wells*. Appl. Phys. Lett. **60**, 2135 (1992).
- [80] M. WACHTER, F. SCHÄFFLER, H. J. HERZOG, K. THONKE UND R. SAUER: *Photoluminescence of high-quality SiGe quantum wells grown by molecular beam epitaxy*. Appl. Phys. Lett. **63**, 376 (1993).
- [81] T. BAIER, U. MANTZ, K. THONKE, R. SAUER, F. SCHÄFFLER UND H. J. HERZOG: *Type-II band alignment in  $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  quantum wells from photoluminescence line shifts due to optically induced band-bending effects: experiment and theory*. Phys. Rev. B **50**, 15191 (1994).
- [82] G. A. NORTHROP, J. F. MORAR, D. J. WOLFORD UND J. A. BRADLEY: *Photoluminescence from pseudomorphic  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  quantum wells grown by molecular beam epitaxy: variation of the band gap with high pressure*. J. Vac. Sci. Technol. B **10**, 2018 (1992).
- [83] S. FUKATSU UND Y. SHIRAKI: *Optical investigation of interwell coupling in strained  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$  quantum wells*. Appl. Phys. Lett. **63**, 2378 (1993).
- [84] N. USAMI, F. ISSIKI, D. K. NAYAK, Y. SHIRAKI UND S. FUKATSU: *Enhancement of radiative recombination in Si-based quantum wells with neighboring confinement structure*. Appl. Phys. Lett. **67**, 524 (1995).
- [85] R. APETZ, L. VESCAN, A. HARTMANN, C. DIEKER UND H. LÜTH: *Photoluminescence and electroluminescence of SiGe dots fabricated by island growth*. Appl. Phys. Lett. **66**, 445 (1995).

- [86] H. SUNAMURA, N. USAMI, Y. SHIRAKI UND S. FUKATSU: *Island Formation During Growth of Ge on Si(100) - a Study Using Photoluminescence Spectroscopy*. Appl. Phys. Lett. **66**, 3024 (1995).
- [87] P. SCHITTENHELM, M. GAIL, J. BRUNNER, J. F. NÜTZEL UND G. ABSTREITER: *Photoluminescence Study of the Crossover from 2-Dimensional to 3-Dimensional Growth for Ge on Si(100)*. Appl. Phys. Lett. **67**, 1292 (1995).
- [88] P. SCHITTENHELM: *Selbst-Organisation und Selbst-Ordnung in Si/SiGe-Heterostrukturen*. Dissertation, Technische Universität München (1997).
- [89] O. G. SCHMIDT, C. LANGE UND K. EBERL: *Photoluminescence study of the initial stages of island formation for Ge pyramids/domes and hut clusters on Si(001)*. Appl. Phys. Lett. **75**, 1905 (1999).
- [90] A. ISHIZAKA UND Y. SHIRAKI: *Low temperature surface cleaning of silicon and its application to silicon MBE*. J. Electrochem. Soc. **133**, 666 (1986).
- [91] T. K. CARNS, M. O. TANNER UND K. L. WANG: *Chemical etching of  $Si_{1-x}Ge_x$  in  $HF:H_2O_2:CH_3COOH$* . J. Electrochem. Soc. **142**, 1260 (1995).
- [92] W. PRIMAK UND R. KAMPWIRTH: *Peroxide Etching of Germanium*. J. Electrochem. Soc. **114**, 88 (1967).
- [93] G. K. CHANG, T. K. CARNS, S. S. RHEE UND K. L. WANG: *Selective etching of SiGe on SiGe/Si heterostructures*. J. Electrochem. Soc. **138**, 202 (1991).
- [94] K. M. HAENDEL, C. LENZ, U. DENKER, O. G. SCHMIDT, K. EBERL UND R. J. HAUG: *Transport measurements of valence band holes in p-type SiGe quantum well structure containing Ge quantum dots*. Physica E **13**, 757 (2002).
- [95] M. W. DASHIELL, C. MÜLLER, N. Y. JIN-PHILLIPP, U. DENKER, O. G. SCHMIDT UND K. EBERL: *Low temperature epitaxial growth of germanium islands in active regions of silicon interband tunneling diodes*. Mater. Sci. Eng. B-Solid State Mater. Adv. Technol. **89**, 106 (2002).
- [96] O. G. SCHMIDT, U. DENKER, K. EBERL, O. KIENZLE, F. ERNST UND R. J. HAUG: *Resonant tunneling diodes made up of stacked self-assembled Ge/Si islands*. Appl. Phys. Lett. **77**, 4341 (2000).
- [97] A. HESSE, J. STANGL, V. HOLÝ, T. ROCH, G. BAUER, O. G. SCHMIDT, U. DENKER UND B. STRUTH: *Effect of overgrowth on shape, composition, and strain of SiGe islands on Si(001)*. Phys. Rev. B **66**, 085321 (2002).
- [98] M. CAZAYOUS, J. GROENEN, J. R. HUNTZINGER, A. MLAYAH, U. DENKER UND O. G. SCHMIDT: *A new tool for measuring island dimensions and spatial correlations in quantum dot multilayers: Raman scattering interferences*. Mater. Sci. Eng. B-Solid State Mater. Adv. Technol. **88**, 173 (2002).

- [99] U. DENKER, O. G. SCHMIDT, N. Y. JIN-PHILIPP UND K. EBERL: *Trench formation around and between self-assembled Ge islands on Si*. Appl. Phys. Lett. **78**, 3723 (2001).
- [100] U. DENKER, M. W. DASHIELL, N. Y. JIN-PHILLIPP UND O. G. SCHMIDT: *Trenches around and between self assembled silicon/germanium islands grown on silicon substrates investigated by atomic force microscopy*. Mater. Sci. Eng. B-Solid State Mater. Adv. Technol. **89**, 166 (2002).
- [101] I. N. BRONSTEIN UND K. A. SEMENDJAJEW: *Taschenbuch der Mathematik*. Verlag Harri Deutsch. Frankfurt am Main (1971).
- [102] G. CAPELLINI, M. DE SETA UND F. EVANGELISTI: *SiGe intermixing in Ge/Si(100) islands*. Appl. Phys. Lett. **78**, 303 (2001).
- [103] G. CAPELLINI, M. DE SETA UND F. EVANGELISTI: *Influence of the growth parameters on self-assembled Ge islands on Si(100)*. Mater. Sci. Eng. B-Solid State Mater. Adv. Technol. **89**, 184 (2002).
- [104] J. WEBER UND M. I. ALONSO: *Near-band-gap photoluminescence of Si-Ge alloys*. Phys. Rev. B **40**, 5683 (1989).
- [105] X. Z. LIAO, J. ZOU, D. J. H. COCKAYNE, Z. M. JIANG UND X. WANG: *Extracting composition and alloying information of coherent Ge(Si)/Si(001) islands from [001] on-zone bright-field diffraction contrast images*. J. Appl. Phys. **90**, 2725 (2001).
- [106] X. Z. LIAO, J. ZOU, D. J. H. COCKAYNE, J. WAN, Z. M. JIANG, G. JIN UND K. L. WANG: *Alloying, elemental enrichment, and interdiffusion during the growth of Ge(Si)/Si(001) quantum dots*. Phys. Rev. B **65**, 153306 (2002).
- [107] T. I. KAMINS, E. C. CARR, R. S. WILLIAMS UND S. J. ROSNER: *Deposition of three-dimensional Ge islands on Si(001) by chemical vapor deposition at atmospheric and reduced pressures*. J. Appl. Phys. **81**, 211 (1997).
- [108] S. A. CHAPARRO, J. DRUCKER, Y. ZHANG, D. CHANDRASEKHAR, M. R. MCCARTNEY UND D. J. SMITH: *Strain-driven alloying in Ge/Si(100) coherent islands*. Phys. Rev. Lett. **83**, 1199 (1999).
- [109] X. Z. LIAO, J. ZOU, D. J. H. COCKAYNE, J. QIN, Z. M. JIANG, X. WANG UND R. LEON: *Strain relaxation by alloying effects in Ge islands grown on Si(001)*. Phys. Rev. B **60**, 15605 (1999).
- [110] O. G. SCHMIDT UND K. EBERL: *Multiple layers of self-asssembled Ge/Si islands: Photoluminescence, strain fields, material interdiffusion, and island formation*. Phys. Rev. B **61**, 13721 (2000).

- [111] S. A. CHAPARRO, Y. ZHANG UND J. DRUCKER: *Strain relief via trench formation in Ge/Si(100) islands*. Appl. Phys. Lett. **76**, 3534 (2000).
- [112] H. T. JOHNSON UND L. B. FREUND: *Mechanics of coherent and dislocated island morphologies in strained epitaxial material systems*. J. Appl. Phys. **81**, 6081 (1997).
- [113] D. E. SAVAGE, F. LIU, V. ZIELASEK UND M. G. LAGALLY: *Fundamental mechanisms of film growth*. In *Germanium Silicon: Physics and Materials*. Band 56 der Reihe *Semiconductors and Semimetals* S. 49. Academic Press San Diego (1999).
- [114] T. I. KAMINS, G. MEDEIROS-RIBEIRO, D. A. A. OHLBERG UND R. S. WILLIAMS: *Evolution of Ge islands on Si(001) during annealing*. J. Appl. Phys. **85**, 1159 (1999).
- [115] J. DRUCKER: *Coherent Islands and Microstructural Evolution*. Phys. Rev. B **48**, 18203 (1993).
- [116] F. BOSCHERINI, G. CAPELLINI, L. DI GASPARE, F. ROSEI, N. MOTTA UND S. MOBILIO: *Ge-Si intermixing in Ge quantum dots on Si(001) and Si(111)*. Appl. Phys. Lett. **76**, 682 (2000).
- [117] Z. F. KRASIL'NIK, I. V. DOLGOV, Y. N. DROZDOV, D. O. FILATOV, S. A. GUSEV, D. N. LOBANOV, L. D. MOLDAVSKAYA, A. V. NOVIKOV, V. V. POSTNIKOV UND N. V. VOSTOKOV: *The elastic strain and composition of self-assembled GeSi islands on Si(001)*. Thin Solid Films **367**, 171 (2000).
- [118] M. DE SETA, G. CAPELLINI, F. EVANGELISTI UND C. SPINELLA: *Intermixing-promoted scaling of Ge/Si(100) island sizes*. J. Appl. Phys. **92**, 614 (2002).
- [119] F. K. LEGOUES, M. C. REUTER, J. TERSOFF, M. HAMMAR UND R. M. TROMP: *Cyclic Growth of Strain-Relaxed Islands*. Phys. Rev. Lett. **73**, 300 (1994).
- [120] F. K. LEGOUES, J. TERSOFF, M. C. REUTER, M. HAMMAR UND R. TROMP: *Relaxation Mechanism of Ge Islands Si(001) at Low-Temperature*. Appl. Phys. Lett. **67**, 2317 (1995).
- [121] M. HAMMAR, F. K. LEGOUES, J. TERSOFF, M. C. REUTER UND R. M. TROMP: *In situ ultrahigh vacuum transmission electron microscopy studies of hetero-epitaxial growth*. Surf. Sci. **349**, 129 (1996).

- [122] G. MEDEIROS-RIBEIRO, T. I. KAMINS, D. A. A. OHLBERG UND R. S. WILLIAMS: *Annealing of Ge nanocrystals on Si(001) at 550 degrees C: Metastability of huts and the stability of pyramids and domes*. Phys. Rev. B **58**, 3533 (1998).
- [123] A. RASTELLI: *Structural evolution of nanoscopic islands of Ge and SiGe on Si(001)*. Dissertation, Università degli Studi di Pavia (2002).
- [124] J. M. BARIBEAU: *X-ray reflectometry study of interdiffusion in Si/Ge heterostructures*. J. Appl. Phys. **74**, 3805 (1993).
- [125] G. F. A. VAN DE WALLE, L. J. VAN IJZENDOORN, A. A. VAN GORKUM, R. A. VAN DEN HEUVEL, A. M. L. THEUNISSED UND D. J. GRAVESTAIN: *Germanium diffusion and strain relaxation in Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>/Si structures*. Thin Solid Films **183**, 183 (1990).
- [126] B. VOIGTLÄNDER UND M. KÄSTNER: *Evolution of the strain relaxation in a Ge layer on Si(001) by reconstruction and intermixing*. Phys. Rev. B **60**, R5121 (1999).
- [127] Y. W. MO UND M. G. LAGALLY: *Anisotropy in Surface Migration of Si and Ge on Si(001)*. Surf. Sci. **248**, 313 (1991).
- [128] D. E. JESSON, M. KÄSTNER UND B. VOIGTLÄNDER: *Direct observation of subcritical fluctuations during the formation of strained semiconductor islands*. Phys. Rev. Lett. **84**, 330 (2000).
- [129] M. KÄSTNER UND B. VOIGTLÄNDER: *Kinetically self-limiting growth of Ge islands on Si(001)*. Phys. Rev. Lett. **82**, 2745 (1999).
- [130] B. VÖGELI, M. KUMMER UND H. VON KÄNEL: *Si/Ge/Si(001) magnetron sputter heteroepitaxy: the initial stages of "hut"-cluster overgrowth*. Epitaxy and Applications of Si Based Heterostructures. Symposium. Mater. Res. Soc. **533**, 209 (1998).
- [131] D. DENTEL, J. L. BISCHOFF, L. KUBLER, J. WERCKMANN UND M. ROMEO: *Surface smoothing induced by epitaxial Si capping of rough and strained Ge or Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> morphologies: a RHEED and TEM study*. J. Cryst. Growth **191**, 697 (1998).
- [132] M. HERBST, C. SCHRAMM, K. BRUNNER, T. ASPERGER, H. RIEDL, G. ABSTREITER, A. VORCKEL, H. KURZ UND E. MÜLLER: *Structural and optical properties of vertically correlated Ge island layers grown at low temperatures*. Mater. Sci. Eng. B-Solid State Mater. Adv. Technol. **89**, 54 (2002).
- [133] P. BOGUSLAWSKI UND J. BERNHOLC: *Surface segregation of Ge at SiGe(001) by concerted exchange pathways*. Phys. Rev. Lett. **88**, 166101/1 (2002).

- [134] S. J. CHANG, C. F. HUANG, M. A. KALLEL, K. L. WANG, JR. BOWMAN, R. C. UND P. M. ADAMS: *Growth and characterization of Ge/Si strained-layer superlattices*. Appl. Phys. Lett. **53**, 1835 (1988).
- [135] S. S. IYER UND F. K. LEGOUES: *Thermal relaxation of pseudomorphic Si-Ge superlattices by enhanced diffusion and dislocation multiplication*. J. Appl. Phys. **65**, 4693 (1989).
- [136] J. M. BARIBEAU, R. PASCUAL UND S. SAIMOTO: *Interdiffusion and strain relaxation in  $(Si_mGe_m)_p$  superlattices*. Appl. Phys. Lett. **57**, 1502 (1990).
- [137] N. E. B. COWERN, P. C. ZALM, P. VAN DER SLUIS, D. J. GRAVESTIJN UND W. B. DE BOER: *Diffusion in strained Si(Ge)*. Phys. Rev. Lett. **72**, 2585 (1994).
- [138] H. LAFONTAINE, D. C. HOUGHTON, N. L. ROWELL UND G. C. AERS: *Photoluminescence study of initial interdiffusion of SiGe/Si quantum wells grown by ultrahigh vacuum-chemical vapor deposition*. Appl. Phys. Lett. **69**, 1444 (1996).
- [139] W. P. GILLIN UND D. J. DUNSTAN: *Strain and interdiffusion in semiconductor heterostructures*. Phys. Rev. B **50**, 7495 (1994).
- [140] P. M. FAHEY, P. B. GRIFFIN UND J. D. PLUMMER: *Point-Defects and Dopant Diffusion in Silicon*. Rev. Mod. Phys. **61**, 289 (1989).
- [141] P. FAHEY, S. S. IYER UND G. J. SCILLA: *Experimental evidence of both interstitial- and vacancy-assisted diffusion of Ge in Si*. Appl. Phys. Lett. **54**, 843 (1989).
- [142] J. RAISANEN, J. HIRVONEN UND A. ANTILA: *The diffusion of silicon in germanium*. Solid-State Electron. **24**, 333 (1981).
- [143] G. L. MCVAY UND A. R. DUCHARME: *Diffusion of Ge in SiGe alloys*. Phys. Rev. B **9**, 627 (1973).
- [144] N. R. ZANGENBERG, J. LUNDSGAARD HANSEN, J. FAGE-PEDERSEN UND A. NYLANDSTED LARSEN: *Ge self-diffusion in epitaxial  $Si_{1-x}Ge_x$  layers*. Phys. Rev. Lett. **87**, 125901 (2001).
- [145] D. B. AUBERTINE, M. A. MANDER, N. OZGUVEN, A. F. MARSHALL, P. C. MCINTYRE, J. O. CHU UND P. M. MOONEY: *Observation and modeling of the initial fast interdiffusion regime in Si/SiGe multilayers*. J. Appl. Phys. **92**, 5027 (2002).
- [146] J. TERSOFF, C. TEICHERT UND M. G. LAGALLY: *Self-organization in growth of quantum dot superlattices*. Phys. Rev. Lett. **76**, 1675 (1996).

- [147] M. W. DASHIELL, U. DENKER, C. MÜLLER, G. COSTANTINI, C. MANZANO, K. KERN UND O. G. SCHMIDT: *Photoluminescence of ultrasmall Ge quantum dots grown by molecular-beam epitaxy at low temperatures*. Appl. Phys. Lett. **80**, 1279 (2002).
- [148] O. G. SCHMIDT, K. EBERL UND Y. RAU: *Strain and band-edge alignment in single and multiple layers of self-assembled Ge/Si and GeSi/Si islands*. Phys. Rev. B **62**, 16715 (2000).
- [149] E. CARLINO, C. GIANNINI, C. GERARDI, L. TAPFER, K. A. MADER UND H. VON KÄNEL: *Strain relaxation of Si/Ge multilayers: Coherent islands formation and their evolution as a function of the strain*. J. Appl. Phys. **79**, 1441 (1996).
- [150] C. TEICHERT, M. G. LAGALLY, L. J. PETICOLAS, J. C. BEAN UND J. TER-SOFF: *Stress-induced self-organization of nanoscale structures in SiGe/Si multilayer films*. Phys. Rev. B **53**, 16334 (1996).
- [151] V. HOLÝ, G. SPRINGHOLZ, M. PINCZOLITS UND G. BAUER: *Strain induced vertical and lateral correlations in quantum dot superlattices*. Phys. Rev. Lett. **83**, 356 (1999).
- [152] O. KIENZLE, F. ERNST, M. RUHLE, O. G. SCHMIDT UND K. EBERL: *Germanium "quantum dots" embedded in silicon: Quantitative study of self-alignment and coarsening*. Appl. Phys. Lett. **74**, 269 (1999).
- [153] V. LE THANH, V. YAM, P. BOUCAUD, F. FORTUNA, C. ULYSSE, D. BOUCHIER, L. VERVOORT UND J. M. LOURTIOZ: *Vertically self-organized Ge/Si(001) quantum dots in multilayer structures*. Phys. Rev. B **60**, 5851 (1999).
- [154] I. GOLDFARB UND G. A. D. BRIGGS: *Comparative STM and RHEED studies of Ge/Si(001) and Si/Ge/Si(001) surfaces*. Surf. Sci. **433**, 449 (1999).
- [155] Q. XIE, A. MADHUKAR, C. PING UND N. P. KOBAYASHI: *Vertically self-organized InAs quantum box islands on GaAs(100)*. Phys. Rev. Lett. **75**, 2542 (1995).
- [156] I. DARUKA, A. L. BARABASI, S. J. ZHOU, T. C. GERMANN, P. S. LOMDAHL UND A. R. BISHOP: *Molecular-dynamics investigation of the surface stress distribution in a Ge/Si quantum dot superlattice*. Phys. Rev. B **60**, R2150 (1999).
- [157] U. DENKER, M. STOFFEL, O. G. SCHMIDT UND H. SIGG: *Ge hut cluster luminescence below bulk Ge band gap*. Appl. Phys. Lett. **82**, 454 (2003).
- [158] M. W. DASHIELL, U. DENKER UND O. G. SCHMIDT: *Photoluminescence investigation of phononless radiative recombination and thermal-stability of germanium hut clusters on silicon(001)*. Appl. Phys. Lett. **79**, 2261 (2001).

- [159] J. WAN, G. L. JIN, Z. M. JIANG, Y. H. LUO, J. L. LIU UND K. L. WANG: *Band alignments and photon-induced carrier transfer from wetting layers to Ge islands grown on Si(001)*. Appl. Phys. Lett. **78**, 1763 (2001).
- [160] J. WAN, Y. H. LUO, Z. M. JIANG, G. JIN, J. L. LIU, K. L. WANG, X. Z. LIAO UND J. ZOU: *Effects of interdiffusion on the band alignment of GeSi dots*. Appl. Phys. Lett. **79**, 1980 (2001).
- [161] J. WAN, Y. H. LUO, Z. M. JIANG, G. JIN, J. L. LIU, K. L. WANG, X. Z. LIAO UND J. ZOU: *Ge/Si interdiffusion in the GeSi dots and wetting layers*. J. Appl. Phys. **90**, 4290 (2001).
- [162] X. R. QIN, B. S. SWARTZENTRUBER UND M. G. LAGALLY: *Diffusional kinetics of SiGe dimers on Si(100) using atom-tracking scanning tunneling microscopy*. Phys. Rev. Lett. **85**, 3660 (2000).
- [163] X. R. QIN, B. S. SWARTZENTRUBER UND M. G. LAGALLY: *Scanning tunneling microscopy identification of atomic-scale intermixing on Si(100) at submonolayer Ge coverages*. Phys. Rev. Lett. **84**, 4645 (2000).
- [164] M. STOFFEL, U. DENKER UND O. G. SCHMIDT. (unveröffentlicht).
- [165] R. LOO, P. MEUNIER-BEILLARD, D. VANHAEREN, H. BENDER, M. CAYMAX, W. VANDERVORST, D. DENTEL, M. GORYLL UND L. VESCAN: *Structural and optical properties of Ge islands grown in an industrial chemical vapor deposition reactor*. J. Appl. Phys. **90**, 2565 (2001).
- [166] N. V. VOSTOKOV, Y. N. DROZDOV, Z. F. KRASIL'NIK, D. N. LOBANOV, A. V. NOVIKOV UND A. N. YABLONSKI: *Low-Energy Photoluminescence of Structures with GeSi/Si(001) Self-Assembled Nanoislands*. Jetp Lett. **76**, 365–369 (2002).
- [167] O. G. SCHMIDT, N. Y. JIN-PHILLIPP, C. LANGE, U. DENKER, K. EBERL, R. SCHREINER, H. GRABELDINGER UND H. SCHWEIZER: *Long-range ordered lines of self-assembled Ge islands on a flat Si (001) surface*. Appl. Phys. Lett. **77**, 4139 (2000).
- [168] H. HEIDEMEYER UND O. G. SCHMIDT. (unveröffentlicht).

# Anhang A

## Abkürzungsverzeichnis

### A.1 Allgemeine Abkürzungen

AFM : Rasterkraftmikroskop (atomic force microscope)

FTIR : Fourier-Transformations-Infrarot-Spektroskopie

FEM : Finite Elemente Methoden

Ge : Germanium

MBE : Molekularstrahlepitaxie (molecular beam epitaxy)

ML: Monolage

NCS: Lokalisierung in angrenzenden Schichten (neighboring confinement structure)

NP : Ohne Phononenbeteiligung (no phonon)

PL : Photolumineszenz

RBS : Rutherford Rückstreuung (Rutherford backscattering)

REM : Raster-Elektronen-Mikroskopie

RHEED : Beugung hochenergetischer Elektronen unter streifendem Einfall (reflection high energy electron diffraction)

RMS : Wurzel aus Summe der quadratischen Mittelwerte (root mean square)

RTA : Kurzzeit-Temperprozeß mit sehr steilen Heizrampen (rapid thermal annealing)

Si : Silizium

SIMS : Sekundärionen-Massenspektrometrie

STM : Rastertunnelmikroskop (scanning tunnelling microscope)

TEM : Transmissions-Elektronenmikroskopie

TO : Transversal-optisch

UHV : Ultrahochvakuum

VLSI/ULSI : Hochintegration (very large scale integration/ultra large scale integration)

XRD : Röntgenbeugung (X-ray diffraction)

## A.2 In Formeln verwendete Symbole und Abkürzungen

$a$  : Gitterkonstante

$D$  : Diffusionskonstante [ $\text{cm}^2/\text{s}$ ]

$d_c$  : kritische Schichtdicke (critical thickness) [nm]

$E$  : Gesamtenergie eines Systems [eV]

$c_{ijkl}$  : Tensor der Elastizitätsmoduln [GPa]

$c_{11}, c_{12}, c_{44}$  : Elastizitätsmoduln in kubischen Kristallen [GPa]

$E_a$  : Aktivierungsenergie [eV]

$E_{\text{photon}}$  : Energie eines Photons [eV]

$E_g$  : Bandlücke des Halbleiters [eV]

$E_{\text{conf}}$  : Lokalisierungsenergie (confinement energy) [eV]

$\Delta E_v$  : Bandkantensprung im Valenzband [eV]

$\epsilon$  : Gitterfehlpassung ( $\epsilon_0 = 0,042$  Fehlanpassung zwischen Si und Ge)

$\epsilon_{ij}$  : Komponenten des Verzerrungstensors

$\hbar$  : Plancksche Konstante [ $1,05457266 \times 10^{-34}$  Js]

$h$  : Schichtdicke bzw. Breite eines Quantentopfes [m]

$I$  : Intensität

$k_B$  : Boltzmann Konstante [ $1,380658 \times 10^{-23}$  J/K]

$k$  : Impuls eines Elektrons [kg m/s]

$L_d$  : Diffusionslänge

$m_0$  : Ruhemasse des Elektrons [ $9,10938975 \times 10^{-34}$  kg]

$m$  : effektive Masse eines Ladungsträgers [kg]

$\Psi$  : Elektronische Wellenfunktion der Schrödingergleichung

$\sigma_{kl}$  : Komponenten des Spannungstensors

$T$  : Temperatur [K]

$T_s, T_{\text{cap}}$  : Substrattemperatur [ $^{\circ}\text{C}$ ]

$x$  : Ge Anteil in einer  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  Legierung

# Anhang B

## Liste der Veröffentlichungen

- U. Denker, M. Stoffel und O. G. Schmidt, “Quantitative evaluation of stress field attenuation in stacks of self-assembled hut cluster island”, Applied Physics Letters, in Druck (2003).
- U. Denker, M. Stoffel und O. G. Schmidt, “Probing the lateral composition of self assembled islands”, Physical Review Letters **90**, 196102 (2003).
- U. Denker, H. Sigg und O. G. Schmidt, “Intermixing in Ge hut cluster islands”, Applied Surface Science, in Druck (2003).
- U. Denker, H. Sigg und O. G. Schmidt, “Composition of self assembled Ge hut clusters”, Materials Science & Engineering B-Solid State Materials for Advanced Technology **101**, 89 (2003).
- M. Stoffel, U. Denker und O. G. Schmidt, “Electroluminescence of self-assembled Ge hut clusters”, Applied Physics Letters **82**, 3236-3238 (2003).
- U. Denker, M. Stoffel, O. G. Schmidt und H. Sigg, “Ge hut cluster luminescence below bulk Ge band gap”, Applied Physics Letters **82**, 454-456 (2003).
- O. G. Schmidt, U. Denker, S. Christiansen und F. Ernst, “Composition of self-assembled Ge/Si islands in single and multiple layers”, Applied Physics Letters **81**, 2614-2616 (2002).
- A. Hesse, J. Stangl, V. Holý, T. Roch, G. Bauer, O. G. Schmidt, U. Denker und B. Struth, “Effect of overgrowth on shape, composition, and strain of SiGe islands on Si(001)”, Physical Review B **66**, 085321 (2002).
- M. W. Dashiell, U. Denker und O. G. Schmidt, “Influence of the Si-Ge interface on phononless radiative recombination in Ge hut clusters grown on Si(001)”, Physica E **13**, 1030-1033 (2002).

- K. M. Haendel, C. Lenz, U. Denker, O. G. Schmidt, K. Eberl und R. J. Haug, “Transport measurements of valence band holes in p-type SiGe quantum well structure containing Ge quantum dots”, *Physica E* **13**, 757-760 (2002).
- U. Denker, M. W. Dashiell, N. Y. Jin-Phillipp und O. G. Schmidt, “Trenches around and between self assembled silicon/germanium islands grown on silicon substrates investigated by atomic force microscopy”, *Materials Science and Engineering B-Solid State Materials for Advanced Technology* **89**, 166-170 (2002).
- M. W. Dashiell, C. Müller, N. Y. Jin-Phillipp, U. Denker, O. G. Schmidt und K. Eberl, “Low temperature epitaxial growth of germanium islands in active regions of silicon interband tunneling diodes”, *Materials Science & Engineering B-Solid State Materials for Advanced Technology* **89**, 106-110 (2002).
- O. G. Schmidt, U. Denker, M. Dashiell, N. Y. Jin-Phillipp, K. Eberl, R. Schreiner, H. Gräbeldinger, H. Schweizer, S. Christiansen und F. Ernst, “Laterally aligned Ge/Si islands: a new concept for faster field-effect transistors”, *Materials Science and Engineering B-Solid State Materials for Advanced Technology* **89**, 101-105 (2002).
- M. W. Dashiell, U. Denker, C. Müller, G. Costantini, C. Manzano, K. Kern und O. G. Schmidt, “Photoluminescence of ultrasmall Ge quantum dots grown by molecular-beam epitaxy at low temperatures”, *Applied Physics Letters* **80**, 1279-1281 (2002).
- M. Cazayous, J. Groenen, J. R. Huntzinger, A. Mlayah, U. Denker und O. G. Schmidt, “A new tool for measuring island dimensions and spatial correlations in quantum dot multilayers: Raman scattering interferences”, *Materials Science and Engineering B-Solid State Materials for Advanced Technology* **88**, 173-176 (2002).
- K. Eberl, R. Duschl, O. G. Schmidt, U. Denker und R. Haug, “Si-based resonant inter- and intraband tunneling diodes”, *Journal of Crystal Growth* **227**, 770-776 (2001).
- M. W. Dashiell, U. Denker und O. G. Schmidt, “Photoluminescence investigation of phononless radiative recombination and thermal-stability of germanium hut clusters on silicon(001)”, *Applied Physics Letters* **79**, 2261-2263 (2001).
- U. Denker, O. G. Schmidt, N. Y. Jin-Phillipp und K. Eberl, “Trench formation around and between self-assembled Ge islands on Si”, *Applied Physics Letters* **78**, 3723-3725 (2001).
- O. G. Schmidt, U. Denker, K. Eberl, O. Kienzle, F. Ernst und R. J. Haug, “Resonant tunneling diodes made up of stacked self-assembled Ge/Si islands”, *Applied Physics Letters* **77**, 4341-4343 (2000).

- 
- O. G. Schmidt, N. Y. Jin-Phillipp, C. Lange, U. Denker, K. Eberl, R. Schreiner, H. Grabeldinger und H. Schweizer, “Long-range ordered lines of self-assembled Ge islands on a flat Si(001) surface”, *Applied Physics Letters* **77**, 4139-4141 (2000).
  - O. G. Schmidt, U. Denker, K. Eberl, O. Kienzle und F. Ernst, “Effect of overgrowth temperature on the photoluminescence of Ge/Si islands”, *Applied Physics Letters* **77**, 2509-2511 (2000).



# **Anhang C**

## **Verschiedenes**

## C.1 Danksagungen

Für die Unterstützung während dieser Arbeit danke ich

- Prof. Dr. K. von Klitzing für die Betreuung der Arbeit und die Übernahme der Berichterstattung.
- Prof. Dr. R. J. Haug für das Interesse an der Arbeit und die Übernahme der Berichterstattung.
- Dr. habil. O. G. Schmidt für zahlreiche interessante Diskussionen.
- Meinen Kollegen an der SiGeC MBE (Dr. M. Stoffel, Ph.D. M. Dashiell, Ph. D. G. S. Kar und W. Winter) für in jeder Hinsicht gute Wachstumsbedingungen und ihren tatkräftigen Einsatz zur Instandhaltung der MBE.
- C. Müller für zahlreiche AFM-Messungen.
- meinen Bürokollegen H. Heidemeyer und Y. Manz für den Einblick in selbstorganisiertes Wachstum im III/V System.
- allen Mitgliedern der MBE Gruppe (C. Deneke, M. Hauser, Ph. D. A. Rastelli, F. Schwerdt, R. Songmuang, K. Töttemeyer, Dr. R. Zapf-Gottwick, S. Kiravittaya) für die gute Zusammenarbeit.
- der Gruppe von Klitzing, insbesondere allen, die im Reinraum tätig sind und waren, für die gute Arbeitsatmosphäre.
- Dr. N. Y. Jin-Phillipp für TEM-Aufnahmen.
- Prof. Dr. G. Bauer für die Möglichkeit, FEM Rechnungen in Linz durchzuführen.
- A. Hesse und S. Stuzcki für Einführung in die FEM Software und die Hilfe bei der Erstellung der Modelle.
- Dr. H. Sigg, Dr. A. Beyer und O. Kirfel für die Einladung zu PL-Messungen in Villigen und für die Hilfe beim Vorbereiten des Messaufbaus.
- PD Dr. D. Grützmacher und Dr. S. Mentese für die Bereitstellung relaxierter SiGe Puffer..
- S. Hausfeld und M. Calmer für das gewissenhafte Korrekturlesen des Manuskripts.

Besonderer Dank geht an meine Eltern dafür, dass sie mich während meiner Ausbildung und bei der Anfertigung dieser Arbeit immer wieder ermutigt und unterstützt haben.

## C.2 Lebenslauf

### Persönliche Angaben

Name	Ulrich Denker
Adresse	Rotenwaldstraße 80, D-70197 Stuttgart
Geburtsdatum	14.09.1973 in Osnabrück
Staatsangehörigkeit	deutsch

### Werdegang

Seit 02.2000	Doktorand am Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Stuttgart Thema der Promotion: “Selbstorganisierte Germanium/Silizium Inseln: Wachstumsexperimente und Modelle zur Interdiffusion” Betreuer: Prof. Klaus von Klitzing
01.2000	Diplom
10.1998-12.1999	Diplomarbeit am Institut für Festkörperphysik, Abteilung Nanostrukturen, der Universität Hannover Thema: “Transport in selbstorganisierten Silizium-Germanium Strukturen” Betreuer: Prof. Rolf Haug
09.1996	Vordiplom
10.1994-01.2000	Student an der Universität Hannover im Studiengang Physik (Diplom)
10.1993-10.1994	Zivildienst im Medizinaluntersuchungsamt Osnabrück
06.1993	Abitur am Gymnasium Ursulaschule in Osnabrück
08.1980-06.1993	Schulbildung in Osnabrück

### **C.3 Selbständigkeitserklärung**

Ich erkläre hiermit, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig verfasst und alle benutzten Hilfsmittel und Quellen vollständig angegeben habe. Diese Dissertation wurde nicht vorher als Diplomarbeit oder ähnliche Prüfungsarbeit verwendet.

Stuttgart, 29.Juli 2003

Ulrich Denker