

Surfactant-modifizierte Epitaxie für Ge/Si-Heterobauelemente

Von der Fakultät für Elektrotechnik und Informatik der Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover zur Erlangung des akademischen Grades Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.) genehmigte Dissertation

von Dipl.-Phys. Tobias Wietler

geboren am 28.04.1972 in Langenhagen

2010

1. Referent: Prof. Dr. K. R. Hofmann
2. Referent: Prof. Dr. H. Pfnür
Tag der Promotion: 27.11.2009

Kurzfassung

Diese Arbeit beschreibt zum ersten Mal die Surfactant-modifizierte Epitaxie glatter, relaxierter Germaniumschichten mit niedrigen Defektdichten auf Si(001). Die Rauigkeit $1 \mu\text{m}$ dicker Filme ist kleiner als 1 nm . Sie sind bis auf eine geringe Zugspannung, die durch die unterschiedliche thermische Ausdehnung beim Abkühlen hervorgerufen wird, vollständig relaxiert. Die Dichte der Film durchdringender Versetzungen wird mit TEM zu $1,6 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$ und mit XRD zu $6 \times 10^7 \text{ cm}^{-2}$ bestimmt. Germaniumschichten, die mit SME auf Si(111) gewachsen werden, zeigen keine wesentlichen Unterschiede in den strukturellen Parametern.

Zum ersten Mal wird der Einfluss der Sb-Bedeckung auf den Relaxationsprozess und damit auf die strukturellen Parameter der Germaniumschichten bei der SME auf Si(001) experimentell nachgewiesen. Die Entwicklung der Filmtopografie während des Wachstums ist entscheidend für den Ausgleich der Gitterfehlpassung durch ein periodisches Versetzungsnetzwerk an der Grenzfläche zum Substrat. Auf Si(111) bildet sich ein trigonales Netzwerk aus 90° -Partialversetzungen mit einem Versetzungsabstand von 8 nm , auf Si(001) ein quadratisches Netzwerk aus vollständigen Stufenversetzungen mit einem Abstand von 10 nm . Für beide Orientierungen liegen sowohl Burgersvektor als auch Linienrichtung der Versetzungen parallel zur Grenzfläche. Eine solche Konfiguration, bei der die Versetzungen nicht dem Hauptgleitsystem des Diamantgitters angehören, wurde für die (001)-Orientierung in der Literatur noch nicht beschrieben. Es wird ferner gezeigt, dass der abrupte Spannungsabbau bei der SME die Eindiffusion von Silizium in die Germaniumschicht unterdrückt. Diese Arbeit untersucht erstmals den dickenabhängigen Verlauf der Restverzerrung in Germaniumschichten auf (111)- und (001)-Substraten. Eine mögliche Ursache für die Durchstoßversetzungen in $1 \mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten ist die allmähliche plastische Relaxation, die mit steigender Filmdicke nach der Bildung des Versetzungsnetzwerks einsetzt.

Die Hintergrunddotierung durch den Sb-Einbau während der Epitaxie auf Si(001) ist kleiner als $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Es wird zum ersten Mal demonstriert, dass ein Übergang von SME zu Germaniumhomoepitaxie ohne Einbußen bei der strukturellen Qualität möglich ist. Eine vergleichende Analyse der schichtdickenabhängigen Elektronenhalbbeweglichkeit ergibt für (001)-orientierte Schichten $2350 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ bei einer Dotierung von $6,3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ und für (111)-Proben $3250 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ bei einer Dotierung von $2,6 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, was jeweils den Literaturdaten entspricht. Die Analyse weist auf eine elektrische Aktivität der Versetzungen an der Grenzfläche hin, die durch Grenzflächenzustände eine Inversionsschicht hervorrufen könnten. Eine detaillierte Untersuchung dieser Frage geht jedoch über den Rahmen dieser Arbeit hinaus. Zur Untersuchung der Löcherhalbbeweglichkeit wird die Kompensationsdotierung durch Koverdampfen von Bor etabliert. Für Dotierkonzentrationen oberhalb von $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ stimmen die gemessenen Werte mit denen von Bulk-Germanium überein. Die maximale Löcherbeweglichkeit beträgt $1576 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ bei 300 K .

Abstract

In this work, the surfactant-mediated epitaxy of smooth relaxed germanium films with low defect densities on silicon(001) is established for the first time. A surface roughness below one nanometer is found for $1\ \mu\text{m}$ thick layers, which are fully relaxed except for a small tensile strain induced in the cooling process due to the different thermal expansion coefficients. A density of $1,6 \times 10^8\ \text{cm}^{-2}$ of film penetrating defects is observed by TEM while XRD rocking curve analysis yields $6 \times 10^7\ \text{cm}^{-2}$. The structural properties do not differ significantly from those of germanium films grown by SME on Si(111).

For the first time, it is demonstrated that Sb-coverage controls the relaxation process in SME on Si(001) and, thus, the structural parameters of the resulting germanium layers. The development of film topography during growth is crucial as it leads to the formation of a misfit compensating periodic dislocation network at the interface with the substrate. For the (111)-orientation, a trigonal array of 90° -dislocations with a distance of $8\ \text{nm}$ is observed, while on Si(001) a square network of pure edge dislocations with a distance of $10\ \text{nm}$ forms. In both cases burgers vector and line direction of the misfit dislocations are parallel to the interface. Remarkably, the dislocations found on Si(001) are not part of the main slip system. So far, such a configuration has not been described in literature. Furthermore, it is shown that the abrupt strain relaxation in SME suppresses the interdiffusion of silicon into the germanium film. In this work, the dependence of residual strain on layer thickness is analyzed in germanium films on Si(111) and Si(001) for the first time. A gradual plastic strain relief that sets on after the initial formation of the misfit dislocation network is a possible cause of the film penetrating defects observed in $1\ \mu\text{m}$ thick layers.

For (001)-oriented samples, the inherent background doping due to the incorporation of Sb during growth is found to be below $5 \times 10^{16}\ \text{cm}^{-3}$. It is shown for the first time that switching from SME to germanium homoepitaxy causes no loss in structural perfection. A comparative study of thickness dependent electron hall mobility results in $2350\ \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ and a doping concentration of $6,3 \times 10^{16}\ \text{cm}^{-3}$ for germanium films on Si(001) and $3250\ \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ with a doping concentration of $2,6 \times 10^{16}\ \text{cm}^{-3}$ on Si(111), both in good agreement with respective bulk germanium values. The analysis suggests an electrical activity of the misfit dislocations at the interface, which could result in an inversion layer induced by interface states. However, a detailed electrical investigation of this issue is beyond the scope of this work. Compensation doping by coevaporation of boron is introduced into SME in order to investigate the hole hall mobility. For doping concentrations above $5 \times 10^{16}\ \text{cm}^{-3}$ the measured values correspond to bulk germanium data. The maximum hole mobility is $1576\ \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ at room temperature.

Schlagwörter: Germanium, Silizium, Surfactant-modifizierte Epitaxie

Keywords: germanium, silicon, surfactant-mediated epitaxy

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Anwendungsmöglichkeiten und Anforderungen für Germaniumschichten auf Siliziumsubstraten	1
1.2	Wachstum von Germanium auf Silizium	4
1.3	Aufbau der Arbeit	8
2	Grundbegriffe der Ge/Si-Heteroepitaxie	9
2.1	Versetzungen	9
2.2	Elastische Verzerrung verspannter Epitaxieschichten	14
2.3	Wachstumsmodi	15
2.4	Relaxationsmechanismen	16
2.4.1	Elastische Relaxation	16
2.4.2	Plastische Relaxation	16
2.5	Interdiffusion	19
2.6	Thermische Ausdehnung und thermische Spannung	20
3	Epitaxie von Germanium auf Silizium: ein Überblick	24
3.1	Ge/Si-Heteroepitaxie ohne Surfactant	24
3.2	Ge/Si-Heteroepitaxie mit Surfactant	25
3.2.1	Verlauf des Wachstums bei der SME	26
3.2.2	Hintergrunddotierung und Bauelemente	30
4	Messmethoden	32
4.1	Charakterisierung mit Röntgendiffraktometrie	32
4.1.1	$\Theta - 2\Theta$ -Scans	34
4.1.2	ω -Scans	35
4.1.3	Reziproke Gitterkarten	36
4.2	TEM	38
4.2.1	Analyse von Kristalldefekten im Beugungscontrast	39
4.2.2	EDXS	40
4.3	Elektronenbeugung	43
4.4	Sekundärionen Massenspektroskopie	43
4.5	Rasterkraftmikroskopie	45

5	Experimentelle Durchführung	49
5.1	MBE-Anlage	49
5.2	Kalibration der Wachstumsraten	51
5.3	Probenreinigung	53
5.4	Ein typischer Wachstumsprozess	55
6	SME von Ge auf Si(111)	57
6.1	Strukturelle Eigenschaften von Germaniumschichten auf Si(111)	57
6.2	Das Versetzungsnetzwerk an der Grenzfläche zum Si(111)-Substrat	60
6.2.1	Ein geometrisches Modell	60
6.2.2	Die Gleichgewichtskonfiguration	61
6.2.3	Experimentelle Ergebnisse	67
6.3	Restverzerrung von Germaniumschichten auf Si(111)	71
7	SME von Ge auf Si(001)	75
7.1	Strukturelle Eigenschaften von Germaniumschichten auf Si(001)	75
7.1.1	Defektdichte	82
7.1.2	Das Versetzungsnetzwerk an der Grenzfläche Ge/Si(001)	84
7.2	Der Wachstumsmechanismus bei der SME auf Si(001)	89
7.2.1	Relaxationsmechanismus	89
7.2.1.1	Modellvorstellung	89
7.2.1.2	Experimente zur Sb-induzierten Oberflächentopografie	91
7.2.2	Restverzerrung von Germaniumschichten auf Si(001)	103
7.3	Hintergrunddotierung	105
7.3.1	Intrinsische Germaniumschichten mit SME?	108
7.4	Zusammenfassung	111
8	Ladungsträgerbeweglichkeit in Germaniumschichten auf Si(111) und Si(001)	113
8.1	Theorie der Hall-Messung	113
8.1.1	Driftbeweglichkeit	113
8.1.2	Leitfähigkeitsbeweglichkeit	114
8.1.3	Halleffekt und Hallbeweglichkeit	114
8.2	Durchführung der Hall/van-der-Pauw-Messungen	116
8.3	Elektronenbeweglichkeit	117
8.4	Löcherbeweglichkeit	124
8.5	Zusammenfassung	126
9	Zusammenfassung und Ausblick	127

A Anhang	131
A.1 Bestimmung des Relaxationsgrades	131
A.2 Abschätzungen zur Halbwertsbreite von Rockingkurven	133
A.3 Uniformität der Schichtdicke	135
Verzeichnis der Symbole und Abkürzungen	136
Literaturverzeichnis	149
Publikationsverzeichnis	171

1 Einleitung

Das verstärkte Interesse an der Integration von Germanium in die siliziumbasierte Mikroelektronik beruht auf der Vision, mit Hilfe neuer Materialien die Grenzen der bewährten Si-CMOS Technologie zu erweitern und neue Funktionalitäten zu erschließen. In diesem Kapitel werden zunächst mögliche Anwendungen von Germaniumschichten auf Siliziumsubstraten aufgezeigt und die daraus resultierenden Anforderungen beschrieben, ehe auf die Verfahren zur Herstellung solcher Schichten eingegangen wird. Abschließend wird der Aufbau dieser Arbeit erläutert.

1.1 Anwendungsmöglichkeiten und Anforderungen für Germaniumschichten auf Siliziumsubstraten

Über Jahrzehnte basierte der Fortschritt in der Mikroelektronik im Wesentlichen auf der Verkleinerung der Strukturmaße der Bauelemente unter Einhaltung des “Moore’schen Gesetzes” [1]. Dabei wurden höhere Schaltfrequenzen durch eine Steigerung des Drainsättigungsstroms erreicht. Gleichzeitig wurde die Versorgungsspannung immer weiter reduziert, um die Verlustleistung bei der steigenden Anzahl von Transistoren pro Chipfläche zu begrenzen. Die geometrische Skalierbarkeit erreicht heute allerdings physikalische Grenzen [2, 3]. Denn der Drainsättigungsstrom eines extrem verkleinerten MOSFETs wird nicht mehr durch die Gatelänge, sondern durch die Injektionsgeschwindigkeit der Ladungsträger in den Kanal bestimmt [4, 5, 6, 7]. Die maximal erreichbare Injektionsgeschwindigkeit hängt allein von den Transporteigenschaften des Kanalmaterials ab. Man kann zeigen, dass insbesondere die Niederfeldbeweglichkeit von Bedeutung ist [6]. Als Ausweg aus diesem Dilemma stagnierender Drainsättigungsströme wird für Gatelängen unterhalb von 32 nm der Einsatz von Materialien mit gegenüber Silizium günstigeren Transporteigenschaften in Betracht gezogen [8, 9]. Abbildung 1.1a zeigt die Löcher- und Elektronenbeweglichkeiten einiger Halbleiter, die als Alternative zu dem aktuell eingesetzten verspannten Silizium genannt werden [3, 10, 11]. Da Germanium die höchste Löcherbeweglichkeit aufweist, ist es vor allem für p-Kanal MOSFETs interessant. Für n-Kanal MOSFETs werden neben Germanium sogar einige III-V Halbleiter wegen ihrer extrem hohen Elektronenbeweglichkeiten in Betracht gezogen, allerdings ist Germanium technologisch weitaus kompatibler zu der bestehenden Si-Technologie.

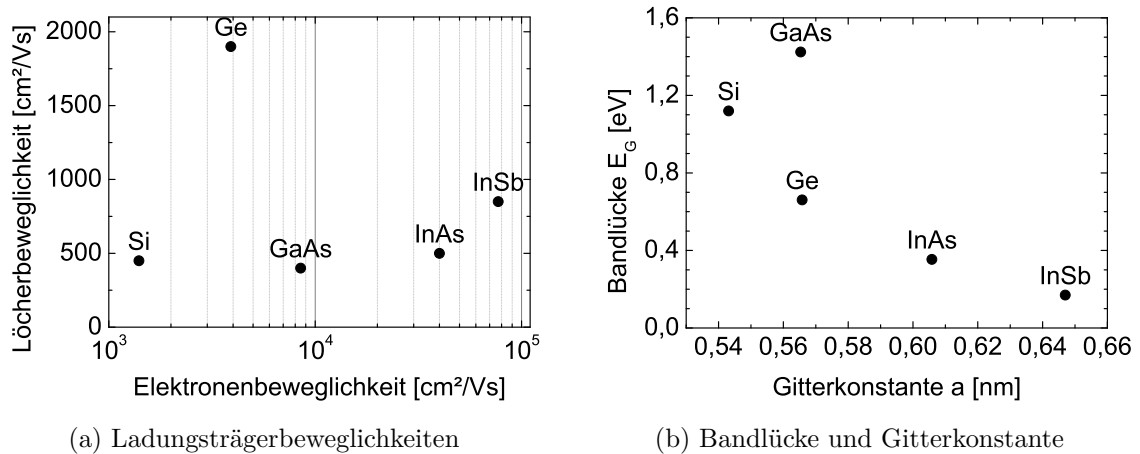


Abb. 1.1: Eigenschaften alternativer Kanalmaterialien.

Im Zuge der Einführung so genannter high- k Dielektrika¹ in die Si-CMOS-Technologie [12, 10, 11, 13] rückt die Verwendung von Germanium ebenfalls in den Fokus. Einerseits entfällt mit der Substitution des SiO_2 ein wesentliches Argument für die Dominanz der Si-basierten MOS-Technologie. Andererseits ist Germanium mit dem für high- k Materialien reduzierten Temperaturbudget besser kompatibel, da z.B. die Aktivierung von implantierten Dotieratomen im Vergleich zu Silizium bei geringeren Temperaturen erfolgen kann.

Abbildung 1.1b macht noch einen weiteren Vorteil des Germaniums deutlich. Die meisten III-V Halbleiter weisen eine erhebliche Gitterfehlpassung zum Silizium auf, was die Integration erschwert. Bezogen auf Germanium erscheint diese Hürde weniger hoch, was sich z.B. in der kommerziellen Herstellung von GaAs-basierten Solarzellen auf Ge-Substraten zeigt [14, 15, 16, 17, 18, 19]. Damit könnte die Integration von Germanium der Schlüssel zur Einbindung von Bauelementen auf III-V-Basis wie HEMTs², RTDs³ oder optoelektronischer Elemente in die Si-Technologie sein.

Über diese Einsatzmöglichkeiten, die noch mit weiteren erheblichen Schwierigkeiten hinsichtlich der Vereinbarkeit von Si- und III-V-Technologie verbunden sind, hinaus erlaubt bereits Germanium alleine die Entwicklung optoelektronischer Komponenten auf Silizium. Das Absorptionsvermögen von Germanium ist im nahen Infrarot, speziell in dem für die Telekommunikation interessanten Wellenlängenbereich bei $1,55 \mu\text{m}$, um ein Vielfaches

¹Das sind Materialien mit höherer Dielektrizitätskonstante ϵ_r oder k als SiO_2 ($k_{\text{SiO}_2} = 3,9$), die eingesetzt werden sollen, um bei konstanter Kapazität eine größere physikalische Schichtdicke des Isolators im Gate-Stack zu ermöglichen. Diese ist erforderlich, da der quantenmechanische Tunnelstrom, der über den Gateisolator (SiO_2) von MOSFETs bei Isolatorstärken unterhalb von $1,5 \text{ nm}$ fließt, dramatisch zunimmt, was zu einer nicht mehr tolerierbaren Verlustleistung führt.

²high electron-mobility transistor

³resonant tunneling diode

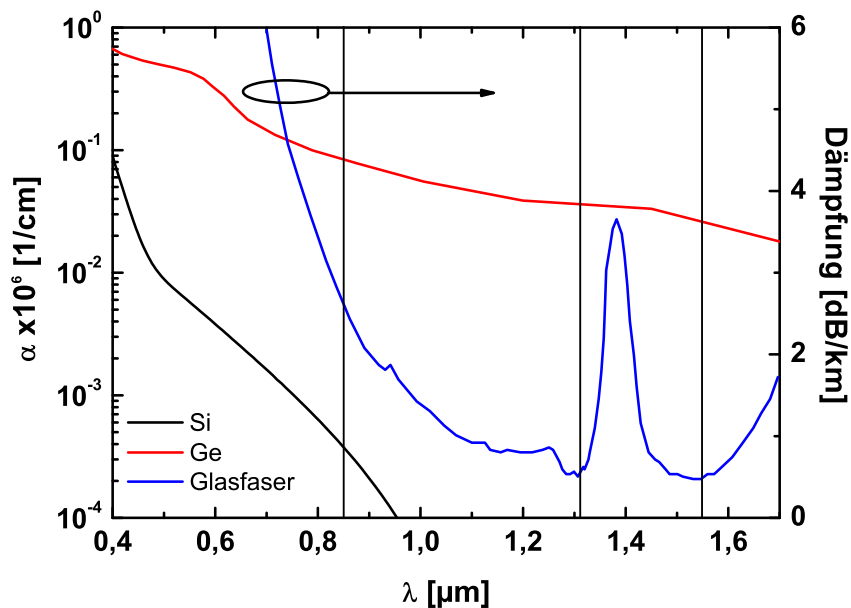


Abb. 1.2: Verlauf der Absorptionskoeffizienten von Silizium und Germanium über der Wellenlänge: Zusätzlich gezeigt ist die Dämpfungskurve von Glasfasermaterial. Die drei vertikalen Linien kennzeichnen die Emissionslinie von GaAs-Lasern bei 850 nm und die Transmissionsfenster der Glasfaser bei 1310 und 1550 nm , die für die Telekommunikation genutzt werden. Man erkennt, dass der Absorptionskoeffizient von Germanium im Bereich der Transmissionsfenster um ein Vielfaches höher ist als der von Silizium.

höher, als das bei Silizium der Fall ist (s. Abbildung 1.2). Somit könnte man beispielsweise Hochgeschwindigkeitsfotodetektoren im nahen Infrarotbereich realisieren, die als integrierte optische Empfänger in Local Area Networks oder für die on-chip Kommunikation eingesetzt werden können [20, 21, 22, 23, 24].

Alle Anwendungen setzen allerdings Germaniumschichten auf Siliziumsubstraten mit ausreichend guter elektronischer bzw. optischer Qualität voraus. Was für Anforderungen ergeben sich daraus?

Eine in der Literatur viel diskutierte Frage ist die nach der maximal vertretbaren Defektdichte, wobei hier solche Defekte gemeint sind, die den aktiven Bereich der Germaniumschicht im jeweiligen Bauelement durchdringen und dann an die Oberfläche stoßen. LeGoues nennt als Richtgröße eine tolerierbare Defektdichte von $1 \times 10^7 \text{ cm}^{-2}$ für Bauelemente, die durch Majoritätsladungsträger bestimmt sind, und $1 \times 10^4 \text{ cm}^{-2}$ für solche, die durch Minoritäten dominiert sind [25]. Experimentelle Untersuchungen ergaben, dass die Elektronenhallbeweglichkeit erst ab Defektdichten oberhalb von $3 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$ vermindert wird [26]. Leckströme

von pn-Übergängen werden durch Defektdichten im Bereich von $1 \times 10^7 - 1 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$ nicht wesentlich beeinflusst [27]. Aus ökonomischer Sicht werden jedoch für eine wirtschaftlich sinnvolle Ausbeute bei der Fertigung Defektdichten unterhalb von 1 cm^{-2} gefordert [28].

Auch der Einfluss von Misfit-Versetzungen auf die Elektronenhallbeweglichkeit ist experimentell untersucht worden [26]. Bei Raumtemperatur haben Versetzungen im Abstand von etwa 100 nm keinen Einfluss mehr auf die Ladungsträgerbeweglichkeit. Daraus ergibt sich eine minimale Schichtdicke für relaxierte epitaktische Filme. Für maximale Flexibilität bei der Auswahl des Anwendungsbereichs sollte die Schichtdicke beliebig wählbar sein.

Ideal wäre es auch, wenn keine Einschränkungen bezüglich der kristallografischen Orientierung der Germaniumschicht vorlägen. Es konnte nämlich gezeigt werden, dass von der derzeit in der CMOS-Technologie bevorzugten (001)-Richtung abweichende Orientierungen höhere Ladungsträgerbeweglichkeiten liefern [29, 30, 31, 32, 33].

Die Rauigkeit äußerer und innerer Grenzflächen sollte generell bis auf wenige Nanometer minimiert werden, da sie insbesondere die Kanalbeweglichkeit von MOSFETs reduzieren können [34, 33]. Für die Integration von III-V Halbleitern müssen monoatomare Stufen vermieden werden, da sie zu so genannten Antiphasengrenzen führen, die verheerend für die Leistungsfähigkeit von Bauelementen sind [35, 15].

Für den Einsatz in Fotodetektoren wären leicht zugverspannte Germaniumschichten optimal. Einerseits verringert sich infolge der Zugspannung die Bandlücke, was zu einer erhöhten Ansprechempfindlichkeit führt. Andererseits wird der Detektionsbereich zu größeren Wellenlängen hin erweitert, so dass das in der Telekommunikation genutzte Spektrum noch besser abgedeckt wird [36]. Da verspannte Halbleiterschichten höhere Ladungsträgerbeweglichkeiten in MOSFETs ermöglichen [37, 38], wäre ein einstellbarer Spannungszustand der Germaniumschichten optimal.

Die für die jeweilige Anwendung erforderlichen Eigenschaften könnten durch einkristalline epitaktische Schichten erreicht werden. Obwohl beide Halbleiter im Diamantgitter kristallisieren, ist das Wachstum einkristalliner Germaniumschichten auf Siliziumsubstraten wegen der erheblich verschiedenen Gitterkonstanten nicht ohne weiteres möglich.

1.2 Wachstum von Germanium auf Silizium

Aufgrund der um 4,2% größeren Gitterkonstante wächst reines Germanium pseudomorph, das heißt defektfrei und an das Wirtsgitter angepasst, nur bis zu einer Dicke von wenigen Monolagen als zweidimensionaler Film auf Silizium auf. Danach setzt die Bildung von dreidimensionalen Inseln ein, so dass in der Folge sehr defektreiche, raue Filme entstehen [39]. Unterdrückt man diesen Wachstumsmodus z.B. durch Epitaxie bei niedrigen Temperaturen, bleibt der Film glatt [40]. Die zunächst verspannten Ge-Schichten relaxieren durch die

Generation von so genannten Misfit-Versetzungen an der Filmoberfläche, die dann durch den Film zur Grenzfläche gleiten. Es entstehen kurze Misfit-Versetzungssegmente parallel zur Grenzfläche, die durch so genannte Durchstoßversetzungen (engl.: threading dislocations) mit der Kristalloberfläche verbunden sind. Die Dichte dieser Versetzungsarme, die durch die Schicht zur Filmoberfläche stoßen, erreicht Werte von 10^{12} cm^{-2} [40], was die so gewachsene Schicht für elektronische oder optische Anwendungen unbrauchbar macht. Seit Ende der 1980er Jahre dauert die Suche nach dem optimalen Verfahren zur Herstellung von Germaniumschichten auf Siliziumsubstraten an. Eine Übersicht über die im Folgenden vorgestellten Verfahren gibt Tabelle 1.1.

Setzt man das Wachstum über die Phase des dreidimensionalen Inselwachstums hinaus bis zu größeren ($> 1 \mu\text{m}$) Germaniumschichtdicken fort, erhält man bei Wachstumstemperaturen oberhalb von $600 \text{ }^\circ\text{C}$ auf Si(001) relativ defektarme Schichten ($\sim 1 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$). Die hohen Temperaturen können aber auch zu einer Facettierung der Grenzfläche zwischen Schicht und Substrat sowie zu starker Oberflächenrauigkeit führen [41]. Alternativ wurde versucht mit einem mehrstufigen Wachstumsprozess, bei dem zunächst eine relativ dünne Ge-Schicht bei niedrigen Temperaturen ($\leq 500 \text{ }^\circ\text{C}$) gewachsen wird. Dann wird die Temperatur erhöht, so dass die Relaxation und Versetzungsbildung in der ersten Schicht forciert werden. Auf dieser Schicht lassen sich dann bei höheren Temperaturen strukturell hochwertigere Ge-Filme wachsen [41, 42, 43, 44, 45]. Eine Kombination dieser mehrschrittigen Wachstums mit nachfolgenden Temperschritten kann zu einer Reduzierung der verbleibenden Durchstoßversetzungen um eine Größenordnung, aber auch zu facettierten Grenzflächen und starker Eindiffusion von Silizium in die Germaniumschicht führen [41, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 27].

Eine Möglichkeit zur Herstellung von sehr dünnen ($< 5 \text{ nm}$) defektfreien Germaniumschichten direkt auf Siliziumsubstraten liegt darin, die Relaxation zu vermeiden, indem pseudomorphe Schichten bei niedrigen Temperaturen gewachsen werden [52].

Neben dem direkten Wachstum, wurden verschiedene andere Strategien zur Herstellung glatter, defektarmer Germaniumschichten auf Siliziumsubstraten entwickelt. So kann man z.B. relaxierte oder verspannte Germaniumschichten auf $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Pufferschichten mit abgestufter Zusammensetzung wachsen, wobei der Ge-Gehalt kontinuierlich mit etwa 5-10% pro Mikrometer Schichtdicke gesteigert wird [53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60]. Mit dieser Methode der so genannten gradierten Puffer (engl.: graded buffer) erreicht man Defektdichten von $1,1 \times 10^7 \text{ cm}^{-2}$ bei Oberflächenrauigkeiten von etwa 35 nm . Durch Einführung von CMP⁴-Schritten können die Oberflächenrauigkeit und die Defektdichten reduziert werden [61]. Ein großer Nachteil der gradierten Pufferschichten ist jedoch ihre Dicke von vielen Mikrometern.

Alternativ zu diesen gradierten Pufferschichten werden auch isolierende Zwischenschichten verwendet. Bei der Ge-Kondensationstechnik wird zunächst eine epitaktische SiGe-Schicht

⁴chemisch-mechanisches Polieren, engl.: chemical-mechanical polishing

Methode	Epitaxie	Puffer- dicke [μm]	Ge- Dicke [μm]	Defektdichte [cm^{-2}]	Oberflächen- raugigkeit RMS [nm]	Quelle
gradierte Puffer	MBE/CVD	23	1,5	$1,1 \times 10^7$	36	[53, 61]
gradierte Puffer + CMP	MBE/CVD	11	1,5	$2,3 \times 10^6$	24	[61]
2-Schritt	MBE	0,02	2,5	4×10^6	k. A.	[46, 42, 43, 45]
2-Schritt + Tempern	MBE/CVD	0,2	1,5-2,5	5×10^6 - 2×10^7	k. A.	[41, 47, 48, 49, 27]
LT-Puffer	MBE	0,3	0,5	1×10^8	k. A.	[62, 63, 21]
ultra-dünnes Ge	CVD	0	0,0034	0	k. A.	[52]
GeC-Puffer	MBE/CVD	0,03	0	3×10^5	k. A.	[64, 65]
Ge-Konden- sation	CVD	SiO ₂	0,03	$1,1 \times 10^7$	0,4	[66, 67, 31, 68]
Schicht- transfer	GOI	SiO ₂	k. A.	0	k. A.	[28]
lokale LPE	LPE	SiO ₂	0,5	5×10^5	2	[69, 70]

Tab. 1.1: Verfahren zur Herstellung epitaktischer Germaniumschichten auf Siliziumsubstra-
ten.

auf einem SOI⁵-Substrat gewachsen. Anschließend wird der Si-Anteil durch thermische Oxidation sukzessive reduziert, bis nur noch reines Germanium auf einer SiO₂-Schicht übrig bleibt [66, 67, 31, 68]. Je höher der Germaniumgehalt der resultierenden Germaniumschicht sein soll, desto defektreicher wird sie allerdings [66]. Außerdem ist die Schichtdicke auf einige 10 nm limitiert [31]. Eine GOI-Schicht kann man auch mittels Schichttransfer von einem Ge-Wafer per Wafer-Bonding [28, 71] oder SmartCut [72] herstellen. Der Vorteil hierbei ist, dass durch Verwendung defektfreier Germaniumwafer auch defektfreie GOI-Schichten erzielt werden können. Ein Nachteil besteht darin, dass diese Methode nur global anwendbar ist

Eine weitere Möglichkeit besteht darin, die bei der Relaxation entstehenden Versetzungen in bestimmten Bereichen der Schicht zu lokalisieren. Beispielsweise kann durch Einbringen geringer Mengen substitutionell eingebauten Kohlenstoffs die Ausbreitung von Versetzungsarmen durch die Schicht blockiert werden [64, 65, 73]. Die resultierenden Ge_yC_{1-y}-Filme können entweder direkt als aktive Schicht [74] oder als Puffer für nachfolgende Germaniumschichten verwendet werden [64].

In einem anderen Ansatz wird zunächst eine relativ dünne Germaniumschicht bei so niedrigen Temperaturen gewachsen, dass sie zahlreiche Punktdefekte enthält, die als Keime für Versetzungen dienen können. Im folgenden Schritt wird dann die Temperatur erhöht, so dass die Relaxation und Versetzungsbildung in der Niedertemperaturschicht forciert werden. Auf dieser Niedertemperaturpufferschicht lassen sich dann bei höheren Temperaturen strukturell hochwertige Ge-Filme wachsen [62, 63, 21].

Mit einer lateralen Lokalisierung der Versetzungen wird beim so genannten „epitaxial necking“⁶ gearbeitet. Dabei wird das Substrat mit einer SiO₂-Schicht bedeckt, in der mittels Lithografie kleine Fenster geöffnet werden. Die nachfolgend aufgebraachte Ge-Schicht wächst nur in den Fenstern epitaktisch und relaxiert, wobei die Durchstoßversetzungen auf die Fensterbereiche beschränkt bleiben („Einschnürung“). Auf der SiO₂-Schicht wird durch selektives Wachstum [75] oder Flüssigphasenepitaxie [70, 69] eine relaxierte Ge-Schicht gewachsen, wobei die kristallinen Bereiche in den Fenstern als Keime dienen.

Eine Alternative zur Kontrolle des Relaxationsprozesses ist der Einsatz oberflächenaktiver Substanzen, so genannter Surfactants⁷ [76]. Dabei bewirkt der Surfactant, der während des Wachstums auf der Filmoberfläche aufschwimmt, eine Modifikation der Anisotropie der Oberflächenenergie und beeinflusst zudem die Diffusion auftreffender Adatome. Mit dieser Methode, der so genannten Surfactant-modifizierten Epitaxie⁸ (SME), können relaxierte, defektarme Ge-Schichten in bauelementtauglicher Qualität direkt auf Siliziumsubstraten gewachsen werden. Die SME ist Gegenstand dieser Arbeit und wird in Abschnitt 3.2 näher vorgestellt.

⁵engl.: Silicon on Insulator

⁶aus dem Engl.: necking = einschnüren

⁷aus dem Engl., abgeleitet von: surface active agent

⁸engl.: surfactant-mediated epitaxy

Zusammenfassend kann man sagen, dass sich, obwohl mit allen genannten Verfahren schon elektronische bzw. optoelektronische Bauelemente demonstriert wurden, noch keine Methode, als die optimale Lösung zur Herstellung von Germaniumschichten für Ge/Si-Heterobauelemente herauskristallisiert hat.

1.3 Aufbau der Arbeit

In dieser Arbeit wird das Wachstum relaxierter Germaniumschichten auf (111)- und (001)-orientierten Siliziumsubstraten mittels Surfactant-modifizierter Epitaxie untersucht. Die Eigenschaften solcher Schichten werden im Hinblick auf ihre Eignung für die Herstellung elektronischer Bauelemente charakterisiert. Ein besonderes Augenmerk richtet sich auf das Wachstum auf Si(001), da diese Orientierung den Standard in der siliziumbasierten CMOS-Technologie darstellt.

In Kapitel 2 werden die Grundbegriffe der Heteroepitaxie mit Gitterfehlpassung und insbesondere die Mechanismen des Spannungsauf- und -abbaus behandelt. Das dritte Kapitel fasst den Wissensstand zu den Mechanismen bei der Epitaxie von Germanium auf Silizium mit und ohne Surfactant zusammen. Die zur strukturellen Untersuchung der Proben in dieser Arbeit verwendeten Methoden werden in Kapitel 4 beschrieben, ehe in Kapitel 5 die Darstellung der experimentellen Durchführung folgt. In Kapitel 6 werden die neu gewonnenen Erkenntnisse zur SME von Germanium auf Si(111) erläutert. Anschließend werden zum ersten Mal Bedingungen für das Wachstum relaxierter Germaniumschichten mit niedrigen Defektdichten auf Si(001) beschrieben. Der Untersuchung des Relaxationsmechanismus, der strukturellen Eigenschaften und der Hintergrunddotierung der resultierenden Schichten ist Kapitel 7 gewidmet. Im Hinblick auf eine mögliche Anwendung in elektronischen Bauelementen wird in Kapitel 8 die vergleichende Analyse der Hallbeweglichkeit von Elektronen und Löchern in Germaniumschichten auf (111)- und (001)-orientierten Substraten geschildert.

2 Grundbegriffe der Ge/Si-Heteroepitaxie

Der Begriff der Epitaxie ist vom griechischen $\epsilon\pi\iota$ (“auf”) und $\tau\alpha\xi\iota\sigma$ (“ordnen” bzw. “ausrichten”) abgeleitet und bezeichnet das geordnete Wachstum einer kristallinen Schicht auf einem kristallinen Substrat [77, 78]. Sind Schicht- und Substratmaterial identisch, spricht man von Homoepitaxie, sind sie verschieden von Heteroepitaxie.

Silizium und Germanium kristallisieren in der Diamantstruktur, die man sich als Kombination von zwei um $\frac{1}{4}$ der Raumdiagonale gegeneinander verschobene fcc-Gitter vorstellen kann. Beide Materialien sind kovalent gebunden und beliebig mischbar. Da Germanium eine größere Gitterkonstante als Silizium hat, haben $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ Mischkristalle ebenfalls eine größere Gitterkonstante $a(x)$ als Silizium. Diese kann näherungsweise linear zwischen den Werten für Silizium und Germanium interpoliert werden [79]:

$$a(x) = a_{\text{Si}} + x \cdot (a_{\text{Ge}} - a_{\text{Si}}) \quad (2.1)$$

Aus den unterschiedlichen Gitterkonstanten resultiert nach Gleichung 2.2 eine Gitterfehlpassung f von ca. 4,2%, die die Ge/Si-Heteroepitaxie entscheidend beeinflusst:

$$f = \frac{a_{\text{Ge}} - a_{\text{Si}}}{a_{\text{Si}}} = 0,0417 \quad (2.2)$$

Im Folgenden werden die Konsequenzen der aus der Gitterfehlpassung resultierenden Relaxationsprozesse und ihre Mechanismen erläutert.

2.1 Versetzungen

Versetzungen sind eindimensionale Defekte im Kristallgitter. Da sie für die Relaxation von Spannungen im Kristallgitter eine entscheidende Rolle spielen, werden in diesem Abschnitt einige ihrer wesentlichen Eigenschaften beschrieben. Ausführliche Darstellungen findet man z. B. in [80, 81, 82, 83].

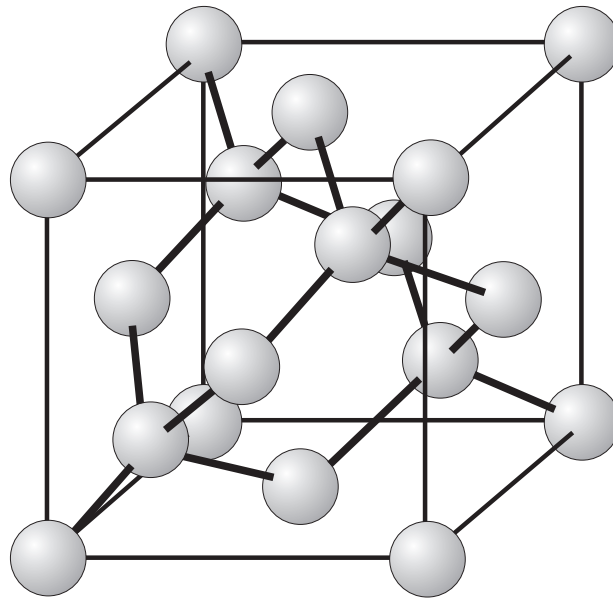


Abb. 2.1: Die Kristallstruktur von Silizium und Germanium ist die des Diamantgitters.

Versetzungen werden durch den Linienvektor \vec{l} , der an jedem Punkt einer Versetzungslinie ihre Richtung angibt, und den Burgersvektor \vec{b} beschrieben. Vergleicht man einen Umlauf im Kristallgitter um eine Versetzungslinie (vgl. Abb. 2.2a) mit einem entsprechenden Umlauf im ungestörten Kristall (vgl. Abb. 2.2b), so ist der Vektor, der zu dem Umlauf im perfekten Kristall addiert werden muss, um diesen zu schließen, der Burgersvektor der Versetzung.

Die Lage des Burgersvektors relativ zum Linienvektor einer Versetzung bestimmt ihren Charakter. Sind Burgers- und Linienvektor senkrecht zueinander, so handelt es sich um eine Stufenversetzung, wie sie schematisch in Abb. 2.2a dargestellt ist, sind sie parallel, um eine Schraubenversetzung. In allen anderen Fällen handelt es sich um eine Versetzung mit gemischtem Charakter. Ein typisches Beispiel ist die in den $\{111\}$ -Ebenen des Diamantgitters auftretende so genannte 60° -Versetzung, bei der Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2} \langle \bar{1}01 \rangle$ und Linienvektor $\vec{l} = \frac{a}{2} \langle \bar{1}10 \rangle$ einen Winkel von 60° einschließen.

Als Kern einer Versetzung bezeichnet man den Bereich entlang der Versetzungslinie, in dem die atomare Bindungsstruktur massiv von ihrer Gleichgewichtslage abweicht. Er ist von Verzerrungs- und Spannungsfeldern umgeben, die mit dem reziproken Abstand vom Kern der Versetzung abklingen. Die Linienenergie E_L einer Versetzung (pro Einheitslänge) ist $E_L = E_{elast} + E_{Kern}$. Dabei ist E_{elast} die elastische Energie des Verzerrungsfeldes außerhalb des Versetzungskerns und E_{Kern} die Energie des Kerns der Versetzung. Die elastische Energie ergibt sich im Rahmen der linearen Elastizitätstheorie als:

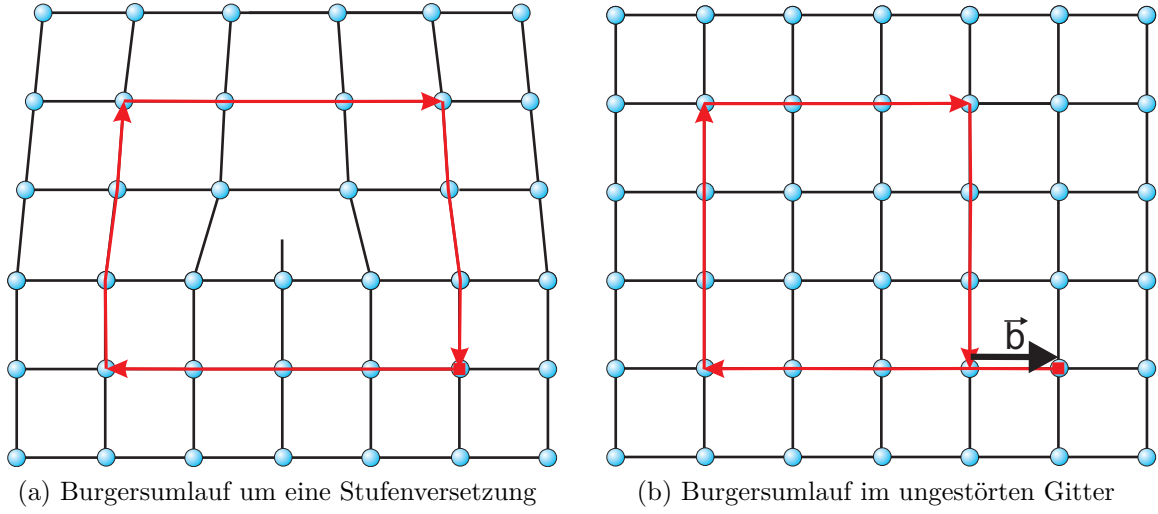


Abb. 2.2: Bestimmung des Burgersvektors einer Versetzung.

$$E_{elast} = \frac{G}{4\pi(1-\nu(1-\cos(\theta)))} \ln\left(\frac{R_a}{R_i}\right) b^2 \quad (2.3)$$

Hierbei sind G der Schubmodul, ν die Poissonzahl θ der Winkel zwischen Burgers- und Linienvektor und R_a bzw. R_i der äußere bzw. innere Abschneideradius des Verzerrungsfeldes der Versetzung. Während R_a mit dem kleineren Wert von Schichtdicke h oder dem halben Versetzungsabstand $D/2$ angenommen werden kann, ist die Bestimmung von R_i nicht so eindeutig. Vielfach wird $R_i = b$ gesetzt. Der Beitrag des Versetzungskerns kann nicht mit der linearen Elastizitätstheorie beschrieben werden, sondern muss mit nichtlinearen atomistischen Simulationsrechnungen oder aus Experimenten bestimmt werden. Oftmals wird diese Energie dargestellt als [80]:

$$E_{Kern} = \frac{G}{4\pi(1-\nu(1-\cos(\theta)))} \ln(\alpha) \quad (2.4)$$

Mit dieser Darstellung kann man für die Linienenergie E_L schreiben:

$$E_L = \frac{G}{4\pi(1-\nu(1-\cos(\theta)))} b^2 \ln\left(\frac{\alpha \text{Min}(h, D/2)}{b}\right) \quad (2.5)$$

Der Parameter α ist eine Konstante, die die Energie des Versetzungskerns berücksichtigt. Ihr Wert liegt für Halbleiter zwischen 1 und 4 [83] und hängt sowohl vom Versetzungstyp als auch von der Wahl des inneren Abschneideradius ab.

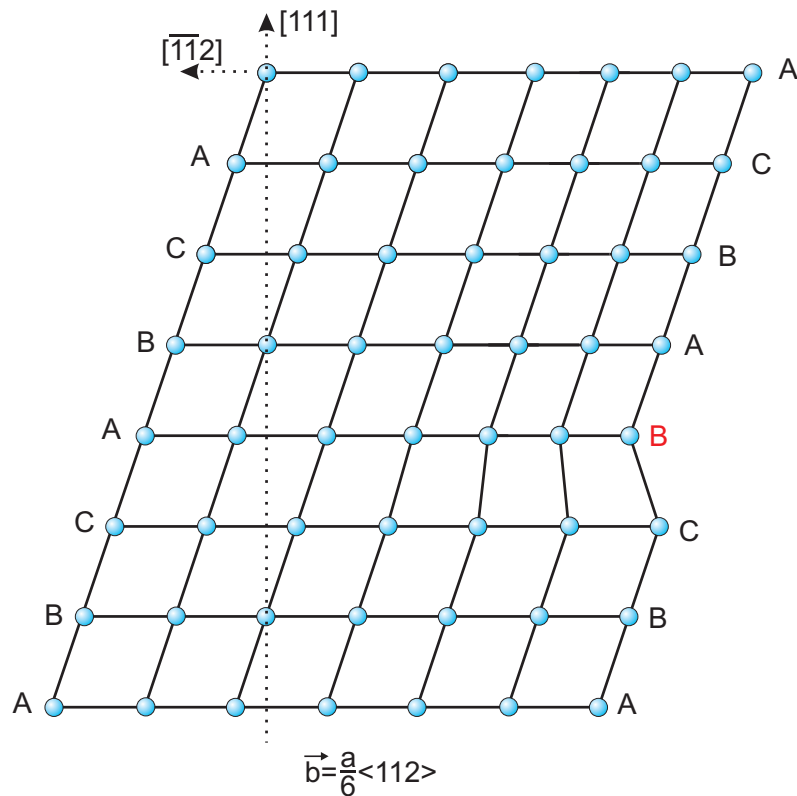


Abb. 2.3: Shockley-Partialversetzung mit Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{6} \langle 112 \rangle$.

Wegen der quadratischen Abhängigkeit der Versetzungsenergie vom Burgersvektor kann es nach $b_1^2 > b_2^2 + b_3^2$ günstiger sein, wenn eine so genannte vollständige Versetzung, deren Burgersvektor \vec{b}_1 einer ganzen Gittertranslation entspricht, in zwei Teilversetzungen (Partialversetzungen) mit kleineren Burgersvektoren \vec{b}_2 und \vec{b}_3 aufspaltet. Während bei vollständigen Versetzungen die Kristallebenen um eine komplette Gittertranslation verschoben sind, der Burgersvektor also einem Gittervektor entspricht, ist dies bei Partialversetzungen nicht der Fall. Daraus resultiert die Existenz eines Stapelfehlers zwischen diesen dissoziierten Teilversetzungen. Die Bildung dieses Stapelfehlers erfordert einen zusätzlichen der Fläche des Stapelfehlers proportionalen Energiebetrag (Stapelfehlerenergie). Das Verhältnis von geringerer elastischer Energie der Versetzungslinie und der zusätzlichen Stapelfehlerenergie bestimmen den Gleichgewichtsabstand zwischen den dissoziierten Partialversetzungen.

Die Bewegung von Versetzungen im Kristallgitter kann durch Gleiten oder Klettern realisiert werden. Beim Gleiten erfolgt die Bewegung in der so genannten Gleitebene, die von Linien- und Burgersvektor aufgespannt wird, während beim Klettern die Bewegung senkrecht zu dieser Fläche erfolgt. Der Bewegungsmechanismus des Kletterns ist an die Diffusion von Leerstellen gebunden, was hohe thermische Aktivierungsenergien erfordert. Das Gleiten

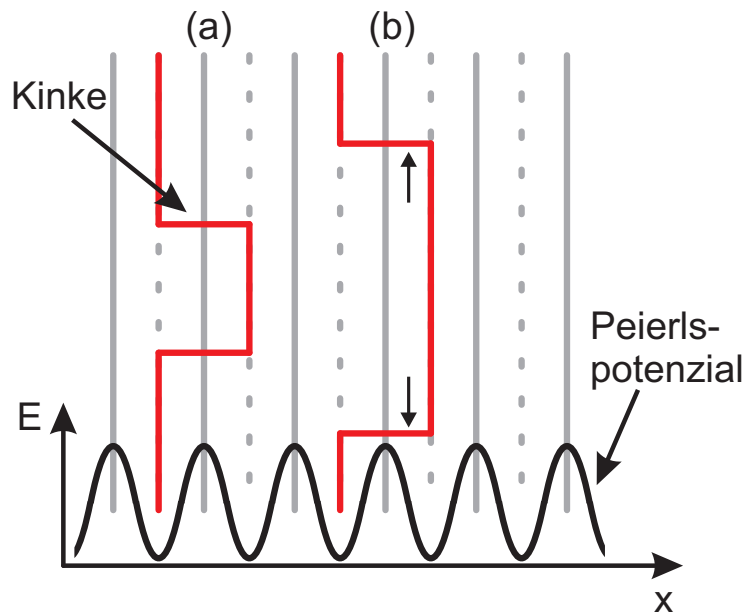


Abb. 2.4: Schematische Darstellung des Gleitprozesses von Versetzungen im Peierls-Potenzial: Die Versetzungen liegen bevorzugt in den Minima des Peierls-Potenzials. Die Versetzung gleitet, indem sich ein Teil der Versetzungslinie thermisch aktiviert über den benachbarten Potenzialgipfel bewegt (a). Dabei entstehen zwei Kinken, welche dann zu den Enden der Versetzungslinie wandern (b).

von Versetzungen ist durch ein periodisches Potenzial, das Peierls-Potenzial, bestimmt. Die Minima dieses Potenzials, man spricht von Peierlstälern, geben die Gleichgewichtslage von Versetzungen im Kristall und somit eine Vorzugsrichtung für den Linienvektor vor¹. Um nun von einem Peierlstal in ein benachbartes zu gleiten, muss eine kritische intrinsische Spannung, die so genannte Peierlsspannung τ_s (engl.: *Peierls stress*), überwunden werden. Der resultierende Gleitmechanismus über die Bildung von Kinken ist schematisch in Abb. 2.4 dargestellt. Es gilt $\tau_s \propto \exp(-\frac{d_{hkl}}{b})$. Die Peierlsspannung wird minimal für Versetzungen mit möglichst kurzem Burgersvektor b in Kristallebenen mit größtmöglichem interplanarem Abstand d_{hkl} . Es sind also Gleitrichtungen mit hoher linearer Dichte und Gleitebenen mit dichter Packung bevorzugt. Für das Diamantgitter ist daher $\frac{a}{2} \langle 110 \rangle \{111\}$ das bevorzugte Gleitsystem. Die Bildung und das Gleiten von Versetzungen sind die dominierenden Mechanismen bei der plastischen Verformung von Kristallen.

¹Im Diamantgitter sind das die $\langle 110 \rangle$ -Richtungen.

2.2 Elastische Verzerrung verspannter Epitaxieschichten

In den meisten Fällen tritt bei der Heteroepitaxie aufgrund der Gitterfehlpassung zwischen Substrat und Schicht eine Verzerrung des Kristallgitters des epitaktischen Films auf.

Für kubische Kristallsysteme ist die beim Wachstum auf (001), (110) oder (111)-Flächen auftretende Verzerrung tetragonal [84]. Unter der Annahme pseudomorphen Wachstums gelten folgende Beziehungen für die Gitterkonstanten der beiden Schichten [85]:

$$a_{\parallel} = \frac{a_1 G_1 h_1 + a_2 G_2 h_2}{G_1 h_1 + G_2 h_2} \quad (2.6)$$

$$\epsilon_{i\parallel} = \frac{a_{\parallel}}{a_{\perp}} - 1 \quad (2.7)$$

$$a_{i\perp} = a_i [2 - k_i (\frac{a_{\parallel}}{a_{\perp}} - 1)] \quad (2.8)$$

$$\epsilon_{i\perp} = \frac{a_{i\perp}}{a_i} - 1 \quad (2.9)$$

Dabei beschreibt der Index $i = 1, 2$ die Schichten, h_i die Schichtdicken, a_i die relaxierten Gitterkonstanten und G_i den Schubmodul:

$$G_i = 2(c_{11}^i + 2c_{12}^i) \left(1 - \frac{k_i^{hkl} - 1}{2}\right) \quad (2.10)$$

Die Konstante k_i^{hkl} gibt das Verhältnis der Verzerrung senkrecht und parallel zur Grenzfläche an. Sie ist abhängig von der Orientierung der Grenzfläche und den elastischen Konstanten der Materialien. Für kubische Systeme sind das c_{11} , c_{12} und c_{44} [86]:

$$k^{001} = \frac{c_{11} + 2c_{12}}{c_{11}} \quad (2.11)$$

$$k^{111} = 3 \frac{c_{11} + 2c_{12}}{c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44}} \quad (2.12)$$

Für den Fall einer epitaktischen Schicht der Dicke h_2 auf einem Substrat der Dicke h_1 gilt $h_1 \gg h_2$ und somit unter der Annahme eines starren Substrates $a_{\parallel} = a_1$.

In einem tetragonal verzerrten Film wird mit zunehmender Schichtdicke h die elastische Spannungsenergie E_{strain} gespeichert:

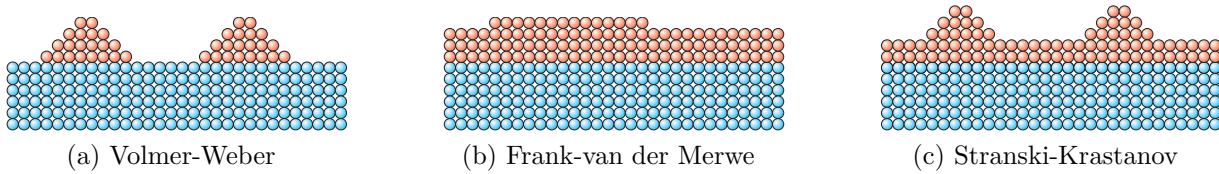


Abb. 2.5: Wachstumsmodi bei der Heteroepitaxie.

$$E_{strain} = 2G \frac{1 + \nu}{1 - \nu} \epsilon_{\parallel}^2 h \quad (2.13)$$

Dabei ist ν die Poissonzahl des Materials. Ist der tetragonal verzernte Film glatt und defektfrei, spricht man von pseudomorphem Wachstum.

2.3 Wachstumsmodi

Der Wachstumsmodus von Material A auf Substrat B kann allgemein mit Hilfe des Bauer-Kriteriums auf der Basis der freien Oberflächenenergien beschrieben werden [87]:

$$\Delta\gamma = \gamma_f - \gamma_s + \gamma_i \quad (2.14)$$

γ_s und γ_f sind die freien Oberflächenenergien des Substrates bzw. des Films. Der Term γ_i beschreibt die freie Oberflächenenergie der Grenzfläche.

Drei Fälle sind zu unterscheiden (s. auch Abb. 2.5):

- Ist $\Delta\gamma > 0$, wird die Energie des Systems minimal, wenn möglichst wenig Substratoberfläche bedeckt ist. Es kommt zur Bildung von Inseln (Vollmer-Weber Wachstum) [88].
- Für den Fall $\Delta\gamma < 0$ wird die Energie minimiert, indem der Film das Substrat vollständig bedeckt. Es kommt zum Lage-für-Lage Wachstum (Frank-van der Merwe Wachstum) [89, 90].
- Ist für die ersten Lagen $\Delta\gamma < 0$, bildet sich zunächst eine dünne Benetzungsschicht. Wechselt dann das Vorzeichen von $\Delta\gamma$, z.B. aufgrund einer Änderung von γ_i , erfolgt ein Übergang zur Inselbildung (Stranski-Krastanov Wachstum) [91].

Bei der Heteroepitaxie von Ge auf Si wird das Wachstumsverhalten im Wesentlichen durch die Gitterfehlpassung bestimmt. Da die Oberflächenenergie von Germanium niedriger ist

als die von Silizium, wachsen die ersten Lagen als glatter pseudomorpher Film auf. Mit steigender Schichtdicke nimmt die Spannungsenergie E_{strain} zu, so dass der Übergang zum 3-dimensionalen Inselwachstum erfolgt. Man kann dann das Bauerkriterium wie folgt schreiben:

$$\Delta\gamma = \gamma_f - \gamma_s + E_{strain} \quad (2.15)$$

2.4 Relaxationsmechanismen

Ein epitaktischer Film kann nur ein gewisses Maß an Spannungsenergie aufnehmen. Daher kommt es ab einer gewissen Schichtdicke immer zur Bildung von Versetzungen, die die Spannung kompensieren. Als Vorstufe dieser plastischen Relaxation kann die Spannung auch durch eine elastische Verformung der Schichtoberfläche reduziert werden (Stranski-Krastanov Wachstum). Ob eine solche Verformung der Oberfläche auftritt und welche Oberflächentopografie sich einstellt, kann die nachfolgende plastische Relaxation entscheidend beeinflussen. Der Einsatz von Surfactants ist eine Möglichkeit, diese Vorgänge zu steuern.

2.4.1 Elastische Relaxation

Beim elastischen Spannungsabbau verformt sich die Filmoberfläche, so dass die Atome eine Position einnehmen können, die näher an ihrem relaxierten Gitterabstand liegt. Dieses spannungsgetriebene Aufrauen der Oberfläche kann von einer regelmäßigen Abfolge von Bergen und Tälern bis hin zu isolierten Inseln reichen (s. Abb. 2.6). Abhängig von den Oberflächenenergien und den konkreten Wachstumsbedingungen können sich ein regelmäßiges Wellenmuster, linsenförmige, facettierte oder pyramidenartige Inseln bilden. Die Bildung von Facetten wird mit steigender Wachstumstemperatur wahrscheinlicher.

Für den Übergang von pseudomorphem 2D-Wachstum zu elastischer Relaxation muss eine Energiebarriere E_{act}^{SK} überwunden werden. Daher gibt es bei der Heteroepitaxie eine bestimmte kritische Schichtdicke h_{SK} , oberhalb derer elastische Relaxation einsetzt. Sowohl E_{act}^{SK} als auch h_{SK} skalieren mit f^{-4} [92, 93].

2.4.2 Plastische Relaxation

Ein weiterer Mechanismus zum Abbau von Spannung im Film besteht in der plastischen Relaxation über die Bildung und das Gleiten von Versetzungen. Bei der Heteroepitaxie von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ auf Si wird typischerweise das Gleitsystem $\frac{a}{2} \langle 110 \rangle \{111\}$ aktiviert. Der Prozess

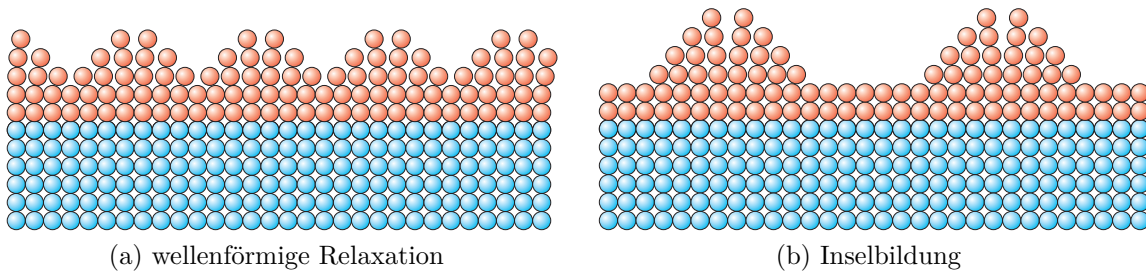


Abb. 2.6: Formen elastischer Relaxation.

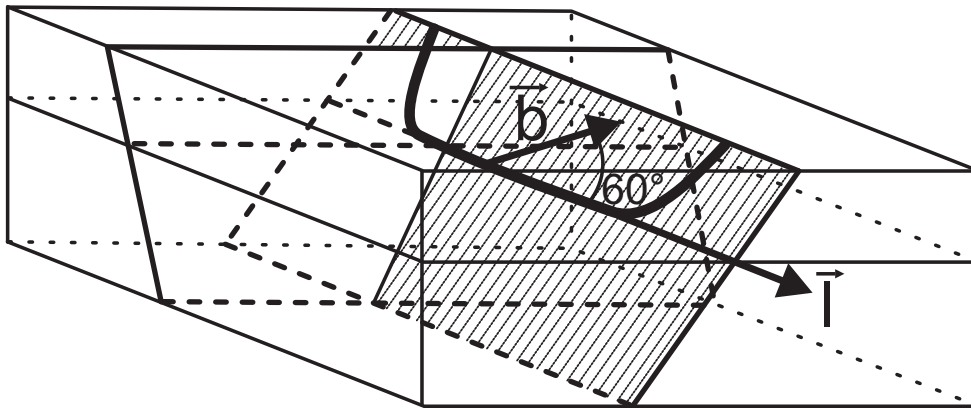


Abb. 2.7: 60°-Versetzung im Diamantgitter.

ist in Abb. 2.7 für die (001)-Orientierung skizziert: Überschreitet der glatte pseudomorphe Film die kritische Schichtdicke h_{MF} , so nukleieren an der Oberfläche 60°-Versetzen, die auf {111}-Ebenen zur Grenzfläche gleiten, wo sie die Spannung kompensieren. Da diese Versetzungen geneigt zur Grenzfläche liegen, tragen sie nur mit einem Teil ihres Burgersvektors zur Relaxation bei. Häufig dissoziieren die Versetzungen während des Gleitprozesses in zwei Shockley-Partialversetzungen [82, 94]. Bedingt durch ihre Entstehung als Halbschleife an der Filmoberfläche weist jedes in der Grenzfläche liegende Versetzungssegment zwei den Film durchdringende Versetzungsarme mit annähernd Schraubencharakter auf. Diese auch als Threading-Versetzungen bezeichneten Segmente können sich verheerend auf elektronische Bauelemente auswirken.

Weist ein epitaktischer Film bereits Oberflächendeformationen, also Gräben und Grate, infolge elastischer Relaxation auf, so stellen diese Gräben bevorzugte Nukleationszentren für Versetzungen dar, weil hier die größten Scherspannungen auftreten. Abhängig von der Oberflächentopografie und den auftretenden Scherspannungen können auch alternative Gleitsysteme aktiviert werden [95, 96].

Die elastische Energie, die in einem Film gespeichert werden kann, wird durch die Akti-

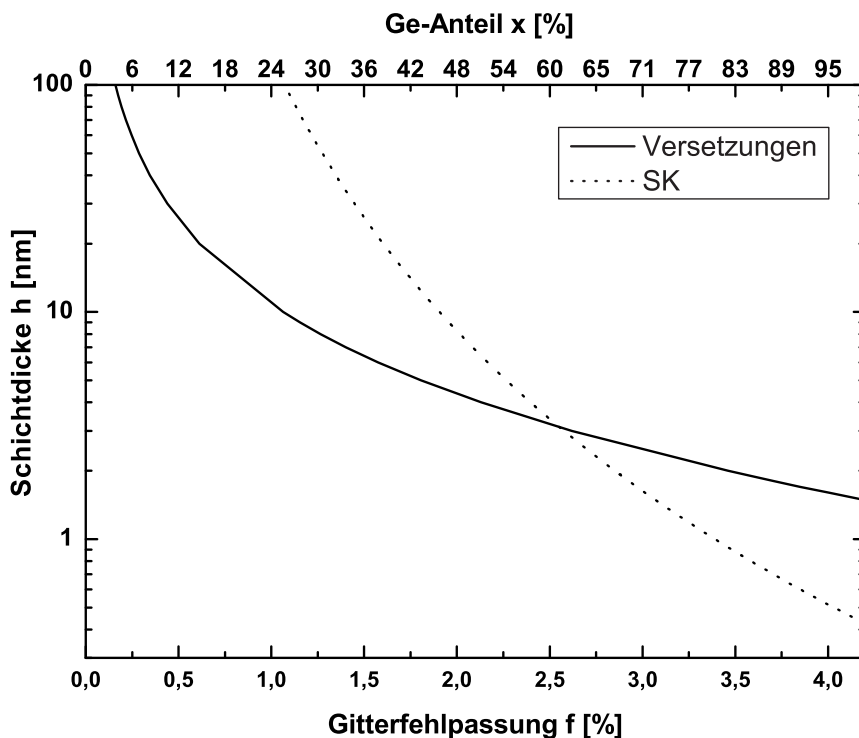


Abb. 2.8: Kritische Schichtdicke für Relaxation über Versetzungen und über elastische Verformung der Oberfläche.

vierungsenergie E_{act}^{MF} für die plastische Relaxation bestimmt. Die entsprechende kritische Schichtdicke h_{MF} , oberhalb derer die plastische Relaxation einsetzt, skaliert mit f^{-1} . Abb. 2.8 zeigt die kritischen Schichtdicken für plastische und elastische Relaxation in Abhängigkeit von der Gitterfehlpassung f für $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ auf $\text{Si}(001)$. Für die Heteroepitaxie von reinem Ge auf Si ist $h_{SK} < h_{MF}$, daher beobachtet man elastische Relaxation ehe es zur Bildung von Versetzungen kommt.

Welcher konkrete Relaxationsmechanismus in einem heteroepitaktischen System auftritt, hängt neben der Gitterfehlpassung auch von den freien Oberflächenenergien und der Orientierung des Substrates, aber auch von kinetischen Faktoren wie Temperatur und Wachstumsrate ab. Allgemein kann man sagen, dass eine Schicht mit steigender Temperatur und steigender Gitterfehlanpassung verstärkt zu elastischer Verformung vor dem Einsetzen plastischer Relaxation tendiert [92, 93].

2.5 Interdiffusion

Zwischen Siliziumsubstrat und Germaniumepitaxieschicht kann es zur Vermischung durch Diffusion kommen. Dabei sind zwei Regime zu unterscheiden: zum Ersten die rein thermisch bedingte Diffusion in relaxierten Systemen, z.B. während des Wachstums dickerer Schichten oder bei nachträglichen Temperprozessen, zum Zweiten eine beschleunigte Diffusion in verspannten Systemen, die beispielsweise während der Stranski-Krastanov-Phase der Epitaxie auftritt. Im Allgemeinen lassen sich Diffusionsprozesse durch eine charakteristische Konstante D nach Gleichung 2.16 beschreiben.

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_A}{kT}\right) \quad (2.16)$$

Dabei sind E_A und D_0 die Aktivierungsenergie und die Sprungfrequenz für den jeweiligen Diffusionsmechanismus. Eine ausführlichere Beschreibung der Prozesse bei der Diffusion in Germanium findet sich z.B. in [11]. Im Temperaturbereich von 600 – 700 °C liegt die Diffusionskonstante für die thermisch bedingte Diffusion von Silizium in Germanium bei $10^{-16} - 10^{-17} \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$ [97]. Die Konstante für die Diffusion von Germanium in Silizium ist um einige Größenordnungen kleiner, sie beträgt nur etwa $10^{-23} - 10^{-21} \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$ [97], so dass dieser Fall vernachlässigt werden kann.

Betrachtet man das Siliziumsubstrat als unerschöpfliche Quelle mit $N_0 = 5 \times 10^{22} \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^3}$, so ergibt sich nach dem zweiten Fickschen Gesetz folgendes Profil $N(x, t)$ für die Siliziumkonzentration im Abstand x von der Grenzfläche und nach der Zeit t :

$$N(x, t) = N_0 \left(1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{Dt}}\right)\right). \quad (2.17)$$

Nimmt man für t die typische Wachstumszeit für eine 1 μm dicke Germaniumschicht von etwa 90 Minuten an, ergeben sich bei einer Wachstumstemperatur von 680 °C die in Abbildung 2.9a dargestellten Profile. Für die Diffusionskonstante D wurden Werte aus Experimenten mit in Germanium implantiertem Silizium [98, 99] und aus Temperversuchen an auf Ge abgeschiedenen Si-Schichten [100] bzw. auf Si abgeschiedenen Ge-Schichten [48, 51] verwendet. Die Streuung der Profile spiegelt die Unterschiede in den Literaturwerten für die Aktivierungsenergie und die Sprungfrequenz wieder. Diese sind vermutlich auf die unterschiedlichen experimentellen Bedingungen zurückzuführen. Es scheint bei abgeschiedenen Schichten eine etwas schwächere Diffusion im Vergleich zu den Versuchen mit Niedertemperatur-MBE oder implantiertem Si aufzutreten. Das könnte daran liegen, dass Si in Ge über Leerstellen diffundiert, die bei der Niedertemperatur-MBE oder der Implantation verstärkt generiert werden [100, 101]. Abbildung 2.9b zeigt die Temperaturabhängigkeit der Eindiffusion von Si in Ge zwischen 650 und 900 °C. Es wurden zur Berechnung die Werte aus [51] verwendet,

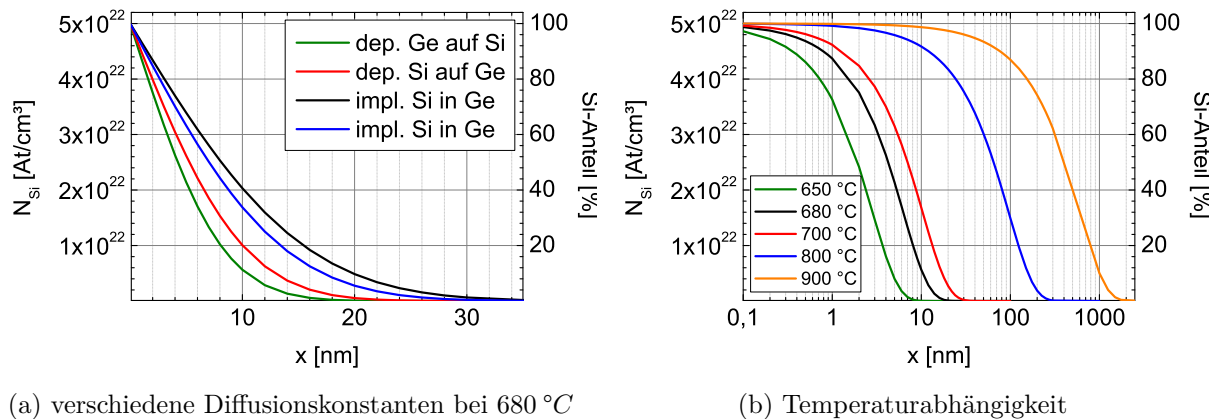


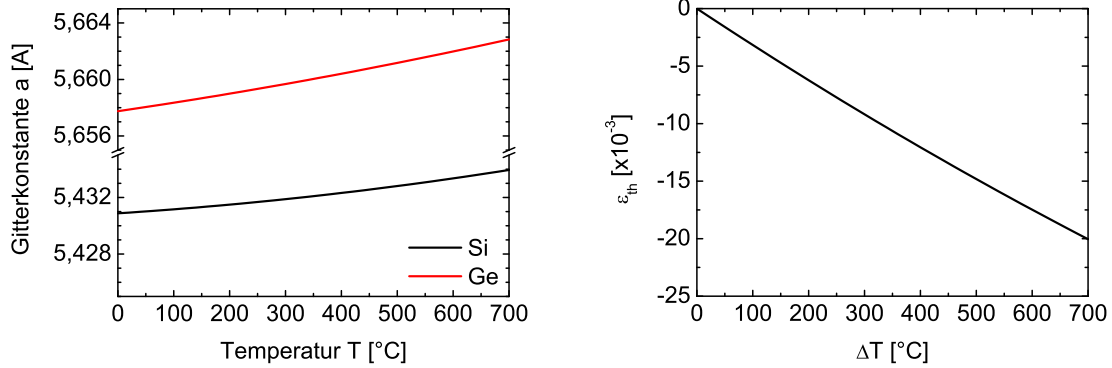
Abb. 2.9: Eindiffusion von Silizium in Germanium aus einer unerschöpflichen Quelle: Dargestellt ist der Verlauf der Siliziumkonzentration N_{Si} über dem Abstand x von der Ge/Si-Grenzfläche einmal für verschiedene Vorfaktoren D_0 der Diffusionskonstanten (s. Abb. 2.9a) und einmal in Abhängigkeit von der Temperatur (s. Abb. 2.9b).

da die experimentellen Bedingungen denen in dieser Arbeit am nächsten kommen. Bei höheren Temperaturen kann eine Durchmischung bis zu einigen 100 nm auftreten, während bei Temperaturen zwischen $650 - 700\text{ °C}$ eine Siliziumkonzentration im Prozentbereich bis zu einer Tiefe von $10 - 30\text{ nm}$ nahe der Grenzfläche zu erwarten ist.

Bereits in der Anfangsphase des Wachstums von Ge auf Si, in der der pseudomorphe Ge-Benetzungsfilm verspannte Inseln bildet, die dann beim weiteren Wachstum durch Versetzungsbildung relaxieren, kommt es zu einer starken Vermischung mit Si aus dem Substrat [102, 103, 104]. Als Antrieb für diese Diffusion wird neben der thermischen Komponente vor allem Spannungsabbau durch eine Vermischung von Germanium und Silizium in Betracht gezogen. Dabei spielen sowohl die Oberflächendiffusion von Si und Ge als auch die Eindiffusion von Si aus dem Volumen eine Rolle [105, 102]. Andererseits wurde gezeigt, dass es auch nach der weitgehenden Relaxation der “Ge”-Inseln noch zu einer Eindiffusion von Si kommt, die möglicherweise durch das Auftreten von Versetzungen begünstigt wird [103]. Insgesamt führen diese Mechanismen zu einer effektiv um mehrere Größenordnungen erhöhten Diffusionskonstante [97].

2.6 Thermische Ausdehnung und thermische Spannung

Die thermische Ausdehnung eines Materials mit der Gitterkonstante a erfolgt nach $a(T) = a_0 + \alpha(T)$, wobei $\alpha(T)$ der lineare thermische Ausdehnungskoeffizient ist, der selbst auch temperaturabhängig ist. Für Silizium und Germanium kann im Temperaturbereich von



(a) Änderung der Gitterkonstanten von Ge und Si mit der Temperatur

(b) thermisch induzierte Verzerrung der Germaniumschicht

Abb. 2.10: Die Gitterkonstanten von Germanium und Silizium ändern sich unterschiedlich stark mit der Temperatur (s. Abb. 2.10a), so dass eine Verzerrung der Germaniumschicht hervorgerufen wird (s. Abb. 2.10b).

0 – 800 °C in guter Näherung eine lineare Temperaturabhängigkeit von $\alpha(T)$ angenommen werden [83]. Es gilt dann:

$$\alpha_{Si}(T) = (2,7 + 0,0026 T) \cdot 10^{-6} K^{-1} \quad (2.18)$$

$$\alpha_{Ge}(T) = (5,9 + 0,002 T) \cdot 10^{-6} K^{-1} \quad (2.19)$$

In Abb. 2.10a ist die thermische Gitterausdehnung von Si und Ge in Abhängigkeit von der Temperatur dargestellt. Aufgrund der unterschiedlichen linearen thermischen Ausdehnungskoeffizienten entsteht bei einer Temperaturänderung ΔT eine Spannung im System, die zu einer elastischen Verzerrung $\epsilon_{th} = \Delta\alpha\Delta T$ führt (s. Abb. 2.10b). Die Werte von ϵ_{th} betragen zwar nur einige Prozent der durch Gitterfehlpassung hervorgerufenen Verzerrung ($\epsilon_{mf} = 0,042$), für beim Wachstum weitgehend relaxierte Schichten kann die beim Abkühlen induzierte Spannung aber sehr wohl eine Rolle spielen. Im Falle einer epitaktischen Ge-Schicht auf einem Si-Wafer ist die Dicke der Ge-Schicht sehr viel geringer als die des Substrates. Daher kann man davon ausgehen, dass die thermische Spannung vollständig in der Schicht kompensiert wird. Ein Teil dieser Spannung wird als elastische Verzerrung im Ge-Gitter gespeichert, ein Teil kann aber auch durch plastische Verformung, also unter Bildung von Versetzungen abgebaut werden. Diese Möglichkeit besteht allerdings nur bei Temperaturen oberhalb des Spröd-Duktil-Übergangs T_{BDT} von Germanium. Dieser liegt abhängig von der Geschwindigkeit der Spannungsänderung bei 360 – 550 °C [106, 107].

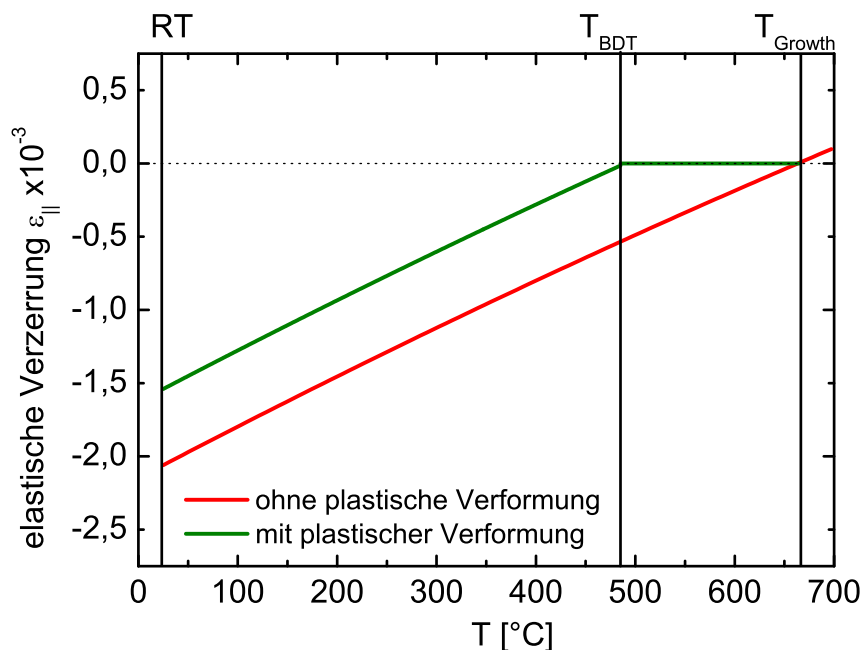


Abb. 2.11: Elastische Verzerrung infolge des Aufbaus thermischer Spannung beim Abkühlen: Die rote Linie zeigt den Fall ohne plastische Verformung, die Grüne den Fall mit Plastizität oberhalb des Spröd-Duktil Übergangs T_{BDT} .

Die Restverzerrung der Schicht nach dem Abkühlen $\epsilon_{res_{RT}}$ ist das Resultat der nach der Epitaxie noch verbliebenen Verzerrung aus Gitterfehlanpassung $\epsilon_{res_{TG}}$ sowie der beim Abkühlen induzierten und elastisch kompensierten thermischen Spannung ϵ_{th} , also:

$$\epsilon_{res_{RT}} = \epsilon_{res_{TG}} + \Delta\alpha\Delta T \quad (2.20)$$

$\Delta\alpha(T)$ und $\Delta T = T_G - RT$ sind bekannt, $\epsilon_{res_{RT}}$ kann durch XRD-Messungen bestimmt werden. Da die Gitterfehlanpassung im Falle von Germanium und Silizium zu kompressiver und die thermische Fehlanpassung zu tensiler Spannung führt, kann $\epsilon_{res_{RT}}$ sowohl positiv als auch negativ sein. $\epsilon_{res_{TG}}$ ist die Spannung, die bei der Wachstumstemperatur noch im Film verbleibt, weil ihr Betrag unterhalb des kritischen Wertes für die Versetzungsbildung liegt und sie somit nicht abgebaut werden kann.

Die beiden prinzipiell möglichen Varianten für Verlauf der elastischen Verspannung eines Germaniumfilms auf einem Siliziumsubstrat sind in Abb.2.11 gezeigt. Dabei wurde angenommen, dass der Film bei T_G vollständig relaxiert ist ($\epsilon_{res_{TG}} = 0$). Die rote Linie entspricht einem Film, der die thermische Spannung vollständig elastisch aufnimmt. Die grüne Linie

zeigt den Fall mit plastischer Relaxation: Die thermische Spannung wird plastisch abgebaut, bis bei T_{BDT} der Spröd-Duktil-Übergang erreicht ist. Unterhalb von T_{BDT} ist keine plastische Relaxation mehr möglich und zusätzlich entstehende Spannung wird beim weiteren Abkühlen elastisch in der Schicht gespeichert.

3 Epitaxie von Germanium auf Silizium: ein Überblick

3.1 Ge/Si-Heteroepitaxie ohne Surfactant

Ehe im folgenden Abschnitt auf den Einfluss von Surfactants auf die Ge/Si-Epitaxie eingegangen wird, soll hier zunächst das Wachstum ohne Surfactant betrachtet werden.

Germanium wächst auf Silizium bereits bei Temperaturen nahe Raumtemperatur als glatter epitaktischer Film, allerdings schlägt das Wachstum oberhalb einer gewissen Dicke von kristallin in amorph um. Die Schichtdicke, bis zu der Epitaxie möglich ist, nimmt mit abnehmender Wachstumsrate und steigender Temperatur zu. Auf Si(001) reicht dieses Regime von 50 – 170 °C, bei Temperaturen ab 200 °C lassen sich dann beliebig dicke epitaktische Filme wachsen, die allerdings eine hohe Dichte ($\sim 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) von den Film durchstoßenden Versetzungen aufweisen [40].

Bei Wachstumstemperaturen oberhalb von 300 °C dominiert unabhängig von der Substrat-orientierung der Stranski-Krastanov Mechanismus: Bis zu einer Dicke von 3 – 4 *ML* wächst ein pseudomorph verspannter Film, danach setzt die Bildung von dreidimensionalen Clustern auf dieser Benetzungsschicht ein. Die Inselbildung erlaubt es den Ge-Atomen an den äußeren Positionen der Cluster, einen größeren Atomabstand einzunehmen, und ermöglicht so den Spannungsabbau ohne die Bildung von Versetzungen [103]. Dieser Mechanismus ist so effektiv, dass die kohärenten Inseln eine Höhe von 50 *nm* erreichen können [39]. Andererseits sind die Ränder der Inseln bevorzugte Orte für die Nukleation von Versetzungen [95, 108, 96], so dass weiteres Wachstum zu einer mit relaxierten Inseln bedeckten Oberfläche führt. Auf Si(111) haben die Inseln die Form von Pyramidenstümpfen und werden hauptsächlich von (113)-Facetten begrenzt. Der Übergang vom Lagenwachstum zur Inselbildung ist hier abrupt, während auf Si(001) zunächst metastabile, pseudomorph verspannte, (105)-facettierte, so genannte Hut Cluster beobachtet werden, die dann zu größeren Inseln reifen [109, 110]. Die relaxierten Inseln weisen dann (113)-orientierte Seitenflächen auf [111, 112]. Die Frage, ab welcher Inselgröße die Relaxation über Versetzungen einsetzt, ist bisher nicht eindeutig geklärt. Einerseits ist die Größenverteilung der Inseln sehr inhomogen, andererseits hängt das Einsetzen der Relaxation auch von den jeweiligen Wachstumsparametern ab.

Ein weiterer Effekt, der für die 3D-Inseln beobachtet wurde, ist die Interdiffusion von

Germanium und Silizium. Bereits während des Wachstums der ersten pseudomorph verspannten Lagen kommt es zur Eindiffusion von Si in die Ge-Schicht. Hat die Inselbildung eingesetzt, diffundieren die Ge-Atome aus der Benetzungsschicht in die Inseln. Liegt das Substrat dann frei, kommt es neben der Diffusion aus dem Volumen auch zu einer starken Oberflächendiffusion von Si in die Ge-Inseln hinein. Untersuchungen mit TEM¹, XRD², STM³ und AFM⁴ haben gezeigt, dass die 3D-Inseln einen hohen Si-Anteil aufweisen können. Dabei sammeln sich die Ge-Atome in den Randpositionen der Inseln, wo sie relaxierte Gitterpositionen einnehmen können, während die Si-Atome sich im Kern der Inseln anreichern [113, 102, 103, 104].

Wird das Wachstum über die dreidimensionale Phase hinaus fortgesetzt, wachsen die Inseln zusammen und bilden schließlich einen geschlossenen Ge-Film. Dieser weist allerdings eine starke Oberflächenrauigkeit und eine hohe Dichte von den Film durchdringenden Versetzungen auf. Die Oberflächentopografie und der Grad der strukturellen Imperfektion werden durch die jeweiligen Wachstumsparameter bestimmt.

3.2 Ge/Si-Heteroepitaxie mit Surfactant

Dass geringe Mengen oberflächenaktiver Substanzen, so genannter Surfactants, das Wachstum von Kristallen beeinflussen können, ist schon seit langem bekannt [114]. Bereits 1783 berichtete der französische Mineraloge Jean-Baptiste Romé de L'Isle, dass sich die Form von NaCl-Kristallen beim Wachstum aus einer wässrigen Lösung durch die Zugabe geringer Mengen von Harnstoff von kubisch zu oktaedrisch verändert [115].

Über die Wirkung des Harnstoffs wird vermutet, dass die Anlagerung der polaren Harnstoffmoleküle bevorzugt an den ebenfalls polaren (111)-Flächen des NaCl-Keimkristalls erfolgt und nicht an den unpolaren (001)-Flächen, die die kubische Kristallform bilden. Das hat zur Folge, dass die mit etwa einer Monolage Harnstoff abgesättigten (111)-Flächen nun langsamer wachsen und so die oktaedrische Form entsteht. Effektiv wird so die Oberflächenenergie der (111)-Flächen gegenüber der der (001)-Flächen reduziert. Der Harnstoff wird dabei nicht in den Kristall eingebaut, sondern schwimmt während des Wachstums auf der Oberfläche [114].

Im Jahre 1989, etwa 200 Jahre nach Romé de L'Isles Beobachtung, wurde ein analoger Effekt bei der Ge/Si-Heteroepitaxie entdeckt. Forscher am IBM T. J. Watson Forschungszentrum fanden heraus, dass eine Monolage Arsen auf der Oberfläche eines Si(100)-Substrates bei der aufwachsenden Ge-Schicht ein Lage-für-Lage Wachstum anstelle des ohne Arsen

¹Transmissionselektronenmikroskopie, engl.: transmission electron microscopy

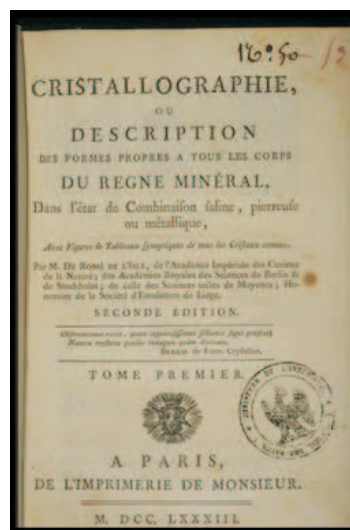
²Röntgenbeugung, engl.: x-ray diffraction

³Rastertunnelmikroskopie, engl.: scanning tunnelling microscopy

⁴Rasterkraftmikroskopie, engl.: atomic force microscopy



(a) Jean-Baptiste Romé de L'Isle (1736-1790)



(b) Cristallographié (1783)

Abb. 3.1: Jean-Baptiste Romé de L'Isle entdeckte die Beeinflussung des Kristallwachstums von NaCl durch Zugabe geringer Mengen an Harnstoff.

beobachteten Inselwachstums bewirkt [76]. Ähnlich wie bei dem historischen Beispiel schwimmt das Arsen während des Wachstums auf dem Ge-Film. Da der Einsatz des Arsens die Benetzung des Germaniums auf Si verbessert, wählte man die Bezeichnung Surfactant-modifizierte Epitaxie. In der Folgezeit wurden neben As auch zahlreiche andere Materialien als Surfactants in der Ge/Si-Heteroepitaxie verwendet: H, B, Ga, In, Sn, Pb, Sb, Bi, Te, Au, P [116] und Br [117]. Abbildung 3.2 zeigt die Anzahl der Veröffentlichungen für die untersuchten Surfactants. Neben den typischerweise in der Si-MBE eingesetzten Dotierstoffen aus der III. und V. Hauptgruppe des Periodensystems wurde häufig die Surfactant-Wirkung von Wasserstoff untersucht, da dieser in allen CVD-Prozessen eine Rolle spielt. Die weitaus meisten Publikationen widmeten sich jedoch der SME mit Sb als Surfactant, die auch Gegenstand dieser Arbeit ist. Im Folgenden wird der Stand der Forschung zur SME von Ge auf Si mit Sb als Surfactant dargestellt, wobei im speziellen auf das Wachstum auf Si(111) und Si(001) eingegangen wird.

3.2.1 Verlauf des Wachstums bei der SME

Wie bei der Epitaxie ohne Surfactant, wachsen die ersten Lagen des Germaniumfilms pseudomorph auf dem Siliziumsubstrat. Der Einbau der Germaniumatome in die epitaktische Schicht geschieht über Platzwechselforgänge zwischen Germaniumatomen und Antimonatomen an der Oberfläche. Dieser Mechanismus führt dazu, dass die effektive

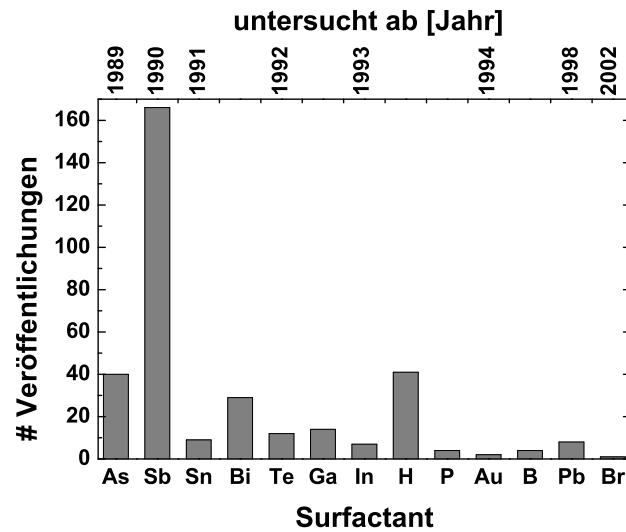


Abb. 3.2: Surfactants in der Literatur: Anzahl der Veröffentlichungen für die verschiedenen Elemente mit Angabe der Jahreszahl ihrer erstmaligen Verwendung in der Ge/Si-Heteroepitaxie [118].

Diffusionskonstante von Adatomen auf der Oberfläche reduziert wird, wodurch die Bildung dreidimensionaler Inseln unterdrückt wird. Diese Beeinflussung der Wachstumskinetik durch den Surfactant wurde experimentell [119, 120] und mit ab initio Berechnungen [121, 122] für die (111)- und die (001)-Orientierung [123] untersucht. Eine rein thermodynamische Beschreibung auf Basis des Bauerkriteriums (Gl. 2.15) beruht auf der Annahme, dass der Surfactant die freie Oberflächenenergie des Germaniums verändert. Diese Änderung ist für verschiedene Orientierungen der Oberfläche unterschiedlich ausgeprägt, so dass es zu einer Verschiebung der auch ohne Surfactant herrschenden Oberflächenenergieanisotropie⁵ kommt. Die freie Oberflächenenergie der Wachstumsebene wird durch die Absättigung freier Bindungen mit Surfactantatomen gegenüber der anderer niederenergetischer Flächen abgesenkt, so dass die Barriere für die Inselbildung höher wird. Somit steigt auch die entsprechende kritische Schichtdicke und es kommt zur Relaxation über Versetzungen, ehe Inselbildung einsetzt [112, 124]. Für typische MBE-Prozesse müssen sowohl kinetische als auch thermodynamische Faktoren berücksichtigt werden. Im Endeffekt verschiebt sich bei der SME das Einsetzen der plastischen Relaxation über Versetzungen zu größeren Schichtdicken. Die verspannte Benetzungsschicht kann mit 8 – 12 *ML* wesentlich dicker

⁵Die freie Oberflächenenergie hängt für kristalline Materialien von der Richtung der jeweiligen Oberfläche ab. So zeigt Silizium, wenn es gespalten wird, eine (111)-orientierte Fläche, weil diese die geringste Oberflächenenergie hat.

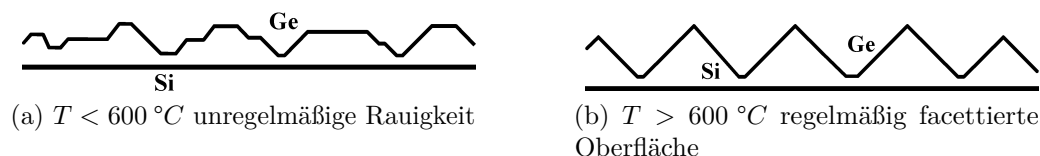


Abb. 3.3: Entwicklung der Oberflächenrauigkeit bei der SME in Abhängigkeit von der Wachstumstemperatur: Die Rauigkeit nimmt mit steigender Temperatur zu, wobei bei Temperaturen oberhalb von etwa $600\text{ }^{\circ}\text{C}$ ein Übergang von einer unregelmäßigen zu einer regelmäßig facettierten Oberflächentopografie erfolgt.

werden als das ohne Surfactant der Fall ist. Die Topografie dieser elastisch verspannten Ge-Schichten ist temperaturabhängig (s. Abb. 3.3). Bei Substrattemperaturen um $500\text{ }^{\circ}\text{C}$ erhält man glatte Filme. Mit steigender Wachstumstemperatur nimmt die Rauigkeit zu, weil auf diese Weise die Spannung im Film elastisch abgebaut werden kann [113]. Bei etwa $700\text{ }^{\circ}\text{C}$ liegt schließlich eine vollständige Facettierung vor, wobei sich bevorzugt niederenergetische Kristallflächen ausbilden. Im Falle des Wachstums auf (001)-Substraten variiert die Orientierung der Facetten abhängig vom Grad der Sb-Bedeckung (Θ_{Sb}) von [105] ($\Theta_{Sb} < 0,5$) über Mischformen bis hin zu [117] ($\Theta_{Sb} > 0,5$) [125, 126, 127]. Für die (111)-Orientierung wurden ausschließlich [113]-Facetten beobachtet [128, 129, 130, 131, 132]. Viele Arbeiten zur Ge/Si-Heteroepitaxie wurden bei Wachstumstemperaturen um $500\text{ }^{\circ}\text{C}$ durchgeführt, da man ein Aufrauen der Schichten bei höheren Temperaturen vermeiden wollte [93].

Wird das Wachstum über die Dicke von $8 - 12\text{ ML}$ hinaus fortgesetzt, setzt Relaxation über Versetzungen ein. Dieser Relaxationsprozess wurde in einigen Arbeiten in Abhängigkeit von der Wachstumstemperatur untersucht [133, 134, 135]. Bei Wachstumsraten von etwa $0,1\frac{\text{ML}}{\text{min}}$ und Temperaturen von $520\text{ }^{\circ}\text{C}$ fand man eine allmähliche Relaxation oberhalb von 11 ML , die bei 55 ML noch unvollständig ist und sich bis zu weit höheren Schichtdicken fortsetzt [133, 134]. Bei einer deutlich höheren Wachstumsrate von $4 - 5\frac{\text{ML}}{\text{min}}$ und $500\text{ }^{\circ}\text{C}$ wurde hingegen eine schnelle und vollständige Relaxation zwischen 11 und 18 ML beobachtet [135].

Abbildung 3.4 fasst die in der Literatur dokumentierten Beobachtungen zur SME von Ge auf Si(001) bei unterschiedlichen Temperaturen, Wachstumsraten und Sb-Bedeckungen zusammen: Nach dem pseudomorphen glatten Wachstum der ersten 3-4 Monolagen (Phase I) erfolgt in Phase II ein Aufrauen des Films, wodurch Spannung abgebaut werden kann, ohne dass sich die Gitterkonstante in der Ebene ändert. Der Film bleibt pseudomorph verzerrt, die Ausprägung der Mikrorauigkeit ändert sich von ungeordnet bei $420\text{ }^{\circ}\text{C}$ zu regelmäßiger Facettierung bei $700\text{ }^{\circ}\text{C}$. In Phase III relaxiert der Film schließlich über die Bildung von Versetzungen. Mit steigender Temperatur verschiebt sich das Einsetzen der Relaxation (Phase III) von $d_1 = 18\text{ ML}$ bei $300\text{ }^{\circ}\text{C}$ zu 10 ML bei $500\text{ }^{\circ}\text{C}$. In Phase IV wird schließlich die vollständige Relaxation erreicht. Während dies bei einer Rate von $4 - 5\frac{\text{ML}}{\text{min}}$

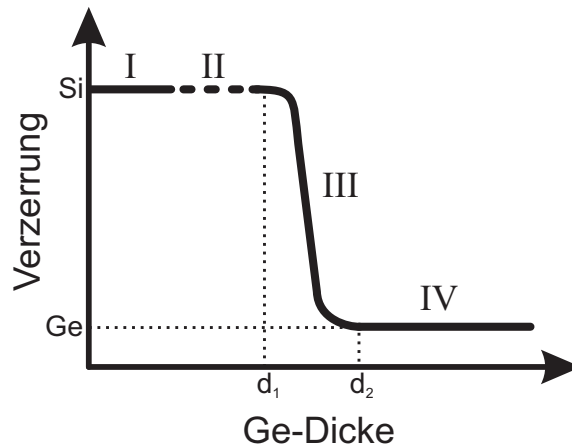


Abb. 3.4: Spannungsabbau im Germaniumfilm bei der Epitaxie auf Si(001) mit Antimon als Surfactant: Nach dem pseudomorphen glatten Wachstum der ersten 3-4 Monolagen (Phase I) erfolgt in Phase II ein Aufrauen des Films, wodurch Spannung abgebaut werden kann, ohne dass sich Versetzungen bilden. Die Ausprägung der Mikrorauigkeit ändert sich von ungeordnet bei $420\text{ }^{\circ}\text{C}$ zu regelmäßiger Facettierung bei $700\text{ }^{\circ}\text{C}$. In Phase III relaxiert der Film schließlich über die Bildung von Versetzungen. Mit steigender Temperatur verschiebt sich das Einsetzen der Relaxation (Phase III) von $d_1 = 18\text{ ML}$ bei $300\text{ }^{\circ}\text{C}$ zu 10 ML bei $500\text{ }^{\circ}\text{C}$. In Phase IV wird schließlich die vollständige Relaxation erreicht. Während dies bei einer Rate von $4 - 5\frac{\text{ML}}{\text{min}}$ und $500\text{ }^{\circ}\text{C}$ schon nach 18 ML der Fall ist, kann eine geringere Wachstumsrate [133, 134] oder -temperatur [135] das Erreichen der vollständigen Relaxation zu sehr viel größeren Schichtdicken hinauszögern oder sogar zu einem metastabilen teilrelaxierten Zustand führen.

und $500\text{ }^{\circ}\text{C}$ schon nach 18 ML der Fall ist, kann eine geringere Wachstumsrate [133, 134] oder -temperatur [135] das Erreichen der vollständigen Relaxation zu sehr viel größeren Schichtdicken hinauszögern oder sogar zu einem metastabilen teilrelaxierten Zustand führen.

Die Details des Relaxationsmechanismus werden in der Literatur unterschiedlich diskutiert, was angesichts der stark unterschiedlichen Wachstumsbedingungen auch nicht überrascht. Allgemein wird Nukleation von Versetzungen an der Filmoberfläche angenommen, die dann zur Grenzfläche gleiten, wo sie Misfitsegmente bilden. Bei niedrigen Wachstumstemperaturen ($300\text{ }^{\circ}\text{C}$) wird dieser Mechanismus unterdrückt, da die Energie zur Bildung von Versetzungen nicht ausreicht [135]. Der Einfluss der Wachstumsrate kann mit einer vermehrten Keimbildung auf der Oberfläche erklärt werden, die zu einer höheren Dichte von Nukleationszentren für Versetzungen führt und so einen schnelleren Spannungsabbau ermöglicht (vgl. [133, 134] und [135, 126]). Die relaxierten Schichten sind zwar glatt, aber sehr defektreich, so dass sie für Anwendungen unbrauchbar sind [126, 136, 124, 137]. Daher wandte sich das Forschungsinteresse Ende der 1990er Jahre verstärkt dem Einfluss von

Surfactants auf das Wachstum von Ge-Quantenpunkten anstelle von geschlossenen Schichten zu [138].

Bei der SME auf (111)-orientierten Substraten beobachtete man für Wachstumstemperaturen zwischen $600\text{ }^{\circ}\text{C}$ und $700\text{ }^{\circ}\text{C}$ einen anderen, sehr effektiven Relaxationsmechanismus, der zu glatten relaxierten Ge-Schichten führt, die nur wenige den Film durchstoßende Defekte aufweisen [139, 140]. Es stellte sich heraus, dass die Gitterfehlانpassung in diesem Fall durch ein regelmäßiges Versetzungsnetzwerk an der Grenzfläche ausgeglichen wird [128, 129]. Die Anfangsphase dieses Prozesses ist in [128, 129, 130, 131, 132] ausführlich untersucht worden, daher folgt hier nur eine zusammenfassende Darstellung: Die ersten 3-4 Monolagen Ge wachsen als glatter pseudomorpher Film, danach setzt elastischer Spannungsabbau ein, bis die Oberfläche nach etwa 8 *ML* komplett $\langle 113 \rangle$ -facettiert ist. In den Gräben zwischen den Mikropyramiden bilden sich dann beim weiteren Wachstum Misfitversetzungen und der Film relaxiert schlagartig. Da die Gräben eine hohe Dichte von Nukleationszentren bieten, können die Versetzungen miteinander wechselwirken und so ein regelmäßiges Netzwerk an der Grenzfläche bilden. Da mit dem Abbau der Spannung der Antrieb für Oberflächenrauigkeit entfällt, glättet sich die Schicht wieder und nach etwa 20 *ML* erhält man einen ebenen, weitgehend relaxierten Film.

Den Unterschied zur (001)-Orientierung, wo kein vergleichbarer Mechanismus gefunden wurde, erklärte man sich damit, dass die (111)-Ebene die Hauptgleitebene im Diamantgitter ist und so die Ausbildung eines periodischen Versetzungsnetzwerks an der Grenzfläche über Gleitprozesse möglich ist. Es setzte sich die Ansicht durch, dass dieser Effekt ausschließlich auf (111)-orientierten Substraten auftreten kann [126].

3.2.2 Hintergrunddotierung und Bauelemente

Für die Anwendung von Germaniumschichten in elektronischen Bauelementen ist neben der strukturellen Perfektion auch von Bedeutung, dass die Dotierung über einen möglichst großen Bereich einstellbar ist. Bei der SME führt der Einbau des Surfactants in die Schicht zu einer gewissen Hintergrunddotierung. Die Wahrscheinlichkeit für einen Platzwechsel zwischen Ge- und Surfactantatomen während des Epitaxieprozesses wird durch die Wachstumsrate, die Art des Surfactants und die Substrattemperatur beeinflusst. Damit bestimmen diese Faktoren auch das Niveau der prozessimmanenten Hintergrunddotierung.

Bei den in der Si/Ge-Heteroepitaxie gebräuchlichen Temperaturen um $500\text{ }^{\circ}\text{C}$ führt die SME mit Sb als Surfactant zu stark ($\sim 10^{19}\text{ cm}^{-3}$) n-dotierten Schichten, die damit unabhängig von ihrer strukturellen Qualität für Bauelementanwendungen ungeeignet sind. Erst 1997 wurde bei Untersuchungen zur SME von Germanium auf Si(111) am Institut für Materialien und Bauelemente der Elektronik⁶ an der Leibniz Universität Hannover eine Lösung für dieses

⁶vormals Institut für Halbleitertechnologie und Werkstoffe der Elektrotechnik bzw. Institut für Halbleiterbauelemente und Werkstoffe

Problem gefunden [141]. Bei Wachstumstemperaturen zwischen 550 und 650 °C nimmt die Segregation von Sb stark zu, so dass die inhärente Dotierung um zwei Größenordnungen bis unter $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ abnimmt. Diese Entdeckung schaffte die Voraussetzung für die Herstellung der ersten Ge p-Kanal MOSFETs auf Si-Substraten [142, 143] und ermöglichte auch SME-basierte Ge-Fotodioden auf Si [144].

4 Messmethoden

4.1 Charakterisierung mit Röntgendiffraktometrie

Mit Hilfe der Röntgendiffraktometrie lassen sich Epitaxieschichten relativ schnell und zerstörungsfrei charakterisieren. Indem man die Abstände von Netzebenenscharen im Kristallgitter vermisst, lassen sich Informationen über die strukturelle Perfektion und den Verspannungsgrad der Schichten gewinnen. In diesem Abschnitt werden neben einigen grundlegenden Begriffen die zwei wesentlichen in dieser Arbeit angewandten Messverfahren erläutert.

Das Grundprinzip der Röntgenbeugung wird durch die Braggsche Beugungsbedingung (Gl. 4.1) beschrieben, die in Abb. 4.1a schematisch dargestellt ist. Unter dem Winkel Θ einfallende Röntgenstrahlung der Wellenlänge λ wird an der Netzebenenschar (hkl) des Kristallgitters reflektiert, wobei sich zwischen den einzelnen ausfallenden Strahlen ein Gangunterschied von $2d_{hkl} \sin(\Theta)$ ergibt, so dass diese für ganzzahlige Vielfache der Wellenlänge konstruktiv interferieren.

$$n\lambda = 2d_{hkl} \sin(\Theta) \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.1)$$

Der Abstand der Netzebenen d_{hkl} ergibt sich aus der Gitterkonstante a nach:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}. \quad (4.2)$$

Eine äquivalente Beschreibung erhält man im reziproken Raum mit Gleichung 4.3. Dabei sind \vec{k}_i bzw. \vec{k}_e die Wellenvektoren des einfallenden bzw. des gebeugten Strahls und \vec{Q} ist ein Translationsvektor des reziproken Gitters. Eine geometrische Veranschaulichung wird durch die Ewald-Konstruktion gegeben¹, die in Abb. 4.1b dargestellt ist: Zeichnet man den Vektor \vec{k}_i mit seiner Spitze in den Ursprung des reziproken Raumes und legt dann einen Kreis mit dem Radius $|\vec{k}_i| = |\vec{k}_e|$ um den Anfangspunkt dieses Vektors, so erfüllen alle reziproken Gitterpunkte, die auf diesem Kreis liegen, die Beugungsbedingung.

¹Prinzipiell kann jeder reziproke Gitterpunkt die Braggbedingung erfüllen. Wegen der besseren Anschaulichkeit beschränken wir uns hier auf eine zweidimensionale Darstellung.

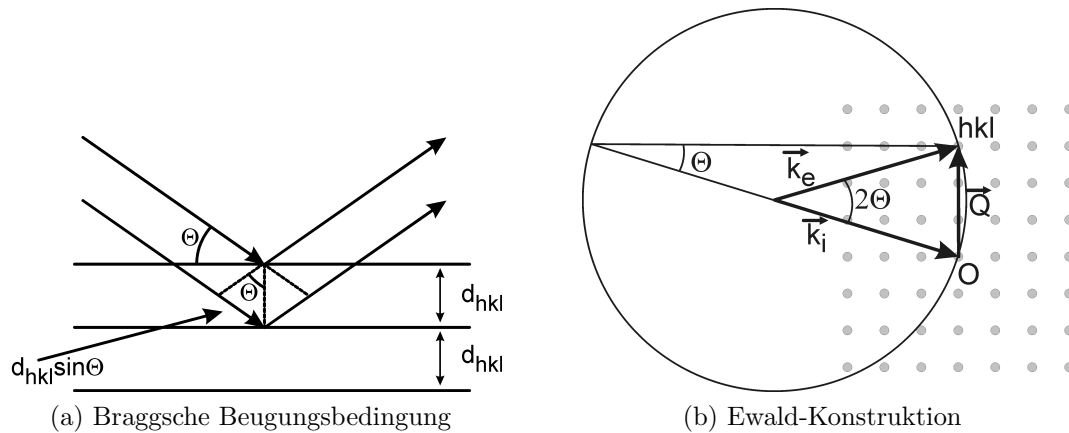


Abb. 4.1: Veranschaulichung der Braggschen Beugungsbedingung im realen und im reziproken Raum.

$$\Delta \vec{k} = \vec{k}_e - \vec{k}_i = \vec{Q} \quad (4.3)$$

Jeder Punkt im reziproken Gitter repräsentiert eine Netzebenenschar des realen Gitters. Der kubischen Einheitszelle mit der Kantenlänge a im realen Raum entspricht eine kubische Zelle mit der Gitterkonstanten a^{-1} im reziproken Raum. Ein tetragonales Gitter weist im reziproken Raum wiederum eine tetragonale Struktur auf. Das reziproke Gitter einer Heterostruktur ergibt sich als Überlagerung der reziproken Gitter von Schicht und Substrat. In Abb. 4.2 sind für eine Heterostruktur mit kubischem Kristallgitter zwei Fälle skizziert, wobei angenommen wurde, dass die Gitterkonstante der Schicht größer ist als die des Substrates. Abb. 4.2a zeigt eine pseudomorphe Epitaxieschicht, die in der Ebene dieselbe Gitterkonstante a_{\parallel} hat wie das Substrat. Folglich liegen die reziproken Gitterpunkte von Substrat und Schicht an derselben q_{\parallel} -Position, während die der Schicht in der senkrechten Richtung zu kleineren q_{\perp} -Werten, also zu größeren Gitterkonstanten hin verschoben sind. Bei einer vollständig relaxierten Schicht sind die Gitterkonstanten in der Ebene und senkrecht dazu gleich. Daher liegen alle reziproken Gitterpunkte auf einer Geraden zum Ursprung, wie in Abb. 4.2b dargestellt. Reziproke Gitterpunkte auf der senkrechten Achse repräsentieren Netzebenen, die parallel zur Oberfläche liegen, alle anderen geneigt zur Oberfläche liegende Netzebenenscharen. Man spricht hier auch von symmetrischen bzw. asymmetrischen Reflexen. Während das Vermessen eines symmetrischen Reflexes ausschließlich Informationen über die Gitterkonstante senkrecht zur Oberfläche a_{\perp} liefert, kann man aus Untersuchungen asymmetrischer Reflexe auch die Gitterkonstante in der Ebene a_{\parallel} bestimmen.

Der Zusammenhang zwischen den Komponenten $|Q_{\parallel}|$ und $|Q_{\perp}|$ des reziproken Gittervektors

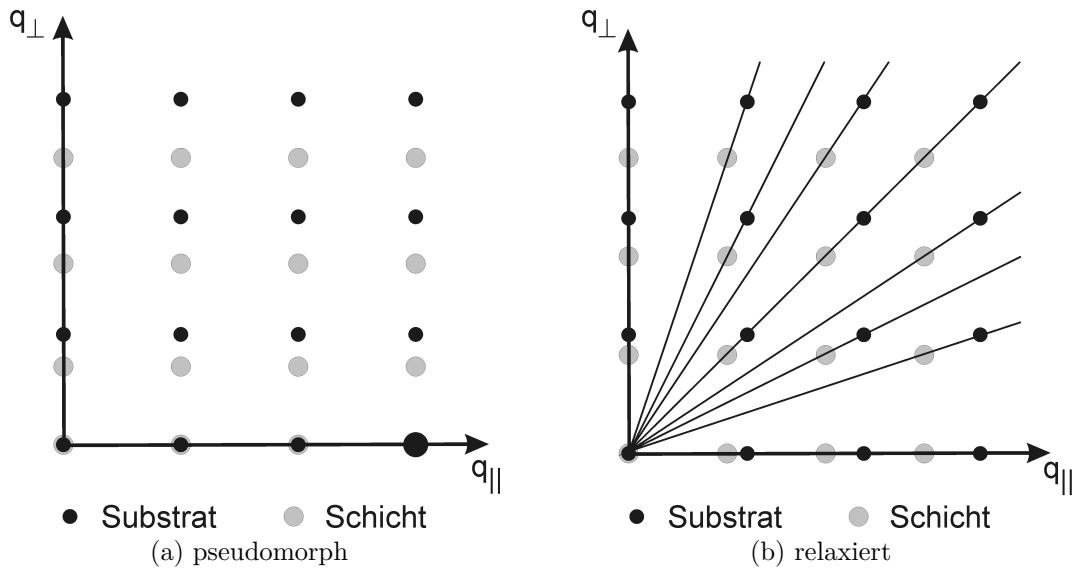


Abb. 4.2: Das reziproke Gitter einer Heterostruktur ergibt sich aus der Überlagerung der reziproken Gitter von Schicht und Substrat.

\vec{Q} und den Millerschen Indizes (h, k, l) lautet:

$$|Q_{\parallel}| = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \sqrt{h^2 + k^2 + hk} \quad (4.4)$$

$$|Q_{\perp}| = \frac{2\pi}{a} l \quad (4.5)$$

4.1.1 $\Theta - 2\Theta$ -Scans

Bei diesem Verfahren wird der Abstand d_{hkl} von parallel zur Probenoberfläche liegenden Netzebenen bzw. die Gitterkonstante senkrecht zur Oberfläche a_{\perp} vermessen, d. h., dass ein Scan entlang der senkrechten Achse im reziproken Raum durchgeführt wird. Dabei wird der Winkel zwischen Quelle und Detektor doppelt so groß gewählt wie der Winkel zwischen Quelle und Probenoberfläche (s. Abb. 4.3). Durch Variation von Θ unter Beibehaltung des Winkelverhältnisses ergeben sich Intensitätsmaxima, wenn die Bragg-Bedingung (Gl. 4.1) erfüllt ist. Aus der Lage zweier zur gleichen Netzebenenschar (hkl) gehörenden Maxima von Substrat und Film kann man direkt die Gitterfehlpassung senkrecht zur Oberfläche ermitteln:

$$\left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{\perp} = \frac{\sin(\Theta_{Sub})}{\sin(\Theta_{Film})} - 1 \quad (4.6)$$

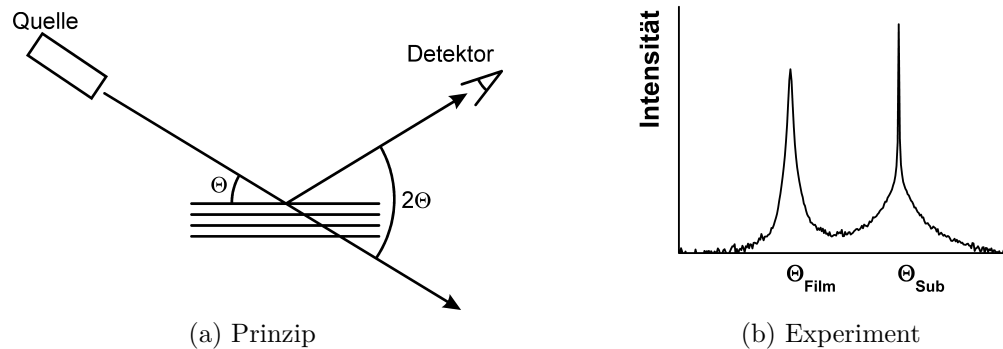


Abb. 4.3: Prinzip des $\Theta - 2\Theta$ -Scans zur Messung der Gitterkonstante senkrecht zur Probenoberfläche: Der Winkel zwischen Quelle und Detektor wird immer doppelt so groß gewählt wie der Winkel zwischen Quelle und Probenoberfläche.

So kann mit dieser Messmethode relativ schnell der Spannungszustand von Ge-Schichten auf Siliziumsubstraten bestimmt werden (s. Anhang).

Darüber hinaus gibt die Breite der Peaks bei hinreichender Schichtdicke Aufschluss über die Perfektion der Orientierung der zugehörigen Netzebenen, also über eine eventuelle Mosaizität der Schicht. Für dünne Schichten wird die Peakbreite im Wesentlichen durch die Schichtdicke bestimmt. Die Peakbreite ist somit eher als relatives Maß für die strukturelle Perfektion von Epitaxieschichten anzuwenden.

4.1.2 ω -Scans

Dieses oft als Rockingkurve bezeichnetes Verfahren wird benutzt, um die strukturelle Perfektion von epitaktischen Schichten zu untersuchen. Dabei wird der Winkel zwischen Detektor und Quelle auf den doppelten Braggwinkel $2\Theta_{hkl}$ einer Netzebenenschar (hkl) fixiert und der Winkel ω zwischen Probe und Quelle um den Wert Θ_{hkl} variiert (s. Abb. 4.4a). Das entspricht einem radialen Scan im reziproken Raum. Als Messkurve erhält man eine Gausskurve, wie sie z.B. in Abbildung 4.4b gezeigt ist. Ihre Form resultiert aus mehreren sich überlagernden Effekten, deren Beiträge ebenfalls als gaussförmig angenommen werden können. Die Halbwertsbreite (FWHM) β_{mess} der gemessenen Kurve ist ein Maß für die Perfektion der Orientierung der untersuchten Netzebenen. Nimmt man an, dass Versetzungen in der epitaktischen Schicht die Ursache für lokale Fehlorientierungen der Netzebenen sind, kann man aus der Halbwertsbreite der Rockingkurve recht einfach und ohne präparativen Aufwand die Dichte der Versetzungen ermitteln.

Mit dem im Folgenden vorgestellten Verfahren kann die Versetzungsdichte bis auf einen Faktor 2 bestimmt werden. Es ist in [145] ausführlich erklärt. Dabei werden verschiedene

Beiträge zur Halbwertsbreite in Betracht gezogen: die intrinsische Verbreiterung durch die Beugung am untersuchten Kristall β_0 , die intrinsische Verbreiterung des verwendeten Monochromators β_d , die Verbreiterung β_α , die durch eine Verkippung des Kristallgitters aufgrund von Versetzungen hervorgerufen wird, die Verbreiterung β_ϵ durch die Verzerrung des Gitters infolge des Spannungsfeldes von Versetzungen, die Verbreiterung aufgrund der Schichtdicke β_L und die Verbreiterung durch die Krümmung der Probe β_r . Die Halbwertsbreiten überlagern sich für eine bestimmte Netzebenenchar (hkl) nach:

$$\beta_{mess}^2(hkl) = \beta_0^2(hkl) + \beta_d^2(hkl) + \beta_\alpha^2(hkl) + \beta_\epsilon^2(hkl) + \beta_L^2(hkl) + \beta_r^2(hkl) \quad (4.7)$$

Analysiert man die Größenordnung der einzelnen Beiträge in 4.7, ergibt sich für die intrinsische Halbwertsbreite des Ge(004) Reflexes $\beta_0(004) \approx 1 \text{ arcsec}$ [145, 146, 147], sie ist damit vernachlässigbar. Der Beitrag des Diffraktometers (Bruker D8 Discover) β_d wird für die beiden verwendeten Monochromatoren mit $\beta_{sym} \approx 13 \text{ arcsec}$ und $\beta_{asym} \approx 29 \text{ arcsec}$ angegeben [148]. Der Anteil der versetzungsbedingten Gitterverzerrung ist $\beta_\epsilon^2 = F_{geom} b^2 n_D |\ln(2 \times 10^{-7} \text{ cm } \sqrt{n_D})| \tan^2(\Theta_{hkl})$ und der der Gitterverkippung $\beta_\alpha^2 = 2\pi b^2 \ln(2) n_D$, wobei b der Betrag des Burgersvektors der Versetzung und n_D die Dichte der Versetzungen sind. Der Faktor F_{geom} enthält den geometrischen Charakter der Versetzungen. Für Schraubenversetzungen im Diamantgitter ist $F_{geom} = 0,09$ und für 60° -Versetzen ist $F_{geom} = 0,16$ [145]. Eine Abschätzung für Defektdichten zwischen 10^6 cm^{-2} und 10^9 cm^{-2} ergibt $\frac{\beta_\alpha}{\beta_\epsilon} \approx 10 - 20$, die Gitterverkippung ist also der dominierende Effekt (s. Abschnitt A.2), während die genaue Natur der Versetzungen nur einen schwachen Einfluss auf die resultierende Halbwertsbreite hat. Die Verbreiterung aufgrund der endlichen Schichtdicke beträgt im Falle des Ge(004) Reflexes $\beta_L \approx 71 \text{ arcsec}$ bei einer Schichtdicke von 500 nm , $\beta_L \approx 36 \text{ arcsec}$ bei $1 \mu\text{m}$ (Details s. Abschnitt A.2). Die Krümmung der Probe ist in den untersuchten Fällen vernachlässigbar.

Korrigiert man die gemessene Halbwertsbreite um die Einflüsse der Apparatur und der Schichtdicke, ergibt sich

$$\beta_{mess}^2 - \beta_d^2 - \beta_L^2 = \beta_\alpha^2 + \beta_\epsilon^2 \quad (4.8)$$

zur Berechnung von n_D .

4.1.3 Reziproke Gitterkarten

Bei der Messung einer reziproken Gitterkarte (engl. reciprocal space map - RSM) wird ein Ausschnitt des reziproken Gitters durch eine Reihe aneinander liegender Linienscans erfasst. Der Zusammenhang zwischen den Koordinaten im reziproken Raum und den Winkeln Θ und ω lautet:

$$|q_{||}| = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \Theta \sin(\Theta - \omega) \quad (4.9)$$

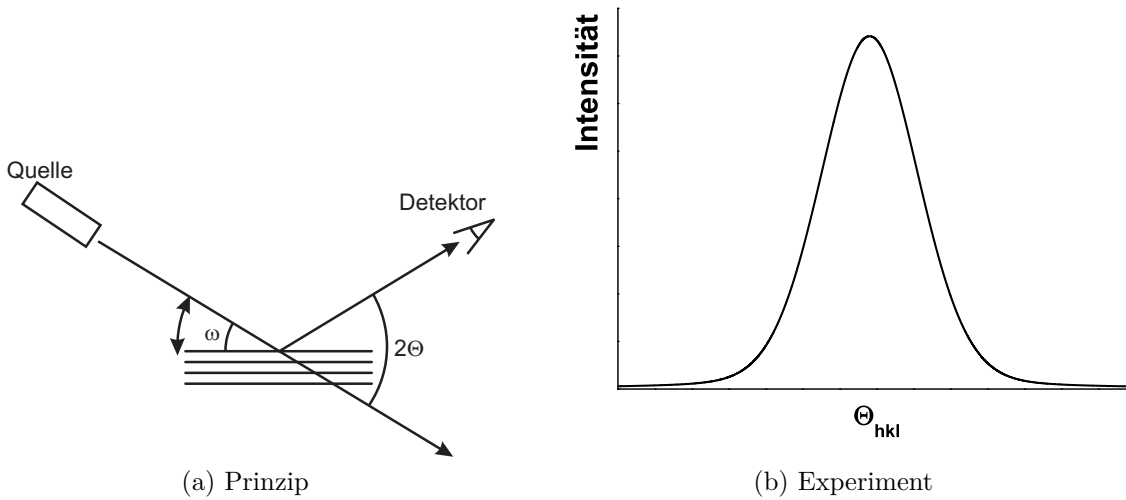


Abb. 4.4: Prinzip des ω -Scans zur Bewertung der strukturellen Perfektion einer Probe: Der Winkel zwischen Quelle und Detektor bleibt konstant, während der Winkel zwischen Quelle und Probe variiert wird.

$$|q_{\perp}| = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \Theta \cos (\Theta - \omega) \quad (4.10)$$

Da so eine Messung sehr zeitaufwendig ist, wurde in dieser Arbeit immer nur ein kleiner Bereich des reziproken Raums aufgenommen, der einen Substratreflex und den entsprechenden Schichtreflex enthält. Die Lage des Schichtreflexes relativ zu dem des Substrats gibt Aufschluss über den Relaxationsgrad der Schicht. Für symmetrische Reflexe erhält man Informationen über die Verspannung der Schicht in der Richtung senkrecht zur Oberfläche, asymmetrische Reflexe ermöglichen auch die Bestimmung des Verspannungsgrades parallel zur Oberfläche. Abb. 4.5 illustriert die Lage eines asymmetrischen Schicht- und Substratreflexes für verschiedene Verspannungszustände, wobei angenommen wurde, dass die Schicht, wie im Fall der Ge/Si-Heteroepitaxie, im relaxierten Zustand eine größere Gitterkonstante aufweist als das Substrat. Ist die Schicht pseudomorph, hat sie parallel zur Grenzfläche die gleiche Gitterkonstante wie das Substrat. Daher liegen Schicht- und Substratreflex auch bei der gleichen q_{\parallel} -Koordinate. Mit zunehmender Relaxation bewegt sich der Schichtreflex entlang der so genannten Relaxationsgerade, bis schließlich, bei vollständiger Relaxation, beide Reflexe auf einer Verbindungsgeraden zum Ursprung liegen. Der Winkel ϕ zwischen der Ursprungsgeraden eines reziproken Gitterpunktes und der senkrechten Achse des reziproken Raumes entspricht dem Neigungswinkel der zu dem Gitterpunkt gehörigen Netzebenenchar relativ zur Oberfläche. Auf allen Positionen unterhalb dieser Ursprungsgeraden ist die Schicht kompressiv verspannt. Liegt der Schichtreflex oberhalb der Ursprungsgeraden steht

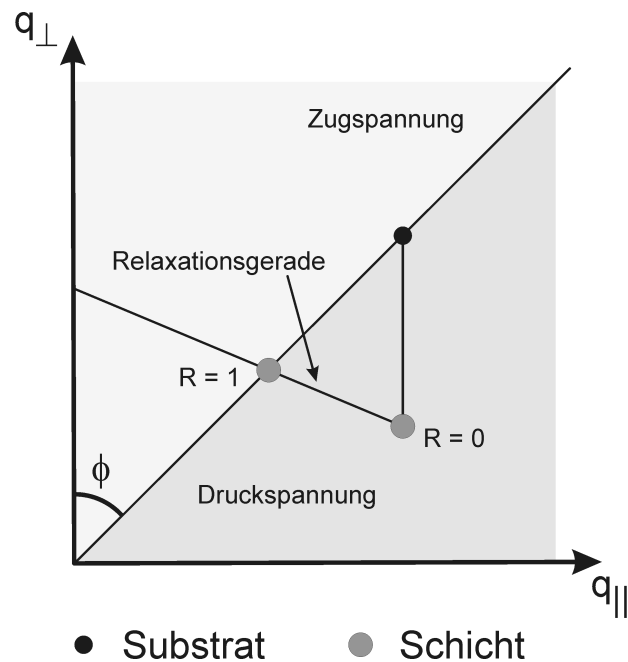


Abb. 4.5: Lage eines asymmetrischen Schicht- und Substratreflexes für verschiedene Verspannungszustände.

die Schicht unter Zugspannung.

Die für die Bestimmung des Verspannungszustandes der Schicht wichtigen Größen (s. Abschnitt A.1) erhält man aus der relativen Lage von Schicht- und Substratreflex im reziproken Raum nach:

$$\left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{\perp} = \left(\frac{\Delta q}{q_{Sub}}\right)_{\perp} \quad (4.11)$$

$$\left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{\parallel} = \left(\frac{\Delta q}{q_{Sub}}\right)_{\parallel} \quad (4.12)$$

4.2 TEM

Die Transmissionselektronenmikroskopie wurde in dieser Arbeit zur strukturellen Charakterisierung der Epitaxieschichten eingesetzt. Dafür wurden überwiegend Querschnittsproben in $\langle 110 \rangle$ -Orientierung präpariert. Für einige Fragestellungen, wie z.B. die Defektdichte im oberflächennahen Bereich, wurden auch Aufsichtsproben hergestellt. Alle Untersuchungen

in dieser Arbeit wurden von Herrn Dr. E. Bugiel² durchgeführt. Neben der Hellfeldmethode wurden spezielle Techniken der Beugungskontrastanalyse zur Untersuchung von Kristalldefekten angewendet. Roos hat in [149] eine kompakte Darstellung dieser Methoden geliefert, an die sich der folgende Abschnitt anlehnt. Eine sehr ausführliche Darstellung der verschiedenen Verfahren der TEM bietet [150].

4.2.1 Analyse von Kristalldefekten im Beugungskontrast

In der konventionellen Transmissionselektronenmikroskopie unterscheidet man zwischen der Hellfeldabbildung, bei der der ungebeugte Strahl verwendet wird, und der Dunkelfeldabbildung, bei der ein gebeugter Strahl verwendet wird. Die Kontraste von Kristallbaufehlern entstehen aufgrund der Änderung der Braggschen Reflexionsbedingung durch die Gitterverzerrungen der Defekte (Beugungskontrast).

Im so genannten Zweistrahlfall ist die Probe so zum Elektronenstrahl justiert, dass eine Schar von Netzebenen die Bragg-Bedingung genau erfüllt, d.h., dass neben dem durchgehenden nur ein gebeugter Strahl auftritt. Das Beugungsbild enthält dann nur zwei starke Reflexe, \vec{g}_{000} des durchgehenden und \vec{g}_{hkl} (kurz: \vec{g}) des gebeugten Strahls, während alle anderen vernachlässigt werden können. In diesem idealen Zweistrahlfall liegt der zum gebeugten Strahl gehörende Reflex \vec{g} genau auf der Ewaldkugel. Die Defektkontraste lassen sich jedoch am besten untersuchen, wenn die Aufnahmen unter Zweistrahlbedingungen bei genügend großem (positiven) Anregungsfehler gemacht werden. Dabei beschreibt der Abweichungsparameter (Anregungsfehler) s_g die Abweichung der Probenorientierung von der exakten Bragg-Reflexionslage. Er ist definiert als der Abstand des Punktes \vec{g} im reziproken Gitter von der Ewaldkugel. Der Parameter s_g ist positiv, wenn der Gitterpunkt innerhalb der Ewaldkugel liegt.

Im Dunkelfeld ist die Intensität an den Stellen am höchsten, an denen die reflektierenden Gitterebenen aufgrund des Verzerrungsfeldes der Versetzung zur exakten Bragg-Reflexionslage hin verbogen sind. Nur solche Gitterstörungen wirken sich im Kontrast aus, deren Verschiebungsvektoren \vec{u} senkrecht oder geneigt zur reflektierenden Netzebenenschar (hkl) und damit zu \vec{g} liegen [151]. Ist also $\vec{g} \cdot \vec{u} = 0$, so sind die Defekte unsichtbar ($\vec{g} \cdot \vec{u}$ -Unsichtbarkeitskriterium).

Für Versetzungen ist die nachfolgende $\vec{g} \cdot \vec{b}$ -Regel eine äquivalente Formulierung. Die kinematische Theorie der Elektronenbeugung liefert folgende Bedingungen, die für totale Auslöschung des Kontrasts einer Versetzung in einem elastisch isotropen Material gleichzeitig erfüllt sein müssen [152]:

²wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Materialien und Bauelemente der Elektronik der Leibniz Universität Hannover

$$\vec{g} \cdot \vec{b} = 0 \quad (4.13)$$

$$\vec{g} \cdot \vec{b}_e = 0 \quad (4.14)$$

$$\vec{g} \cdot (\vec{b} \times \vec{l}) = 0 \quad (4.15)$$

\vec{g} ist hier der Beugungsvektor, \vec{b} der Burgersvektor, \vec{b}_e die Stufenkomponente des Burgersvektors und \vec{l} die Linienrichtung der Versetzung. Für Partialversetzungen mit dem Burgersvektor \vec{b}_p gelten die gleichen Aussagen, solange das Produkt $\vec{g} \cdot \vec{b}_p$ eine ganze Zahl ist.

Bei Schraubenversetzungen ist $\vec{b}_e = 0$ und $\vec{b} \parallel \vec{l}$. Damit sind die zweite und dritte Bedingung unabhängig von \vec{b} erfüllt. Bei Stufenversetzungen sind die beiden ersten Bedingungen äquivalent. Ist $\vec{g} \cdot \vec{b}_e = 0$, aber $\vec{g} \cdot (\vec{b} \times \vec{l}) \neq 0$, so bleibt ein Restkontrast bestehen. Bei vermischten Versetzungen ist vollständige Auslöschung niemals möglich, da nie alle drei Bedingungen gleichzeitig erfüllt sind.

Diese Regeln können dazu benutzt werden, den Burgersvektor einer Versetzung zu bestimmen. Findet man zwei nicht-kollineare Beugungsvektoren \vec{g}_1 und \vec{g}_2 , für die der Versetzungskontrast verschwindet, so steht der Burgersvektor senkrecht auf der von \vec{g}_1 und \vec{g}_2 aufgespannten Ebene. Aus der kinematischen Theorie folgt, dass die Breite w des Kontrasts einer Versetzungslinie umgekehrt proportional zum Abweichungsparameter s_g ist [153]:

$$w \approx \frac{1}{2\pi s_g} \quad (4.16)$$

Mit größer werdendem s_g wird also die Kontrastbreite geringer, allerdings wird auch die Intensität des Reflexes \vec{g} schwächer. Dieser Effekt wird in einer speziellen Variante der Dunkelfeldtechnik, der so genannten weak-beam Dunkelfeldmethode, ausgenutzt, um die Auflösung zu steigern [154]. Eine ausführliche Beschreibung findet sich z.B. in [155].

In dieser Arbeit wurde die weak-beam Dunkelfeldmethode eingesetzt, um die bei der SME von Ge auf Si an der Grenzfläche zwischen Schicht und Substrat entstehenden Versetzungsnetzwerke zu analysieren.

4.2.2 EDXS

Die energiedispersive Röntgenspektrometrie (EDXS) wurde zur Untersuchung von Konzentrationsverläufen in Ge/Si-Schichtsystemen eingesetzt. Um eine möglichst hohe laterale Auflösung zu erreichen, wurden die Messungen an TEM-Querschnittsproben durchgeführt. Abbildung 4.6 zeigt das Prinzip des Verfahrens: Eine dünne Probe (typischerweise einige

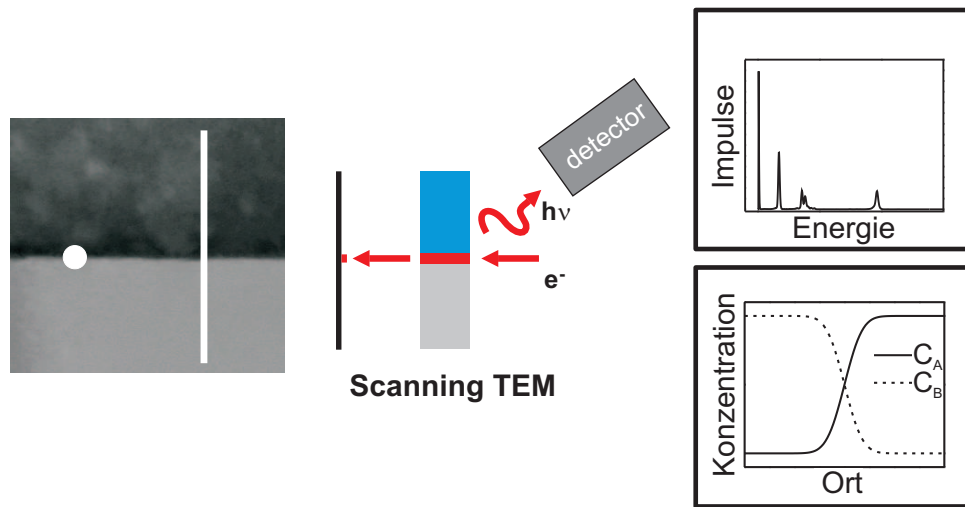


Abb. 4.6: EDXS Prinzip: Eine dünne (typischerweise einige 10 nm) Probe wird im TEM durchstrahlt, wobei über den inneren Fotoeffekt charakteristische Röntgenstrahlung erzeugt wird. Nutzt man das TEM im Rastermodus (Scanning TEM), kann man wahlweise Punktspektren aufnehmen oder Konzentrationsverläufe entlang einer Linie messen.

10 nm) wird im TEM durchstrahlt, wobei über den inneren Fotoeffekt charakteristische Röntgenstrahlung erzeugt wird. Nutzt man das TEM im Rastermodus (Scanning TEM), kann man wahlweise Punktspektren aufnehmen oder Konzentrationsverläufe entlang einer Linie messen. Eine ausführliche Beschreibung des Verfahrens findet sich z.B. in [150].

Die laterale Auflösung hängt von der Primärenergie der Elektronen, dem Strahldurchmesser auf der Probe und von dem Anregungsvolumen in der Probe, also von der Probendicke ab. Die Messungen in dieser Arbeit wurden mit einem JEM-2100F-UHR (JEOL) TEM mit Feldemissionsemitter und INCA 200 EDXS-System (Oxford Instruments) durchgeführt. Mit den typischen Parametern, einem Strahldurchmesser von 2 nm , einer Primärenergie von 200 keV und einer Probendicke von 40 nm erreicht man eine laterale Auflösung von wenigen Nanometern. Die Nachweisgrenze für Germanium und Silizium liegt unter 1%, das entspricht wenigen hundert Atomen im untersuchten Volumen.

Ein Problem stellt die Verunreinigung der Probenoberfläche durch Kohlenstoff während der Messung dar, die zu einer Verfälschung der gemessenen Intensität führen kann. In Abbildung 4.7 ist exemplarisch gezeigt, wie die Änderung der Probendicke aufgrund von Kohlenstoffablagerungen zu einer Verfälschung des Konzentrationsverlaufes führen kann.

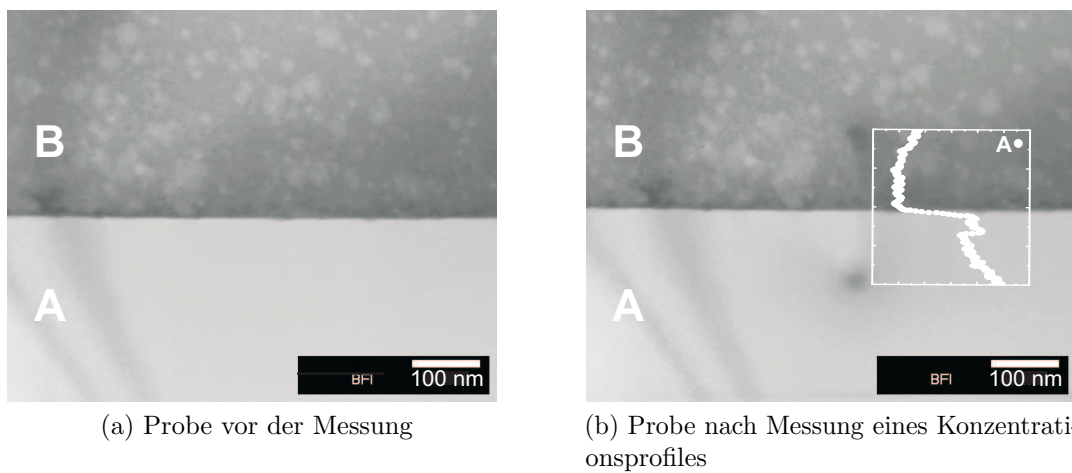


Abb. 4.7: Kontamination bei der EDXS-Messung: Beim Aufnehmen eines EDXS-Profiles entlang einer Linie kommt es zur Abscheidung von Kohlenstoff aus dem Restgas der TEM-Kammer. Die Verunreinigung tritt besonders in den Wendepunkten der Rasterlinie auf (dunkle Flecken in Abb.4.7b). Die Zunahme der Probendicke kann fälschlicherweise zu einem Anstieg im gemessenen Konzentrationsverlauf führen, wie es in Abb.4.7b gezeigt ist.

4.3 Elektronenbeugung

Die Elektronenbeugung wird eingesetzt, um Information über die Struktur und Ordnung von Oberflächen zu gewinnen. Man unterscheidet dabei zwischen der Beugung niederenergetischer Elektronen (engl.: low energy electron diffraction - LEED) oder der Beugung hochenergetischer Elektronen in Reflexion (engl.: reflection high energy electron diffraction - RHEED) oder in Transmission (engl.: transmission high energy electron diffraction - THEED). Die letztgenannte Methode wird typischerweise im Rahmen von TEM-Untersuchungen genutzt und wird hier deshalb nicht weiter betrachtet. Die beiden anderen Verfahren stehen an der VG MBE zur Verfügung und wurden hauptsächlich zur Prozesskontrolle (RHEED) angewendet. Spezielle Untersuchungen mit RHEED und LEED wurden zur Analyse des Einflusses der Sb-Bedeckung auf die Oberflächenfacettierung von Germaniumschichten auf Si durchgeführt (s. Abschnitt 7.2). Ausführliche Darstellungen der verschiedenen Methoden der Elektronenbeugung finden sich z.B. in [156, 157] (RHEED), [156, 158] (LEED) und [?] (THEED).

Abbildung 4.8 zeigt schematisch die experimentellen Anordnungen. Beide Methoden eignen sich aufgrund ihrer geringen Informationstiefe von nur wenigen Monolagen hervorragend für die Untersuchung von Oberflächen. Bei RHEED gewährleistet das ein flacher Einfallswinkel von typischerweise $0-4^\circ$ bei Elektronenenergien im Bereich von $10 - 50 \text{ kV}$. Daher ist diese Methode sehr gut für Untersuchungen während des Wachstums geeignet. Bei LEED wird unter senkrechtem Einfall, aber mit geringen Elektronenenergien von etwa $20 - 500 \text{ eV}$ gearbeitet. LEED ist dadurch verzerrungsfrei, leidet allerdings unter der Abschattung durch die Elektronenkanone.

Die Wechselwirkung von Elektronen mit kristallinen Oberflächen ist analog zu der von Röntgenstrahlung mit kristallinen Festkörpern, nur dass es sich bei einer Oberfläche um ein zweidimensionales Gitter handelt. Das reziproke Gitter einer idealen Oberfläche ist daher kein Punktgitter, sondern ein Stangengitter. Die Schnittpunkte der Ewaldkugel mit den reziproken Gitterstangen liefern, wie in Abbildung 4.9 dargestellt, die Beugungsreflexe.

Neben der strukturellen Ordnung können mit der Elektronenbeugung auch Nichtidealitäten von Oberflächen untersucht werden. So kann man Informationen über Stufen, Rauigkeit, Mosaizität, dreidimensionale Strukturen, wie z.B. Inseln, oder eine Facettierung von Oberflächen gewinnen [156, 158].

4.4 Sekundärionen Massenspektroskopie

Die Sekundärionen Massenspektroskopie (SIMS) dient zur Analyse der chemischen Zusammensetzung einer Probe. Dabei werden nach dem Prinzip der Kathodenzerstäubung (engl.: Sputtern) durch Beschuss mit Ionen (typischerweise O_2^+ oder Cs^+) Teilchen aus der Probe

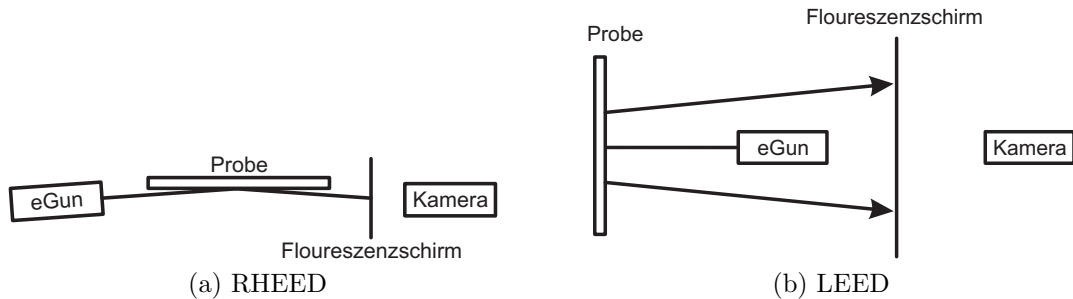


Abb. 4.8: Schematische Darstellung der experimentellen Anordnung bei RHEED (s. Abb. 4.8a) bzw. LEED (s. Abb. 4.8b): Beide Methoden eignen sich aufgrund ihrer geringen Informationstiefe von nur wenigen Monolagen hervorragend für die Untersuchung von Oberflächen. Bei RHEED gewährleistet das ein flacher Einfallswinkel von typischerweise $0-4^\circ$ bei Elektronenenergien im Bereich von $5 - 25 \text{ kV}$. Bei LEED wird unter senkrechtem Einfall, aber mit geringen Elektronenenergien von etwa $10 - 100 \text{ eV}$ gearbeitet. LEED ist dadurch verzerrungsfrei, leidet allerdings unter der Abschattung durch die Elektronenkanone.

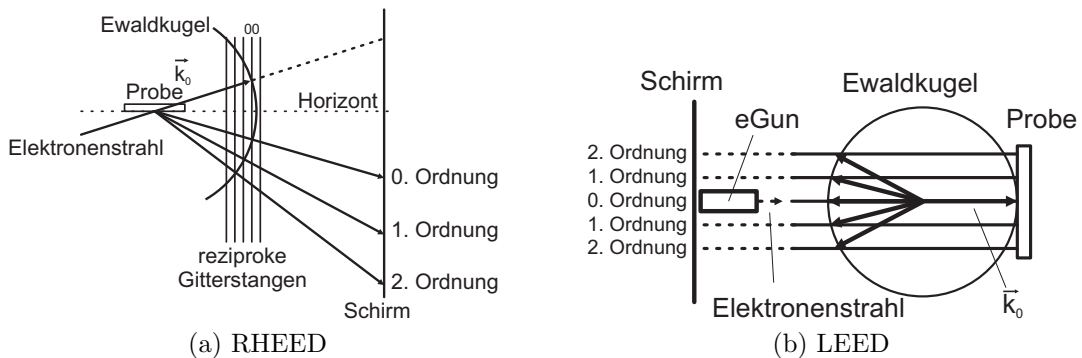


Abb. 4.9: Ewald-Konstruktion für RHEED (s. Abb. 4.9a) und LEED (s. Abb. 4.9b) (nach [156]): Das reziproke Gitter einer idealen Oberfläche ist kein Punkt-, sondern ein Stangengitter, dessen Schnittpunkte mit der Ewaldkugel die Beugungsreflexe liefern.

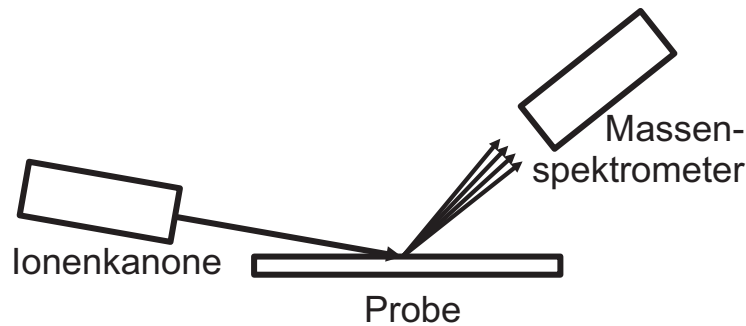


Abb. 4.10: SIMS Prinzip: Durch Beschuss mit Ionen werden Teilchen aus der Probe herausgelöst. Die desorbierenden Ionen können dann mit Hilfe eines Massenspektrometers analysiert werden.

herausgelöst. Wie in Abbildung 4.10 schematisch gezeigt, können die desorbierten Ionen mit Hilfe eines Massenspektrometers analysiert werden. Dieses Verfahren erlaubt neben Oberflächenuntersuchungen auch die Messung von Tiefenprofilen, wobei allerdings beachtet werden muss, dass die Abtragsrate verschiedener Elemente unterschiedlich sein kann, so dass der Sputterprozess selbst die Zusammensetzung der Probenoberfläche beeinflusst.

Alle SIMS-Untersuchungen im Rahmen dieser Arbeit wurden von Herrn Dr. R. Kurps am Institut für High Performance Microelectronics (IHP) in Frankfurt/Oder durchgeführt. Dabei wurden Sauerstoffprimärionen mit einer Energie von 3 keV für Tiefenprofilanalysen von $1 \mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten verwendet. Die Messungen des oberflächennahen Bereiches wurden mit einer Primärenergie von 500 eV durchgeführt. Die Nachweisgrenze für Antimon in Germanium wurde mit $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ angegeben.

4.5 Rasterkraftmikroskopie

Bei der Rasterkraftmikroskopie wird eine Oberfläche mit einer feinen Spitze zeilenweise mechanisch abgetastet [159]. Abbildung 4.11a zeigt das Messprinzip. Die Spitze ist an einem Hebelarm (engl.: cantilever) befestigt. Die Auslenkung des Hebelarms wird über eine Fotodiode gemessen und so das Höhenprofil der Oberfläche ermittelt. Ein Vorteil des AFM gegenüber dem Rastertunnelmikroskop ist, dass es auch für isolierende Proben geeignet ist.

Die Betriebsmodi der Rasterkraftmikroskopie unterscheiden sich darin, wie nah die Spitze der Oberfläche kommt, und damit in der Art der Wechselwirkung zwischen Spitze und Probe. Abbildung 4.11b zeigt den Verlauf der Kraft F zwischen Spitze und Probenoberfläche in Abhängigkeit vom Abstand z und die Bereiche für die verschiedenen Betriebsmodi. Ein weiteres Unterscheidungsmerkmal ist die jeweils aufgezeichnete Information. Eine sehr gute Darstellung der verschiedenen Verfahren der Rasterkraftmikroskopie findet sich unter [161].

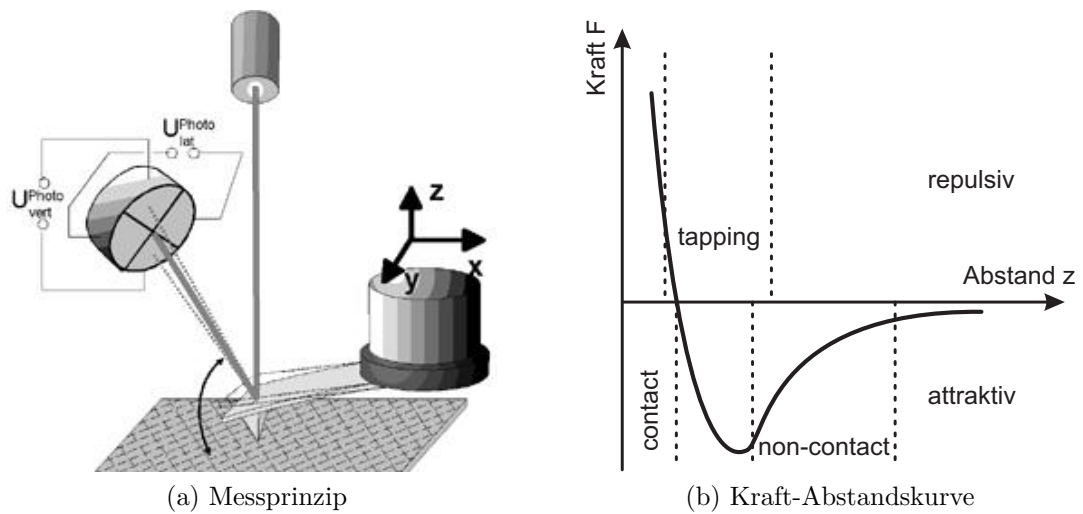


Abb. 4.11: 4.11a Schematische Darstellung des Messprinzips bei der Rasterkraftmikroskopie: Die an einem Hebelarm befestigte Spitze wird zeilenweise über die zu untersuchende Oberfläche gerastert. Die Auslenkung des Hebelarms wird über eine Fotodiode gemessen und so das Höhenprofil der Oberfläche ermittelt. 4.11b Verlauf der Kraft-Abstandskurve zwischen Spitze und Probenoberfläche. Bei direktem Kontakt wirken repulsive Kräfte auf den Cantilever, im Nahbereich ist die Wechselwirkung durch Van-der-Waals-Kräfte bestimmt (nach [160]).

Kontakt-Modus In diesem Betriebsmodus ist die Spitze in direktem Kontakt mit der Probenoberfläche. Es wirkt eine repulsive Kraft zwischen Oberfläche und Spitze. In der einfachsten Variante, die ohne Regelung auskommt, wird die Höhe der Cantileveraufhängung konstant gehalten (constant height mode) und seine Auslenkung beim Rastern über die Oberfläche gemessen. Aus den Federeigenschaften des Cantilevers kann man dann das Höhenprofil der Probe ermitteln.

In der flexibleren Variante, die in dieser Arbeit eingesetzt wurde, wird die auf den Cantilever wirkende Kraft zwischen Spitze und Probe konstant gehalten (constant force mode), indem die Cantileveraufhängung mit Hilfe eines Piezostellelementes nachgeführt wird. Im Idealfall findet dabei keine Auslenkung des Cantilevers statt, real wird die Information über die Topografie der Oberfläche aber sowohl im Regelsignal des Piezoelementes als auch in der Auslenkung des Cantilevers aufgezeichnet.

Eine Messung im Kontakt-Modus hat den Vorteil, dass eine Probe relativ schnell und mit hoher Messgenauigkeit vermessen werden kann, andererseits sind nicht alle Oberflächen für eine Messung geeignet, da sie durch die Messspitze beschädigt werden könnten.

Non-contact Modus Zwischen der Probe und der Messspitze wird ein Abstand von typischerweise 10 – 100 nm eingestellt. Die in diesem Bereich wirkenden attraktiven Kräfte sind sehr klein und somit schwierig zu messen. Daher wird der Cantilever in Schwingung nahe seiner Resonanzfrequenz versetzt. Wirkt nun eine Kraft auf den Cantilever, so verändert sich die Frequenz der Schwingung, wodurch die auf ihn wirkende Kraft indirekt bestimmt werden kann. Da die Größe der Kraft abstandsabhängig ist, kann auf diese Weise die Topografie der Probe bestimmt werden. Dieser Modus hat den Vorteil, dass alle Oberflächen vermessen werden können, aber den Nachteil der geringeren Messgeschwindigkeit gegenüber dem Kontakt-Modus.

Tapping-Modus In diesem Betriebsmodus arbeitet man ähnlich wie beim Non-contact Modus mit oszillierendem Cantilever. Die Messspitze kommt der Probenoberfläche so nahe, dass die repulsiven Kräfte auf den Cantilever wirken und die Amplitude seiner Schwingung dämpfen. Aus der Änderung der Amplitude lässt sich Information über die Topografie der Probe entnehmen. In diesem Modus können Oberflächen präzise und mit hoher Messgeschwindigkeit vermessen werden, wobei die Belastung für die Probenoberfläche und die Spitze gering ausfällt. Besonders weiche Oberflächen können allerdings nur im Non-contact Modus vermessen werden.

Autoprobe M5 Alle Messungen im Rahmen dieser Arbeit wurden mit einem Autoprobe M5 AFM von Park Scientific Instruments durchgeführt. Mit dem Gerät lassen sich Proben bis zu einem Durchmesser von 200 mm vermessen. Der maximale Scanbereich beträgt

$100 \times 100 \mu\text{m}^2$. Je nach verwendetem Betriebsmodus wurden geeignete Cantilever mit Si_3N_4 -beschichteten Spitzen verwendet [160].

5 Experimentelle Durchführung

5.1 MBE-Anlage

Die VG 80S MBE-Anlage, mit der die Proben für diese Arbeit hergestellt wurden, besteht aus drei Kammern: einer Wachstumskammer, einer Präparationskammer und einer Schleuse. Sie bietet die Möglichkeit zur Prozessierung von Wafern mit bis zu 150 mm Durchmesser. Für diese Arbeit wurden einkristalline Siliziumwafer mit 100 mm Durchmesser und einem Fehlschnitt von weniger als $0,5^\circ$ als Substrate verwendet. Der Basisdruck von $< 1 \times 10^{-10}$ mbar wird durch Ionengetter- und Ti-Sublimationspumpen sowie eine Kryopumpe an der Wachstumskammer erreicht. Hier ist zusätzlich ein Flüssigstickstoff-Kühlschild eingebaut, um die Desorption von Restgasmolekülen von den Kammerwänden während der Prozesse zu minimieren.

Für die Schichtherstellung stehen Elektronenstrahlverdampfer (ESV) für Silizium und Germanium zur Verfügung, die einzeln oder paarweise (Koverdampfen) betrieben werden können. Aus einer Knudsen-Zelle kann Antimon verdampft werden, für Bor ist eine Hochtemperaturzelle eingebaut. Die Ratenmessung und -steuerung für die ESV erfolgt über Electron Impact Emission Sensoren (EIES) (Leybold Inficon, Sentinel III). Hierbei wird ein Teil des verdampften Materials durch einen Elektronenstrahl zur Emission von charakteristischem Licht angeregt, welches über einen Photomultiplier detektiert wird. Die Intensität dieser charakteristischen Strahlung ist proportional zur Menge des verdampften Materials [162]. Das Verfahren weist keine Verschleißteile auf und ist somit sehr wartungsfreundlich. Bei den typischen Wachstumsraten von $3 - 12 \frac{nm}{min}$ wurde eine Ratenstabilität von $\pm 1,2 \frac{nm}{min}$ erreicht.

Der Substratmanipulator in der Wachstumskammer erlaubt neben der Rotation das Heizen der Proben bis ca. $900^\circ C$ durch einen Strahlungsheizer, der aus dünnen Tantalbändern aufgebaut ist. Die Messung und Regelung der Substrattemperatur erfolgt über ein am Manipulator angebrachtes PtRh/Pt-Thermoelement. Abbildung 5.2 zeigt eine Kalibrationskurve für den Substratheizer, wie sie von Adamski und Schäffer mit einem auf einem Wafer aufgeklebten NiCr/Ni-Thermoelement bestimmt wurde [163, 164]. Im Temperaturbereich oberhalb von $450^\circ C$ liegt die tatsächliche Substrattemperatur etwa $60^\circ C$ unter der angezeigten Temperatur. Zur genaueren Bestimmung der Substrattemperatur ist zusätzlich ein Infrarot-Pyrometer vorhanden. Aus der Kalibrationskurve in Abbildung 5.2 erkennt man,

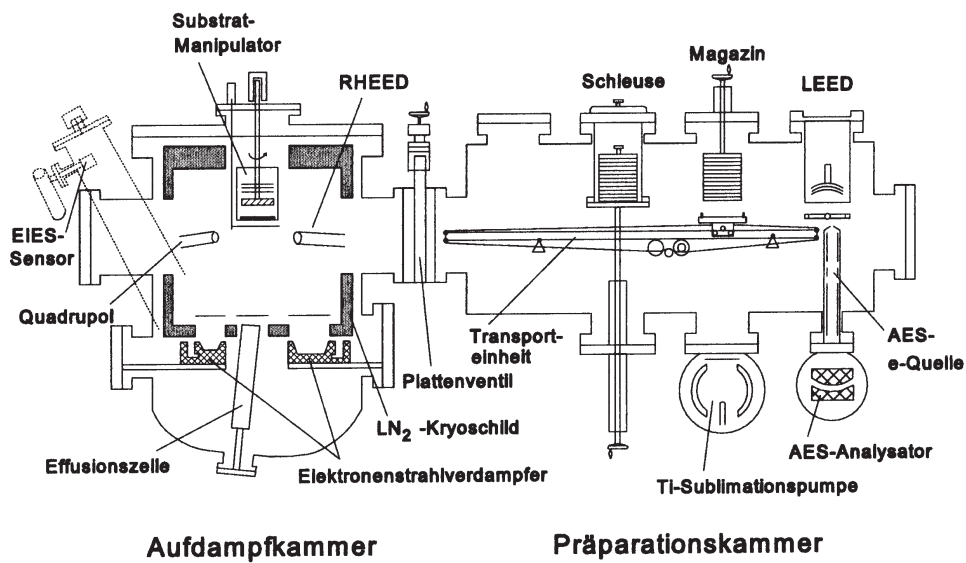


Abb. 5.1: Skizze der MBE-Anlage: Die Aufdampfkammer ist mit Elektronenstrahlverdampfern für Silizium und Germanium sowie Effusionszellen für Antimon und Bor ausgestattet. Zur in situ Analyse während des Schichtwachstums steht ein RHEED-System zur Verfügung. Die Präparationskammer ist mit einem LEED- und einem AES-System zur Analytik ausgerüstet. Außerdem ist hier die Schleuse für den schnellen Transfer von Substraten integriert.

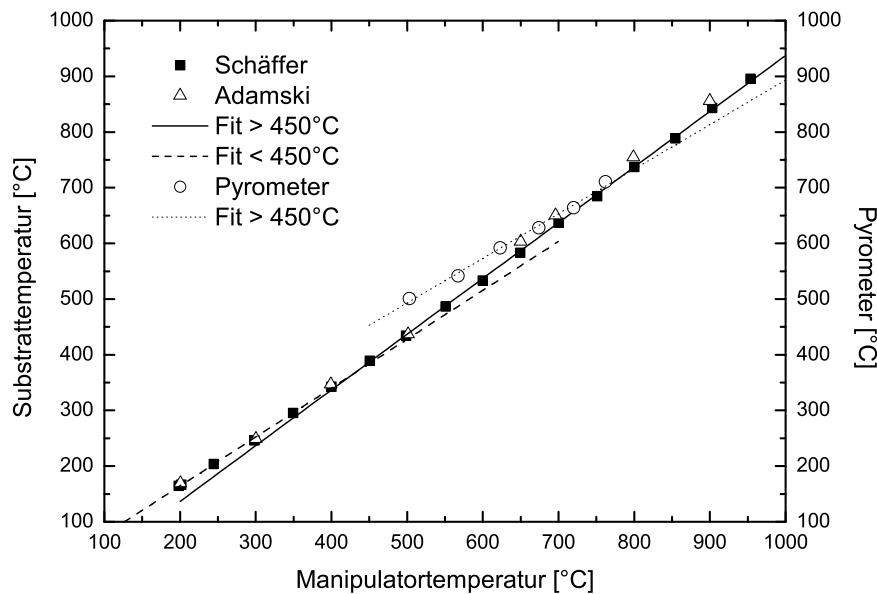


Abb. 5.2: Kalibrationskurve der Temperaturmessung am Substratmanipulator der MBE.

dass das Pyrometer im Temperaturbereich $650 - 800\text{ }^{\circ}\text{C}$ die tatsächliche Substrattemperatur wiedergibt. In diesem Temperaturbereich kann der Einfluss der Substratdotierung auf die Strahlungsabsorption des Substrates aufgrund der intrinsischen Ladungsträgerdichte von Silizium vernachlässigt werden [165].

Neben einem Massenspektrometer für die Restgasanalyse steht ein RHEED-System (Staib) für die Untersuchung der Kristallstruktur der Oberfläche in der Wachstumskammer zur Verfügung. In der Präparationskammer sind außerdem noch ein LEED-System und ein AES-System (beide VG) zur weiteren Oberflächenanalyse installiert.

5.2 Kalibration der Wachstumsraten

Zur Eichung der Siliziumrate wurden Siliziuminseln mit einer Sollsichtdicke von 250 nm durch eine Lochmaske aufgewachsen [164]. Dabei wurde auf eine Probenrotation verzichtet, um ein Verrutschen des Wafers gegenüber der Lochmaske zu vermeiden. Anschließend wurde an mindestens 5 Stellen auf dem Wafer die Höhe der $1 \times 1\text{ mm}$ großen Inseln mit einem Profilometer (DEKTAK8080) vermessen und für die Kalibration gemittelt.

Die Eichung der Germaniumrate erfolgte an ganzflächig aufgewachsenen 150 nm dicken

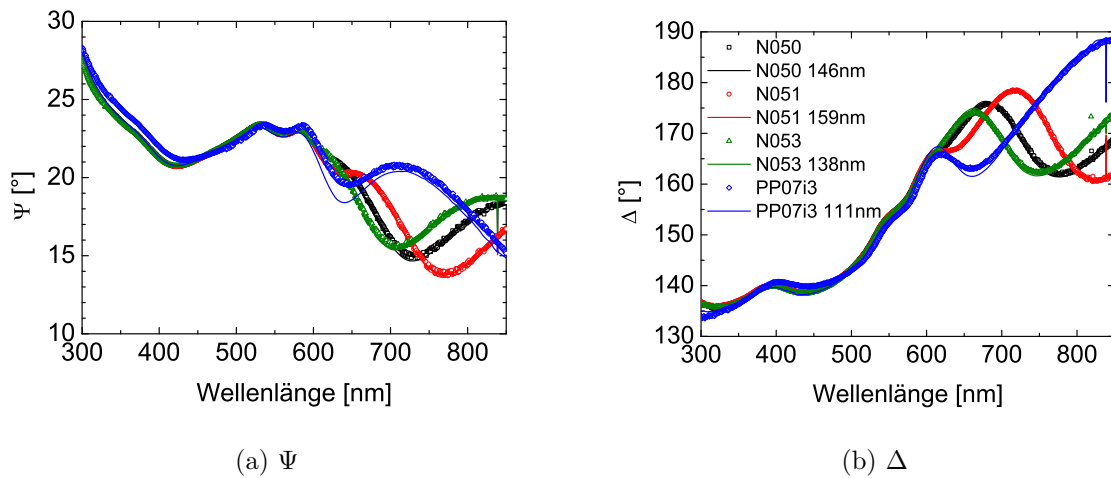


Abb. 5.3: Spektrale Messung der Ellipsometriewinkel Ψ und Δ für unterschiedlich dicke Germaniumschichten: Man erkennt eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Messung (Symbole) und Modell (Linien) sowie die große Sensitivität für Schichtdickenvariationen.

SME-Ge Schichten (Sollwert) mittels spektraler Ellipsometrie. Abbildung 5.3 zeigt die Abhängigkeit der Ellipsometerwinkel Ψ und Δ von der Ge-Schichtdicke im Bereich um 150 nm . Der Vorteil dieser Methode gegenüber der für Si angewendeten liegt darin, dass ohne Maske und somit bei der tatsächlichen Prozesstemperatur und mit Rotation kalibriert werden kann. Abbildung 5.4 zeigt die Schichtdickenverteilung über einen 100 mm Wafer und den Einfluss der Substratrotation. Die Lage der Messpunkte auf dem Wafer sowie deren ungefähre Größe sind als rote Kreise dargestellt. Beim Wachstum mit Rotation variiert die Schichtdicke kaum über den Wafer (Uniformität $U = 0,2\%$). Wächst man dagegen ohne Substratrotation, erhält man einen starken Schichtdickengradienten über den Wafer ($U = 28,9\%$), wobei die Dicke mit zunehmender Entfernung von der Quelle abnimmt. In der Mitte des Wafer stimmen beide Schichtdicken relativ gut überein.

Der Antimonfluss wurde durch RHEED-Beobachtung der Oberflächenrekonstruktion einer Si(111)-Oberfläche geeicht. Die saubere Oberfläche weist bei 670°C eine 7×7 -Rekonstruktion auf, die sich mit zunehmender Sb-Bedeckung in eine $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Rekonstruktion umwandelt. Bei Bedeckungen ab $0,9 \text{ ML}$ ist der Übergang schließlich abgeschlossen [131], so dass ein zuverlässiges Maß für die auf der Oberfläche deponierte Sb-Menge gegeben ist. Aus der für die Änderung der Überstruktur notwendigen Zeit lässt sich schließlich die Sb-Rate in Abhängigkeit von der Quellen- und Substrattemperatur bestimmen.

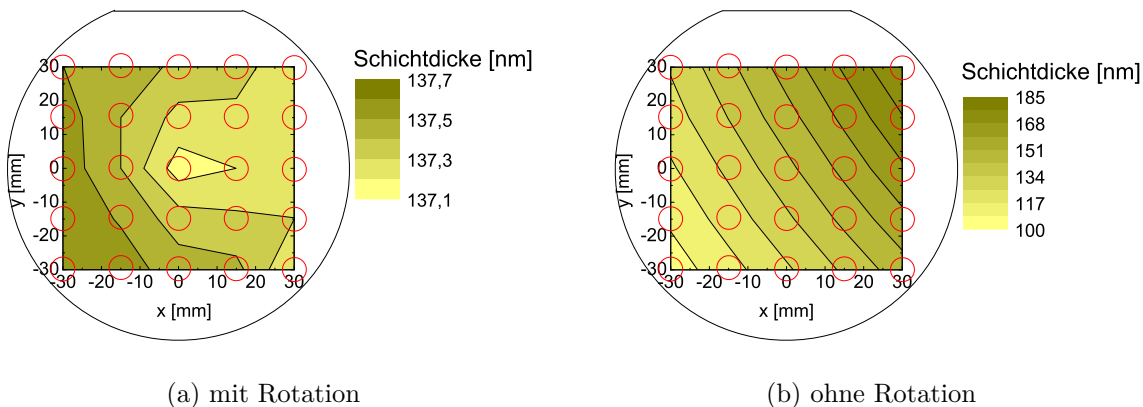


Abb. 5.4: Wafermapping der Schichtdicke von Germaniumkalibrationsschichten beim Wachstum mit und ohne Rotation: Die Lage der Messpunkte auf dem Wafer sowie deren ungefähre Größe sind als rote Kreise dargestellt. Beim Wachstum mit Rotation variiert die Schichtdicke kaum über den Wafer ($U = 0,2\%$). Wächst man dagegen ohne Substratrotation, erhält man einen starken Schichtdickengradienten über den Wafer ($U = 28,9\%$), wobei die Dicke mit zunehmender Entfernung von der Quelle abnimmt. In der Mitte des Wafer stimmen beide Schichtdicken relativ gut überein.

5.3 Probenreinigung

Die Präparation sauberer Ausgangsflächen ist für die Epitaxie von entscheidender Bedeutung. Es sind verschiedene *in situ* und *ex situ* Methoden bekannt, deren gemeinsames Ziel es ist, die Verunreinigung der Waferoberfläche mit kohlenstoffhaltigen Verbindungen und Partikeln zu reduzieren. Eine Übersicht hierzu bieten [166, 167, 168]. Am MBE wurde mit Erfolg die UV/Ozon-Reinigung in der *ex situ* Vorbehandlung eingesetzt [130].

Dabei wird der Wafer in einer Sauerstoffatmosphäre UV-Strahlung ausgesetzt, die geeignet ist, die Bindungen diverser Oberflächenverunreinigungen aufzubrechen und gleichzeitig per Photolyse aus Sauerstoff Ozon zu erzeugen. Dieses kann durch photounterstützte Oxidation mit organischen Molekülen zu flüchtigen Substanzen reagieren, während parallel ein reines Siliziumdioxid gebildet wird, das die Oberfläche vor weiterer Kontamination schützt. Eine detaillierte Beschreibung der Prozesse bei der UV/Ozon-Reinigung findet sich in [169, 166, 167].

Der am MBE etablierte Reinigungsprozess mit Oxidterminierung ist in Tabelle 5.1 aufgelistet. Am Ende des Reinigungsvorgangs steht die Erzeugung einer schützenden SiO_2 -Schicht durch eine abschließende UV/Ozon-Behandlung [130]. Dieses Oxid wird nach dem Transfer des Wafers ins UHV durch 60-minütiges Heizen bei 750°C thermisch desorbiert, wobei die

oxidterminiert	HF-last
2 <i>min</i> Spülen mit DI H ₂ O und Trockenschleudern in N ₂	2 <i>min</i> Spülen mit DI H ₂ O und Trockenschleudern in N ₂
10 <i>min</i> UV/Ozon Behandlung	10 <i>min</i> UV/Ozon Behandlung
20 <i>s</i> HF-Dip	20 <i>s</i> HF-Dip
< 1 <i>min</i> Spülen DI H ₂ O und Trockenschleudern in N ₂	20 <i>min</i> Spülen DI H ₂ O
2 <i>min</i> UV/Ozon Behandlung	Transfer ins UHV
Transfer ins UHV	

Tab. 5.1: Reinigungsverfahren für Siliziumsubstrate

Sauberkeit der Substratoberfläche durch Beobachten der Rekonstruktion mittels RHEED verifiziert wird. Dabei muss die Temperatur langsam erhöht werden, um zu gewährleisten, dass der Druck unterhalb von 1×10^{-9} *mbar* bleibt und so eine Kontamination der Substratoberfläche verhindert wird. Der gesamte Temperprozess dauert daher etwa 2,5 Stunden.

Die Reinigung mittels UV/Ozon mit abschließendem Schutzoxid hatte sich bereits für die Herstellung von bauelementtauglichen Schichten bewährt [130, 170]. Diese wiesen aber immer noch recht hohe Dichten von Stapelfehlern und Linienversetzungen auf, welche die elektrischen Eigenschaften negativ beeinflussen [170]. Daher wurde ein alternatives Verfahren untersucht, das mit einer wasserstoffterminierten Oberfläche (HF-last) abschließt. Allerdings bleibt die Wasserstoffpassivierung in Umgebungsluft nur kurze Zeit stabil, weshalb die Transferzeit ins Vakuum minimiert werden muss. Auch hier ist wieder eine thermische Behandlung zur Desorption des Wasserstoffs nötig. Dieses gelingt aber bei deutlich niedrigeren Temperaturen (< 600 °C) und in kürzerer Zeit, so dass der gesamte Temperprozess auf etwa 1 Stunde verringert werden konnte.

In Tabelle 5.1 sind beide Reinigungsvarianten gegenübergestellt. Um zu bewerten, welche Methode besser zur Substratvorbehandlung geeignet ist, wurden jeweils die Stapelfehler- und Linienversetzungsdichten in $1 \mu\text{m}$ dicken Si-Epitaxieschichten auf Si(111)-Substraten mittels Auszählen von Ätzmalen im Rasterelektronenmikroskop bestimmt¹.

Mit der oxidterminierten Reinigung konnten Defektdichten von $1 \times 10^7 \text{ cm}^{-2}$ realisiert werden, während mit der HF-last Reinigung Defektdichten unterhalb von $1 \times 10^5 \text{ cm}^{-2}$ erreicht wurden. Daher wurde letztere als Standardreinigung etabliert, was zur weitgehenden Eliminierung der Stapelfehlerproblematik führte.

Ein weiterer Präparationsschritt ist das Tempern im UHV unter Si-Fluss [171, 172, 173]. Hierbei wird bei einer Temperatur von 680 °C für etwa 2 Minuten Silizium mit einer Rate

¹Die Details des Verfahrens zur Bestimmung der Defektdichten sind in [170] ausführlich beschrieben.

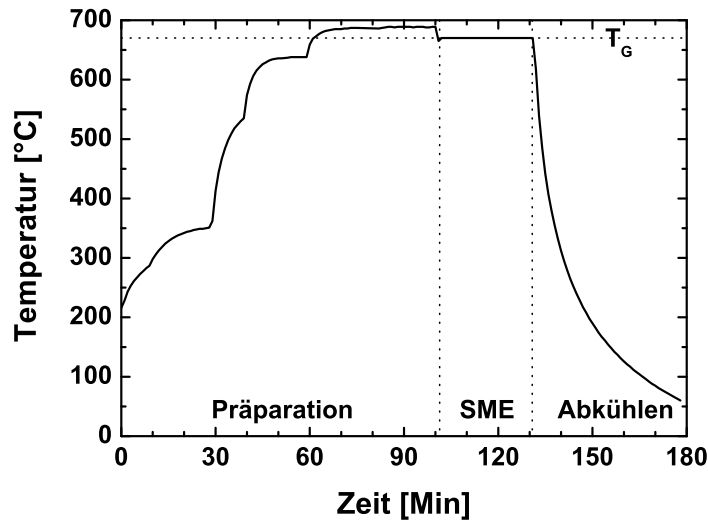


Abb. 5.5: Temperaturverlauf eines typischen Wachstumsprozesses bei der SME von Germanium auf Silizium: Dargestellt ist die mit dem Pyrometer gemessene Temperatur. Zunächst erfolgt das schrittweise Heizen zur Präparation des Substrates, wobei im letzten Schritt das Siliziumangebot erfolgt. Nach der RHEED-Kontrolle und dem Öffnen des Sb-Shutters wird der Wafer auf die Wachstumstemperatur gebracht und die eigentliche SME bei einer typischen Germaniumrate von $0,2 \frac{nm}{s}$ bis zur gewünschten Schichtdicke (hier: $360nm$) durchgeführt. Nach dem Wachstum erfolgt eine erneute RHEED-Kontrolle, ehe der Sb-Shutter geschlossen und der Wafer abgekühlt wird.

von $0,01 \frac{nm}{s}$ angeboten. Die Si-Atome können mit an der Waferoberfläche gebundenen Sauerstoffatomen reagieren und flüchtiges SiO bilden. Auf diese Weise wird eine klare Oberflächenrekonstruktion schon bei geringeren Substrattemperaturen erreicht.

5.4 Ein typischer Wachstumsprozess

Abbildung 5.5 zeigt einen typischen Wachstumsprozess bei der SME von Germanium auf Silizium anhand der mit dem Pyrometer gemessenen Temperaturkurve. Zunächst erfolgt das schrittweise Heizen zur Präparation des Substrates, wobei im letzten Schritt das Siliziumangebot erfolgt. Nach der RHEED-Kontrolle und dem Öffnen des Sb-Shutters wird der Wafer auf die Wachstumstemperatur gebracht und die eigentliche SME bei einer typischen Germaniumrate von $0,2 \frac{nm}{s}$ bis zur gewünschten Schichtdicke durchgeführt. Nach dem Wachstum erfolgt eine erneute RHEED-Kontrolle, ehe der Sb-Shutter geschlossen und der Wafer abgekühlt wird.

6 SME von Ge auf Si(111)

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse zur SME von Germanium auf (111)-orientierten Siliziumsubstraten vorgestellt. Diese Arbeit liefert neue Ergebnisse zur Struktur des Versetzungsnetzwerks an der Grenzfläche¹. Darüber hinaus wurde erstmals die Restverzerrung von Ge-Filmen mit Schichtdicken $> 20 \text{ nm}$ untersucht².

6.1 Strukturelle Eigenschaften von Germaniumschichten auf Si(111)

Im Vorfeld dieser Arbeit war bereits einiges über das Wachstum von Germanium auf Si(111) mit Hilfe von Sb als Surfactant bekannt. Einerseits war das Wachstum der ersten Lagen studiert worden [119, 130, 132, 131], andererseits hatte man durch das Wachstum bei hohen Temperaturen oberhalb von $650 \text{ }^\circ\text{C}$ die ersten Ge p-Kanal MOSFETs auf Silizium herstellen können [141, 176, 177, 142, 143]. Einige Punkte blieben allerdings noch ungeklärt: Die Frage nach der Struktur des Versetzungsnetzwerks an der Grenzfläche und der Aspekt der Restverspannung in den Schichten. Diesen Problemfeldern wendet sich dieser Abschnitt zu.

Zunächst soll jedoch auf die allgemeinen strukturellen Eigenschaften von Ge-Schichten, die mit SME auf Si(111) gewachsenen wurden, eingegangen werden. Abb. 6.1 zeigt einen $\omega/2\theta$ -Scan der symmetrischen (333)-Reflexe einer $1 \mu\text{m}$ dicken Ge Schicht auf einem Si(111)-Substrat. Die senkrechte Linie markiert die für vollständige Relaxation des Germaniumfilms erwartete Winkeldifferenz zwischen den (333)-Reflexen des Germaniums und des Substrates. Liegt der Schichtreflex links von der Linie, also bei einer größeren vertikalen Gitterkonstante, steht der Film unter Druckspannung. Eine kleinere Winkeldifferenz weist auf Zugspannung hin. Aus der Messung ergibt sich, dass das Germaniumgitter vollständig relaxiert ist. An Stelle einer eventuell noch von der Gitterfehlpassung herrührenden Druckspannung findet man eine kleine Zugspannung. Diese resultiert aus den unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Germanium und Silizium, die dazu führen, dass sich der Film beim Abkühlen stärker zusammenzieht als das Substrat. Eine ausführliche Untersuchung dieses Sachverhaltes folgt in Abschnitt 6.3. Die schmale Peak-Breite des Ge-Reflexes

¹Ein Teil dieser Ergebnisse wurde bereits in [174] veröffentlicht.

²Ein Teil dieser Ergebnisse wurde bereits in [175] veröffentlicht.

spricht für eine hohe kristalline Perfektion der Schicht. Dieser Eindruck wird durch TEM-Untersuchungen an Querschnittspräparaten bestätigt. In der Hellfeld-Aufnahme in Abb. 6.2 sind keine Kristalldefekte in der Germaniumschicht zu sehen. Einzig in der Nähe der Grenzfläche sind Verzerrungsfelder von Versetzungen als dunkle Kontraste erkennbar. Die Tatsache, dass diese TEM-Aufnahme frei von den Film durchstoßenden Defekten ist, bedeutet allerdings nicht, dass die Schicht wirklich defektfrei ist. Untersuchungen an anisotrop geätzten Proben ergaben Defektdichten unterhalb von $2 \times 10^7 \text{ cm}^{-2}$.

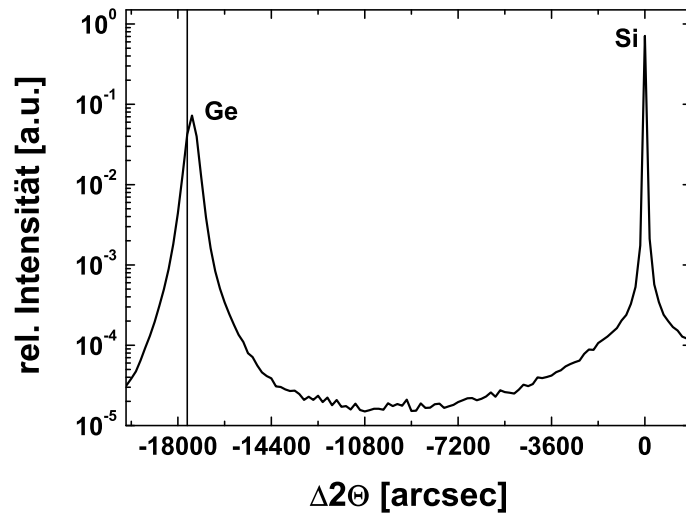


Abb. 6.1: Hochaufgelöster $\omega/2\theta$ XRD-Scan der (333)-Reflexe einer $1 \mu\text{m}$ dicken Germaniumschicht auf einem Si(111)-Substrat: Die aus der Winkeldifferenz der beiden Reflexe abgeleitete vertikale Gitterkonstante des Films entspricht der von Bulk-Germanium (senkrechte Linie). Die schmale Peak-Breite spricht für eine hohe kristalline Perfektion der Schicht.

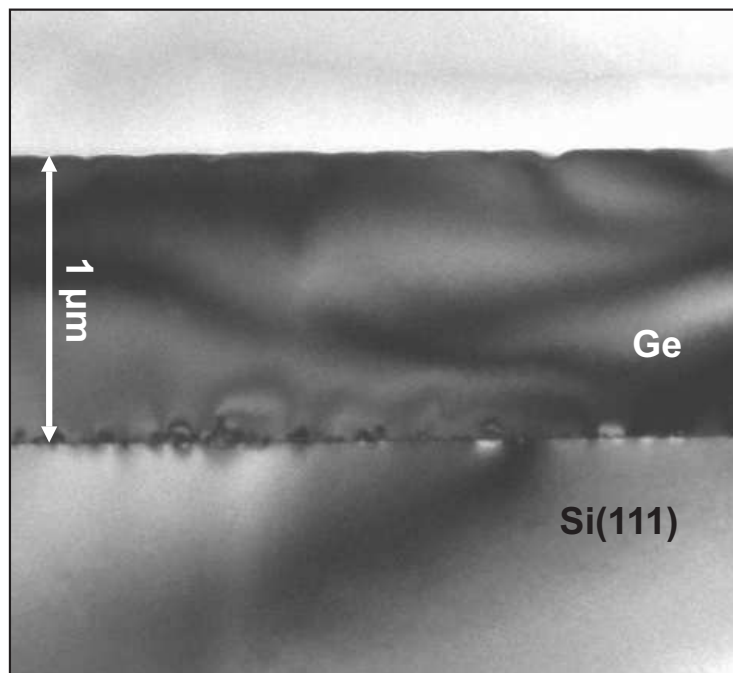


Abb. 6.2: TEM-Querschnitt einer $1 \mu\text{m}$ Germaniumschicht auf Si(111) im Hellfeld: Man erkennt keine den Film durchstoßenden Defekte. Die dunklen Kontraste in der Nähe der Grenzfläche stammen von Spannungsfeldern der Versetzungen des in der Grenzfläche liegenden Netzwerkes.

6.2 Das Versetzungsnetzwerk an der Grenzfläche zum Si(111)-Substrat

Bei der Ge/Si-Heteroepitaxie kompensieren Versetzungen die Gitterfehlpassung zwischen Schicht und Substrat. Diese Versetzungen bilden ein Netzwerk in der Grenzfläche, das im Idealfall regelmäßig angeordnet ist. Ideale Bedingungen liegen vor, wenn die Versetzungen in ausreichender Dichte vorliegen, so dass sie aufgrund der sie umgebenden Verzerrungsfelder untereinander wechselwirken können. Um eine gleichmäßige Anordnung einzunehmen, ist es darüber hinaus erforderlich, dass sich die Versetzungen in der Grenzfläche bewegen können. Im Falle der Ge/Si-Heteroepitaxie ist die erste Voraussetzung durch die hohe Gitterfehlpassung erfüllt. Die zweite Bedingung ist erfüllt, wenn die Grenzfläche eine Gleitebene für die Versetzungen darstellt. Im Folgenden wird eine Modellvorstellung für die zu erwartende Struktur des Versetzungsnetzwerks an der Ge/Si(111)-Grenzfläche basierend auf geometrischen Überlegungen entwickelt und mit experimentell gefundenen Netzwerken verglichen.

6.2.1 Ein geometrisches Modell

Ernst hat ein Modell für das Versetzungsnetzwerk an der Grenzfläche epitaktischer $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Schichten auf Si(111) Substraten vorgeschlagen [178, 179], das auf der 0-Gitter-Theorie nach Bollmann [180] basiert. Betrachtet man je eine Doppellage des Silizium- und des Germaniumgitters in [111]-Projektion, so ergibt sich eine hexagonale Anordnung der Atome, wie in Abb. 6.3a und 6.3b mit übertriebener Gitterfehlpassung gezeigt ist. Legt man die beiden Kristallgitter übereinander, ergibt sich ein hexagonales Muster von Punkten bester Übereinstimmung, das so genannte Koinzidenz- oder 0-Gitter (s. Abb. 6.3c). Der Abstand der Koinzidenzpunkte ist $L = \frac{1}{f} \frac{a_{\text{Ge}}}{\sqrt{2}}$.

An den Grenzen zwischen zwei Zellen des Koinzidenzgitters liegen die Orte höchster Gitterfehlpassung, daher kann man erwarten, dass sich dort Versetzungen bilden, die die Gitterfehlpassung ausgleichen. Es entsteht ein hexagonales Netzwerk von Stufenversetzungen mit $\langle \bar{1}12 \rangle$ Linienrichtung und Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2} \langle \bar{1}10 \rangle$ (s. Abb. 6.4). Der Abstand zweier paralleler Versetzungssegmente ist gleich der Koinzidenzlänge $L = \frac{b}{f}$.

Während an den Koinzidenzpunkten die normale Stapelfolge der (111)-Doppellagen des Diamantgitters $\dots abcabcABCABC\dots$ erhalten bleibt, ist sie an den Knotenpunkten des Netzwerkes gestört. Es liegen zwei unterschiedliche Konfigurationen vor: Die einen Knotenpunkte haben die Stapelfolge $\dots abcabcBCABCA\dots$, markiert durch grau schattierte Kreise in Abb. 6.4. Hier handelt es sich um so genannte intrinsische Stapelfehler des Diamantgitters. An den anderen Knotenpunkten, die durch grau schattierte Quadrate gekennzeichnet sind, ist die Folge $\dots abcabcCABCAB\dots$. Es liegen zwei (111)-Doppellagen direkt übereinander, was aus

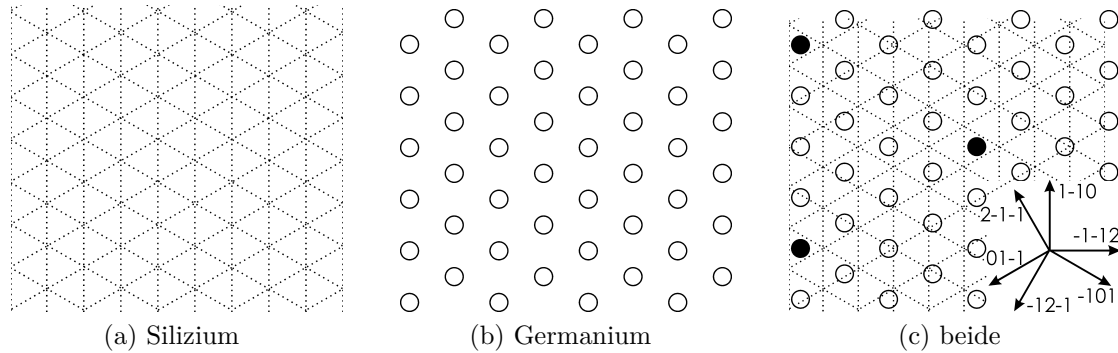


Abb. 6.3: Konstruktion des Koinzidenzgitters in der (111)-Grenzfläche: Das Germaniumgitter (Kreise) weist gegenüber dem Siliziumgitter (Linien) eine übertriebene Gitterfehlpassung $f = 0,25$ auf. Die Koinzidenzpunkte (schwarz) bilden ein hexagonales Muster mit einer Seitenlänge $L = \frac{1}{f} \frac{a_{Ge}}{\sqrt{2}}$.

energetischen Gründen verboten ist, da die vierfach Koordination der Bindungen erhalten bleiben muss. In Anlehnung an Ernst [178] werden im Folgenden die ersten Knotenpunkte als I-Knoten und die letztgenannten als F-Knoten bezeichnet.

6.2.2 Die Gleichgewichtskonfiguration

Die bisherigen Überlegungen beruhen alleine auf den geometrischen Eigenschaften der Ge/Si(111)-Grenzfläche. Um die Gleichgewichtsstruktur des Versetzungsnetzwerkes zu finden, muss zusätzlich in Betracht gezogen werden, dass das System einen Zustand niedrigster Energie anstreben wird. Die energetisch günstigste Lage für Stufenversetzungen im Diamantgitter ist entlang der $\langle 110 \rangle$ -Richtungen, also entlang der Minima des Peierlspotenzials (s. Abschnitt 2.1). Die Versetzungen aus dem geometrischen Modell mit $\langle 112 \rangle$ -Linienrichtungen liegen genau senkrecht zu den Peierlstälern in der (111)-Ebene und repräsentieren also nicht den Zustand niedrigster Energie.

Ein Mechanismus zur Energieminimierung liegt in der Aufspaltung von Versetzungen. Danach ist zu erwarten, dass die vollständigen Stufenversetzungen des geometrischen Modells an den Knotenpunkten in Segmente partieller Stufenversetzungen mit Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{6} \langle \bar{1}12 \rangle$ und $\langle 110 \rangle$ -Linienrichtung aufspalten. Ernst [178, 179] beschreibt Aufspaltungsmechanismen für die I- bzw. F-Knoten unter Bildung eines intrinsischen bzw. extrinsischen Stapelfehlers parallel zur (111)-Ebene. Der wesentliche Unterschied zwischen den beiden Prozessen liegt darin, dass im Falle der I-Knoten nur Versetzungsgleiten nötig ist, wohingegen im Falle der F-Knoten auch Kletterprozesse erforderlich sind, die höhere Aktivierungsenergien haben [179]. Die Anordnung der den Stapelfehler begrenzenden Partialversetzungssegmente

lässt sich mit Hilfe des Thompson-tetraeders [181] ableiten und ist in Abb. 6.5 am Beispiel eines I-Knotens dargestellt.

Der dissoziierte Knoten erreicht seine stabile Ausdehnung R_{int} , wenn die Stapelfehlerenergie γ_{SF} (pro Einheitsfläche) mit der Linienenergie der ihn begrenzenden Versetzungen im Gleichgewicht ist. Aus dieser Gleichgewichtsbedingung kann man für die in Abb.6.5 skizzierte Geometrie die stabile Ausdehnung R_{int} des Stapelfehlers abschätzen [178]:

$$R_{int} = \frac{E_L}{\gamma_{SF}} = \frac{G}{4\pi\gamma_{SF}(1-\nu)} \ln\left(\frac{\alpha \text{Min}(h, D/2)}{b_p}\right) b^2 \quad (6.1)$$

Für Germanium ist $G = 5,51 \times 10^{10} \text{ Pa}$ und $\nu = 0,25$ [86]. Weil die Schichtdicke des Germaniumfilms größer ist als der Abstand der Koinzidenzpunkte, kann man für $\text{Min}(h, \frac{D}{2})$ den halben Versetzungsabstand, also $\frac{L}{2}$, annehmen. Für $\alpha = 2,6 - 4$ [182, 183] variiert die Linienenergie E_L von $1,51 - 1,68 \frac{\text{J}}{\text{m}}$. Setzt man für γ_{SF} die Energie eines intrinsischen Stapelfehlers in Germanium von $60 \frac{\text{mJ}}{\text{m}^2}$ [184, 185] ein, ergibt sich eine stabile Ausdehnung von:

$$R_{int} = 21 - 23 \text{ nm} \quad (6.2)$$

Die Energie eines extrinsischen Stapelfehlers in Germanium entspricht in etwa der eines intrinsischen Stapelfehlers [185]. Daher sollten beide Knotentypen gleich weit ausgedehnt sein, sofern die Aktivierungsenergie zur Bildung extrinsischer Stapelfehler erreicht wird. Da der Wert von R_{int} größer ist als der Versetzungsabstand $D = L$, kann man erwarten, dass die dissoziierten Knoten eine maximale Ausdehnung erreichen.

Die Gleichgewichtskonfiguration ist also ein Versetzungsnetzwerk aus 90° -Partialversetzungen. Zwei denkbare Varianten [178] sind in Abb. 6.6 dargestellt. Die erste (Abb. 6.6a) entsteht, wenn nur die I-Knoten aufspalten. Es ergibt sich ein trigonales Netzwerk aus 90° -Partialversetzungen mit Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{6}\langle\bar{1}12\rangle$ und $\langle 110\rangle$ -Linienrichtung. Grau unterlegte Bereiche kennzeichnen intrinsische Stapelfehler infolge der Ausdehnung von I-Knoten. Nimmt man an, dass auch die F-Knoten dissoziieren, gelangt man über eine weitere Versetzungsreaktion, die dort auftritt, wo die Ecken zweier dreieckig ausgedehnter I- bzw. F-Knoten aufeinanderstoßen, zu einer hexagonalen Konfiguration, wie sie in Abb. 6.6b dargestellt ist. In diesem Fall treten parallel zur Grenzfläche liegende intrinsische (grau hinterlegt) und extrinsische Stapelfehler (schraffiert) auf. Der Abstand D paralleler Versetzungssegmente beträgt in beiden Konfigurationen $D = \frac{1}{f} \frac{a_{Ge}}{\sqrt{2}} \frac{\sqrt{3}}{2}$. Sie sind gleichermaßen effektiv für die Relaxation, da sie bezogen auf die Fläche die gleiche Versetzungslänge aufweisen. In Abb. 6.7 ist der Gleichgewichtsabstand D in Abhängigkeit von der Gitterfehlpassung f und dem Relaxationsgrad R bei Raumtemperatur dargestellt (durchgezogene Linie). Die gestrichelte Linie zeigt den gleichen Zusammenhang bei 680°C . Die Abweichung

durch die thermische Ausdehnung des Gitters ist kleiner als $0,1 \text{ nm}$ und wird daher in der weiteren Betrachtung des Versetzungsabstandes vernachlässigt.

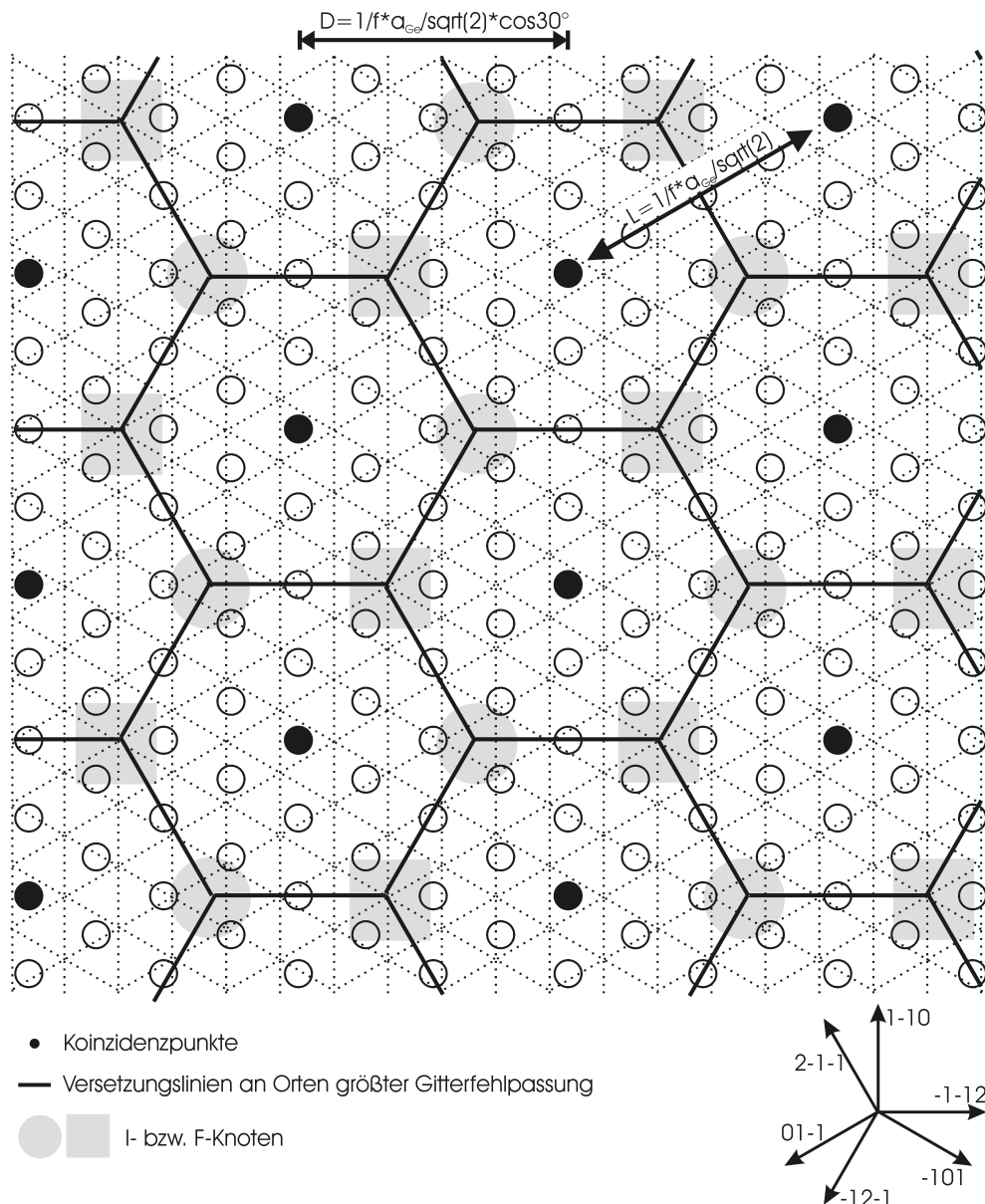


Abb. 6.4: Koinzidenznetzwerk in der (111)-Grenzfläche: An den Grenzen zwischen zwei Zellen des Koinzidenzgitters liegen die Orte höchster Gitterfehlpassung, daher kann man erwarten, dass sich dort Versetzungen bilden, die die Gitterfehlpassung ausgleichen. Es entsteht ein hexagonales Netzwerk von Stufenversetzungen mit $\langle \bar{1}12 \rangle$ Linienrichtung und Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2} \langle \bar{1}10 \rangle$. Der Abstand zweier paralleler Versetzungssegmente ist gleich der Koinzidenzlänge $L = \frac{b}{f}$. An den Knotenpunkten des Netzwerkes ist die Stapelfolge des Diamantgitters gestört. Die einen Knotenpunkte haben die Stapelfolge $\dots abcabcBCABCA\dots$ (grau schattierte Kreise). Hier handelt es sich um so genannte intrinsische Stapelfehler. An den anderen Knotenpunkten ist die Folge $\dots abcabcCAB CAB\dots$ (grau schattierte Quadrate). Es liegen zwei (111)-Doppellagen direkt übereinander, was aus energetischen Gründen verboten ist, da die vierfach Koordination der Bindungen erhalten bleiben muss. Die ersten Knotenpunkte werden als I-Knoten und die letztgenannten als F-Knoten bezeichnet.

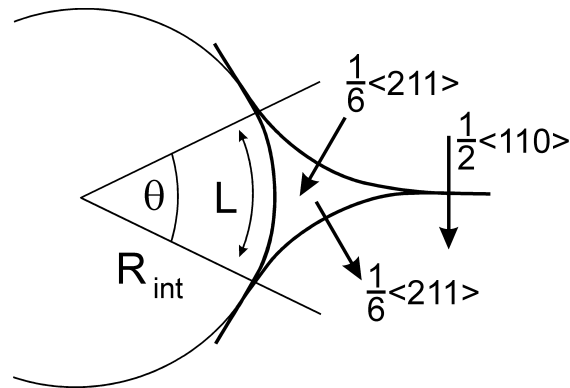
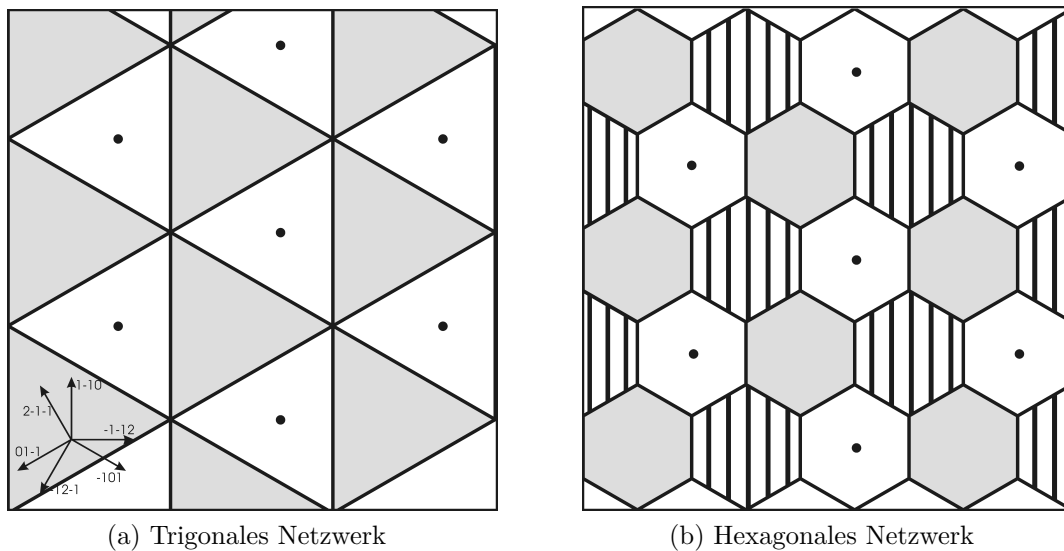


Abb. 6.5: Dissoziation eines I-Knotens: An einem Zweig sind beispielhaft die Burgersvektoren der beteiligten Versetzungen angegeben. Wenn alle drei vollständigen Versetzungen aufspalten, entsteht ein dreieckiger intrinsischer Stapelfehler, der durch Partialversetzungssegmente begrenzt ist. Die Ausdehnung des Stapelfehlers wird durch den Parameter R_{int} charakterisiert, der Winkel θ beträgt 60° .



(a) Trigonales Netzwerk

(b) Hexagonales Netzwerk

Abb. 6.6: Schematische Darstellung zweier möglicher Gleichgewichtskonfigurationen für das Versetzungsnetzwerk an der Grenzfläche von Germanium zu Si(111): Abb. 6.6a zeigt eine trigonale, Abb. 6.6b eine hexagonale Anordnung von 90° -Partialversetzungen mit $\vec{l} = \langle 110 \rangle$ Linienrichtungen und in der Grenzfläche liegendem Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{6} \langle 112 \rangle$. Die grau unterlegten Bereiche kennzeichnen intrinsische Stapelfehler, die schraffierten extrinsische. Der Abstand D paralleler Versetzungssegmente beträgt in beiden Konfigurationen $D = \frac{1}{f} \frac{a_{Ge}}{\sqrt{2}} \frac{\sqrt{3}}{2}$.

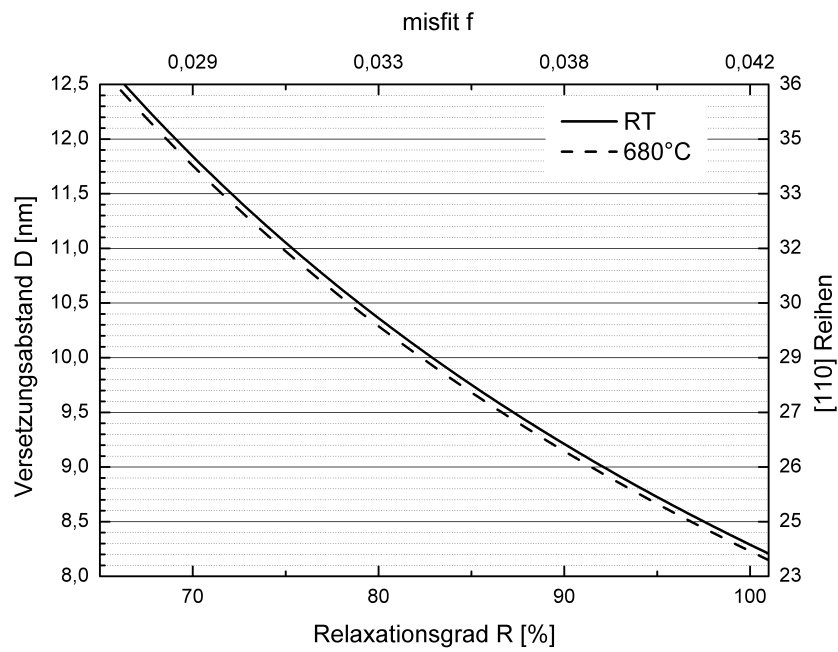


Abb. 6.7: Gleichgewichtsabstand der Versetzungen in Abhängigkeit vom Relaxationsgrad der Germaniumschicht.

6.2.3 Experimentelle Ergebnisse

In der Literatur finden sich bereits einige Untersuchungen zur Struktur von Versetzungsnetzwerken an der Grenzfläche zwischen Germaniumfilmen, die mit SME hergestellt wurden, und Si(111)-Substraten. Diese Ergebnisse werden im Folgenden kurz dargestellt.

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, sich dem Problem experimentell zu nähern. Ein Verfahren besteht darin, die Struktur des Netzwerkes indirekt über die durch die Spannungsfelder der Versetzungen hervorgerufenen Verzerrungen der Schichtoberfläche nachzuweisen. In diesem Fall ist man auf Schichtdicken unterhalb von 10 nm beschränkt, da für dickere Schichten die Verzerrungseffekte an der Filmoberfläche zu schwach werden. Als Messmethoden wurden die die Oberfläche direkt abbildende Rastertunnelmikroskopie [186, 187] und die indirekte Abbildung der Oberfläche über die Beugung niederenergetischer Elektronen (SPA-LEED) eingesetzt [129, 188].

Eine Möglichkeit, die es erlaubt, auch Versetzungsnetzwerke in dickeren Schichten zu untersuchen, bietet die Transmissionselektronenmikroskopie unter weak-beam Bedingungen [139].

Quelle	Methode	Schichtdicke [Å]	Versetzung	Netzwerktyp	Abstand [Å]
[187]	STM	27-45	90°Partial	trigonal	100
[186]	STM	18	90°Partial	trigonal	95-120
[129, 188]	SPA-LEED	50	60°Versetzung	trigonal	104
[139]	TEM	75	90°Partial	trigonal?	81

Tab. 6.1: Experimentelle Ergebnisse zur Struktur von Versetzungsnetzwerken

Tabelle 6.1 gibt einen Überblick über die bisher an mit SME hergestellten Germaniumschichten gewonnenen Ergebnisse. Im Gegensatz zu mit konventioneller MBE [187] oder Flüssigphasenepitaxie [178] hergestellten Schichten, bei denen Versetzungsnetzwerke mit trigonaler und hexagonaler Struktur nebeneinander auftreten, wurden bei der SME nur Netzwerke mit trigonaler Struktur gefunden, wobei die Scharen paralleler Versetzungen auch gegeneinander verschoben sein können, so dass eine Struktur mit ausgedehnten Knoten entsteht. Der Versatz wird mit $0,3D$ [187] bzw. $0,18D$ [129, 188] angegeben. Uneinigkeit herrscht bezüglich der Art der Versetzungen. Während in [139], [186] und [187] Partialversetzungen mit $\vec{l} = \langle 110 \rangle$ Linienrichtungen und in der Grenzfläche liegendem Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{6} \langle 112 \rangle$ gefunden wurden, berichtet [129] von ganzen Versetzungen mit einem im 60°-Winkel zur Linienrichtung liegenden Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2} \langle 10\bar{1} \rangle$.

In Abbildung 6.8a ist eine mögliche Konfiguration des Netzwerkes nach [129] dargestellt. Es besteht aus Versetzungen mit einem im 60°-Winkel zur Linienrichtung liegenden Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2} \langle 10\bar{1} \rangle$. Der Versetzungsabstand von 10,4 nm beträgt nur 87% des für ein solches Netzwerk bei vollständiger Relaxation erwarteten Wertes. Allerdings weist die Struktur

ausgedehnte Versetzungsknoten auf, die ebenfalls zur Kompensation der Gitterfehlpassung beitragen können. Eine weitere von Kammler vorgeschlagene Konfiguration zeigt Abb. 6.8b [189]. Eine endgültige Klärung der Struktur des bei der SME von Ge auf Si(111) entstehenden Versetzungsnetzwerkes steht noch aus.

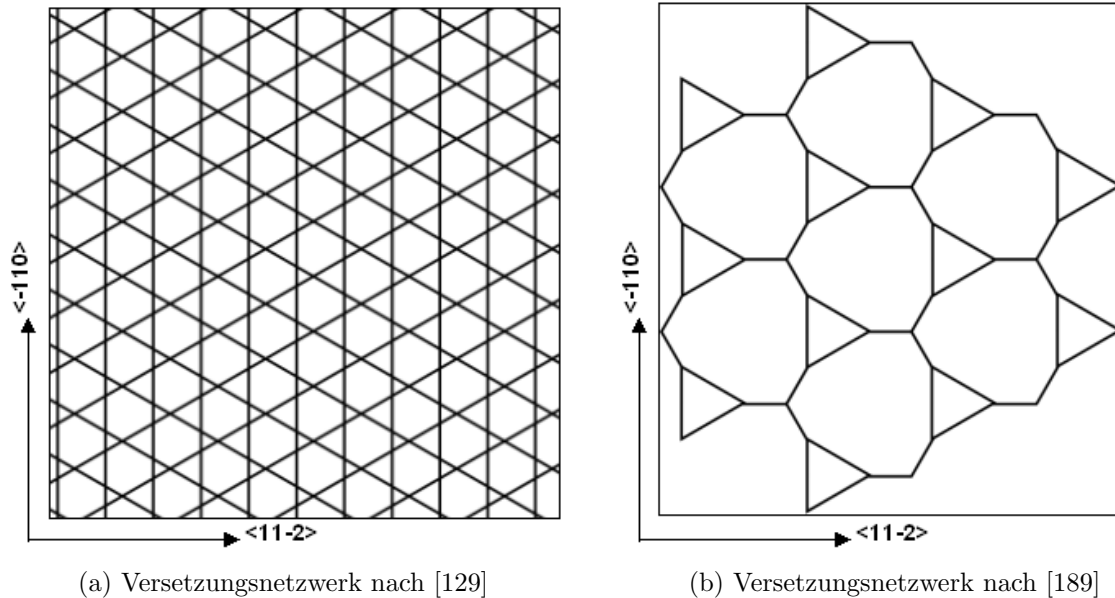


Abb. 6.8: Netzwerkmodelle für dünne Germaniumschichten auf Si(111) nach [129] und [189].

In dieser Arbeit wurde die Struktur des Versetzungsnetzwerkes anhand gekippter TEM-Aufnahmen von Querschnittspräparaten unter weak-beam Bedingungen an $1\ \mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten untersucht. Analoge TEM-Untersuchungen an dicken $\text{Ge}_{0,85}\text{Si}_{0,15}$ -Schichten, die mittels Flüssigphasenepitaxie hergestellt wurden, ergaben zwei Konfigurationen für Grenzflächenversetzungsnetzwerke [178], eine Trigonale und eine Hexagonale. Beide Netzwerke bestehen aus Versetzungen mit $\vec{l} = \langle 110 \rangle$ Linienrichtungen und in der Grenzfläche liegendem Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{6} \langle 112 \rangle$, wobei die hexagonale Struktur eine höhere Bildungsenergie aufweist. In Abb. 6.9 sind beide Konfigurationen schematisch dargestellt. Übertragen auf den Fall einer reinen Germaniumschicht auf Si und bei vollständiger Relaxation der Gitterfehlpassung, ergibt sich ein zu erwartender Versetzungsabstand von $7,96\ \text{nm}$ für die trigonale bzw. $3,98\ \text{nm}$ für die hexagonale Struktur.

Das Resultat der Untersuchung einer $1\ \mu\text{m}$ dicken mittels SME gewachsenen Germaniumschicht ist in Abb. 6.10 gezeigt. Man erkennt in der Projektion der Grenzfläche eine regelmäßige Abfolge heller Kontraste in $[1\bar{1}0]$ -Richtung. Sie repräsentieren eine Schar der Versetzungen, die das Netzwerk bilden. Die Übrigen liefern aufgrund des $\vec{g} \cdot \vec{b}$ -Kriteriums nur sehr schwache Kontraste. Wegen der Verkippung von 15° um die $[11\bar{2}]$ -Achse erscheint

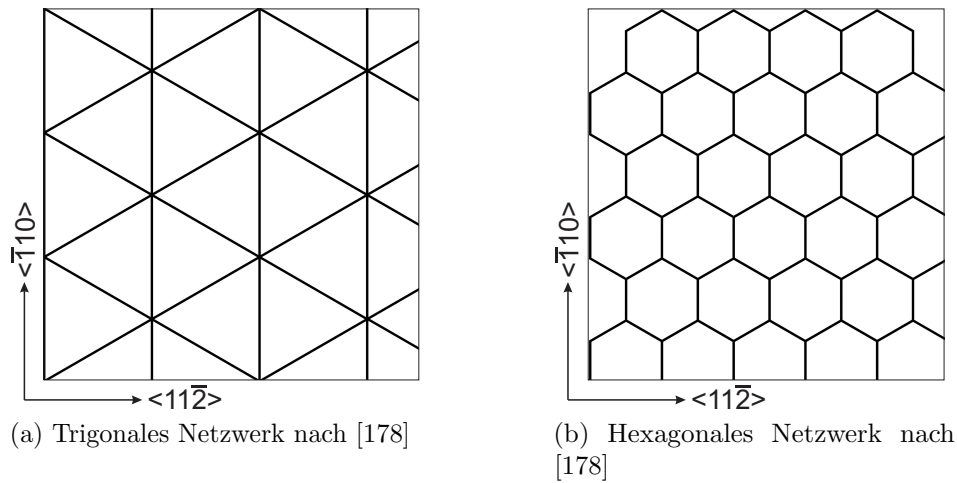


Abb. 6.9: Die Abbildung zeigt schematisch zwei mögliche Konfigurationen für das Versetzungsnetzwerk an der Grenzfläche von Germanium zu Si(111). Abb. 6.9a zeigt eine trigonale, Abb. 6.9b eine hexagonale Anordnung von Versetzungen mit $\vec{l} = \langle 110 \rangle$ Linienrichtungen und in der Grenzfläche liegendem Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{6} \langle 11\bar{2} \rangle$. Der Abstand der Versetzungen in (a) beträgt $7,96 \text{ nm}$, der in (b) $3,98 \text{ nm}$.

das Netzwerk um den Faktor $\sin(15^\circ)$ gestaucht. Der mittlere Abstand der Versetzungen beträgt $8,0 \text{ nm}$. Der Vergleich mit Abb. 6.9 ergibt, dass es sich um ein trigonales Netzwerk mit $\vec{l} = \langle \bar{1}10 \rangle$ und $\vec{b} = \frac{a}{6} \langle 11\bar{2} \rangle$ handelt. Die hexagonale Variante wurde nicht beobachtet.

Der Unterschied zu den Beobachtungen an dünnen mit SME hergestellten Germaniumschichten deutet darauf hin, dass das Versetzungsnetzwerk bei Schichtdicken oberhalb von 20 ML noch eine Entwicklung durchläuft, bis schließlich die hier beschriebene trigonale Form erreicht wird. Diese These wird durch die Untersuchung der schichtdickenabhängigen Restverspannung gestützt, deren Ergebnisse im folgenden Abschnitt 6.3 dargestellt sind.

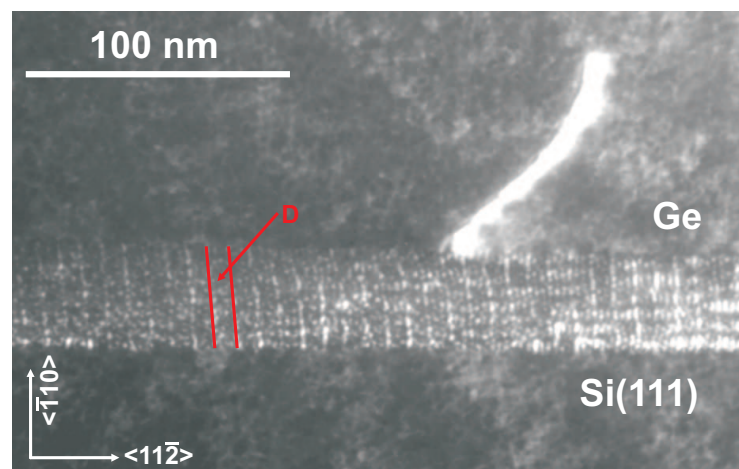


Abb. 6.10: Versetzungsnetzwerk auf Si(111): Die gekippte (15° um $[110]$) weak-beam XTEM-Aufnahme zeigt das Versetzungsnetzwerk mit $\vec{g} = \langle 220 \rangle$. Eine Schar von Versetzungen ist sichtbar, während die beiden um 60° gedrehten unter den gewählten Abbildungsbedingungen nur einen schwachen Kontrast liefern. Der Abstand der Versetzungen beträgt $8,0 \text{ nm}$.

6.3 Restverzerrung von Germaniumschichten auf Si(111)

In den ersten Veröffentlichungen über die SME von Ge auf Si(111) wurden die Schichten immer als vollständig relaxiert bezeichnet [140]. Später wurde allerdings eingeräumt, dass die “vollständig” relaxierten Ge-Filme noch eine kleine Restverzerrung aufweisen können [119]. Erst vor Kurzem wurde in genaueren Untersuchungen ermittelt, dass für Schichtdicken von 5–20 nm ein Relaxationsgrad von etwa 75-80% erreicht wird [131, 190]. Es wurde beobachtet, dass nach der ersten schlagartigen Relaxation in der mikro-rauen Phase ein Übergang zu allmählichem Spannungsabbau erfolgt [131, 132]. XRD-Messungen, die im Rahmen dieser Arbeit an 1 μm dicken Ge Schichten durchgeführt wurden, ergaben (s. Abb. 6.1), dass die Schichten nicht wie die in [131, 190] untersuchten dünnen Schichten eine kompressive Restspannung aufweisen, sondern vielmehr unter einer geringen Zugspannung stehen. Der Diskrepanz zwischen kompressiv verspannten dünnen Schichten und zugverspannten dickeren Filmen wird in diesem Abschnitt nachgegangen, indem die Ergebnisse einer detaillierten Analyse der Restverzerrung in Abhängigkeit von der Germaniumschichtdicke dargestellt und diskutiert werden.

Die Restverzerrung parallel zur Grenzfläche $\epsilon_{||}$ wurde mittels hoch aufgelöster reziproker Gitterkarten für Germaniumschichtdicken von 100 – 1000 nm gemessen. Abb. 6.11 zeigt beispielhaft die RSM der asymmetrischen (53 $\bar{1}$)- und (153)-Reflexe einer 1000 nm dicken Schicht. Die durchgezogenen Linien geben jeweils die Lage an, die der Reflex einer vollständig relaxierten Schicht hätte. Man erkennt, dass die untersuchte Ge-Schicht eine größere laterale und kleinere vertikale Gitterkonstante als vollständig relaxiertes Germanium aufweist. Die Schicht steht also unter Zugspannung. Diese tensile Restverzerrung ϵ_{resRT} ergibt sich aus der nach dem Wachstum bei der Wachstumstemperatur T_G aufgrund unvollständiger Kompensation der Gitterfehlpassung noch vorhandenen Restverzerrung ϵ_{resTG} und der während des Abkühlens durch die unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Silizium und Germanium induzierten Verzerrung ϵ_{th} (s. Abschnitt 2.6).

Da der thermisch induzierte Anteil der Restverzerrung als schichtdickenunabhängig angesehen werden kann, muss die unterschiedliche resultierende Restverzerrung durch eine Variation des auf Gitterfehlpassung beruhenden Verzerrungsanteils mit der Schichtdicke hervorgerufen werden. Cammarata *et al.* beschreiben ein Gleichgewichtsmodell für den sukzessiven Spannungsabbau in epitaktischen Schichten mit Gitterfehlpassung [191]. Im Film wird während des Wachstums immer so viel Spannung aufgebaut, wie zum Auslösen des nächsten Relaxationsschritts nötig ist, so dass ein allmählicher Spannungsausgleich erfolgt. Für den Fall einer glatten Schicht, die bereits weitgehend relaxiert ist ($\epsilon_{resTG} \ll \epsilon_{mf}$), ist der Zusammenhang zwischen elastischer Restverzerrung ϵ_{resTG} und Schichtdicke h mit

$$\epsilon_{resTG} = C \frac{b}{h} \quad (6.3)$$

gegeben. Dabei ist b die Länge des Burgersvektors der Versetzungen, die die Spannung

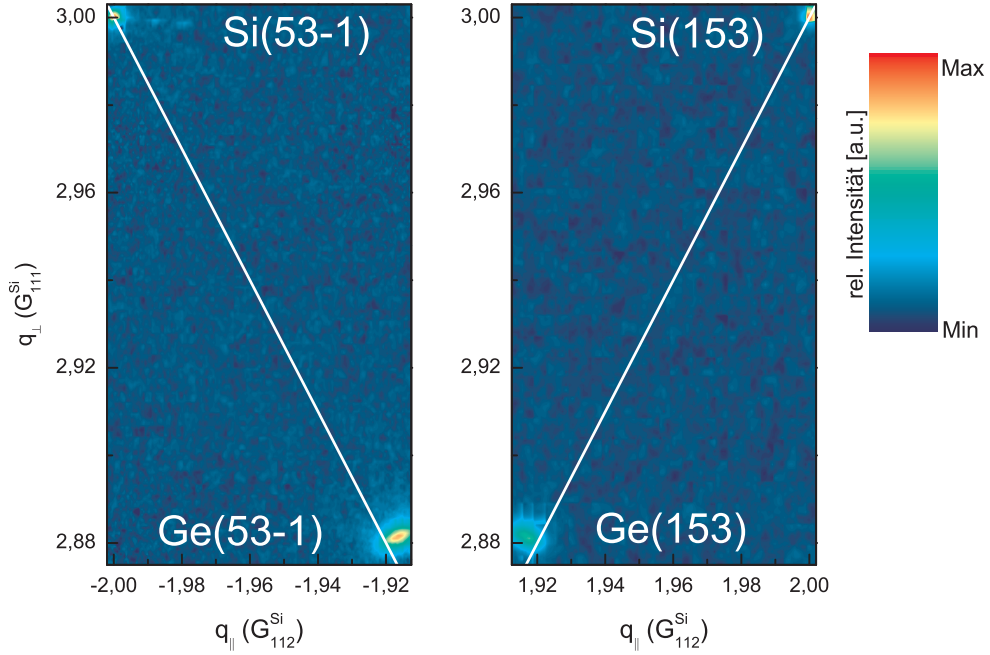


Abb. 6.11: RSM der asymmetrischen $(53\bar{1})$ - und (153) -Reflexe einer $1\ \mu\text{m}$ dicken Germaniumschicht auf Si(111): Die durchgezogenen Linien geben die Lage an, die Reflexe einer vollständig relaxierten Schicht hätten. Man erkennt, dass die untersuchte Germaniumschicht eine größere laterale und kleinere vertikale Gitterkonstante als vollständig relaxiertes Germanium aufweist. Die Schicht steht also unter Zugspannung.

kompensieren. Mit den Gleichungen 2.20 und 6.3 erhält man:

$$\epsilon_{resRT} = C \frac{b}{h} + \epsilon_{th} \quad (6.4)$$

In Abbildung 6.12 sind die aus den RSM extrahierten Werte für die Restverzerrung in der Ebene ϵ_{\parallel} in Abhängigkeit von der Schichtdicke zusammen mit einigen Literaturdaten für dünnere Schichten [131] dargestellt. Bei einer Schichtdicke von $100\ \text{nm}$ findet man wie auch bei dünneren Schichten [131] eine kompressive Restverzerrung, wohingegen für Filmdicken oberhalb von etwa $150\ \text{nm}$ eine zunehmende tensile Verzerrung auftritt. Die durchgezogene Linie markiert die optimale Fitkurve gemäß Gleichung 6.4. Die optimalen Fitparameter sind $C = 1$ und $\epsilon_{th} = -0,00154$. Der Wert für die Länge des Burgersvektors b wurde entsprechend der experimentell gefundenen 90° -Partialversetzungen zu $0,222\ \text{nm}$ gewählt. Für kleine Schichtdicken stimmt die Fitkurve recht gut mit dem experimentellen Wert für $20\ \text{nm}$ aus [131] überein. Damit könnte der Verlauf der elastischen Verzerrung zwischen 5 und $20\ \text{nm}$ Schichtdicke als Übergang vom abrupten zum allmählichen Spannungsabbau interpretiert werden. Das bestätigt die in Abschnitt 6.2.3 anhand der Resultate für die

Versetzungsstrukturen getroffene Vermutung, dass das Versetzungsnetzwerk nach [129] als ein Übergangsstadium betrachtet werden muss.

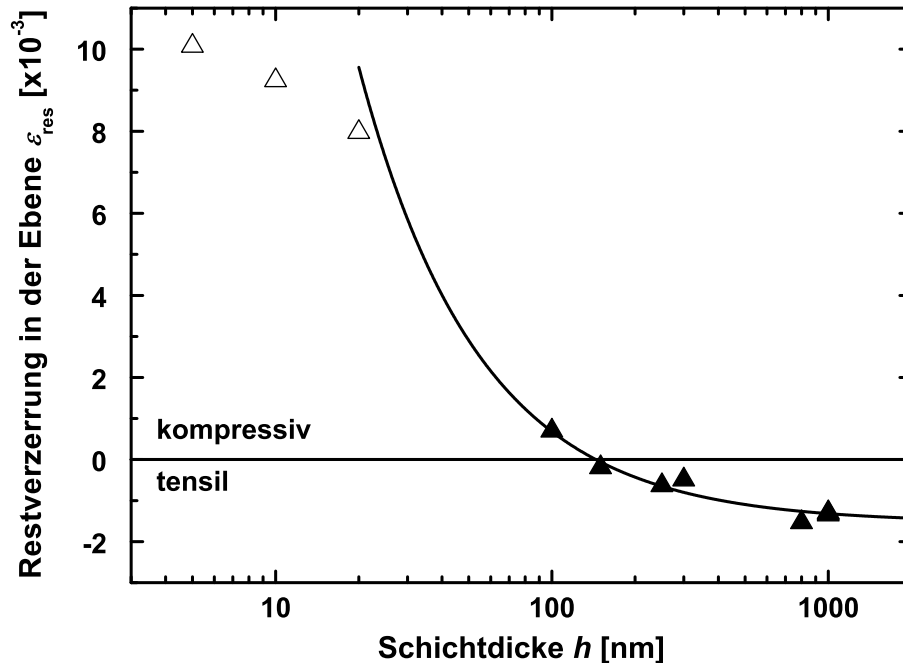


Abb. 6.12: Restverzerrung in Germanium auf Si(111): Dargestellt sind die aus den RSM extrahierten Werte in Abhängigkeit von der Schichtdicke zusammen mit einigen Literaturdaten für dünnere Schichten [131]. Bei einer Schichtdicke von 100 nm findet man eine kompressive Restverzerrung, wohingegen für Filmdicken oberhalb von etwa 150 nm eine zunehmende tensile Verzerrung auftritt. Die durchgezogene Linie markiert die optimale Fitkurve gemäß Gleichung 6.4 mit den Parametern $C = 1$ und $\epsilon_{th} = -0,00154$. Der Wert für die Länge des Burgersvektors b wurde entsprechend der experimentell gefundenen 90° -Partialversetzungen zu 0,222 nm gewählt. Für kleine Schichtdicken stimmt die Fitkurve recht gut mit dem experimentellen Wert für 20 nm aus [131] überein.

Der ermittelte Wert für die thermische Verzerrung von 0,154% ist deutlich geringer als der aus der Temperaturdifferenz zwischen Wachstumstemperatur und Raumtemperatur erwartete Wert von 0,205%. Das kann damit erklärt werden, dass der Germaniumfilm beim Abkühlen oberhalb des Spröd-Duktil-Übergangs bei T_{BDT} plastisch relaxiert. Ein ähnliches Verhalten wurde auch für 1,2 μm dicke $\text{Ge}_{0,9}\text{Si}_{0,1}$ -Schichten gefunden, die mit Flüssigphasenepitaxie bei 820 °C gewachsen wurden [149, 192]. Der Verlauf der elastischen Verzerrung des Germaniumfilms während des Abkühlens ist in Abbildung 6.13 dargestellt. Oberhalb des Spröd-Duktil-Übergangs kann der Film plastisch relaxieren, so dass die

elastische Verzerrung konstant bleibt. Unterhalb von T_{BDT} wird Spannung im Film aufgebaut. Ausgehend von dem beobachteten Wert der Verzerrung bei Raumtemperatur, ergibt sich für die Temperatur des Spröd-Duktil-Übergangs ein Wert von $T_{BDT} = 485^\circ\text{C}$, was gut mit Literaturwerten für kleine Verzerrungsraten übereinstimmt [106, 107].

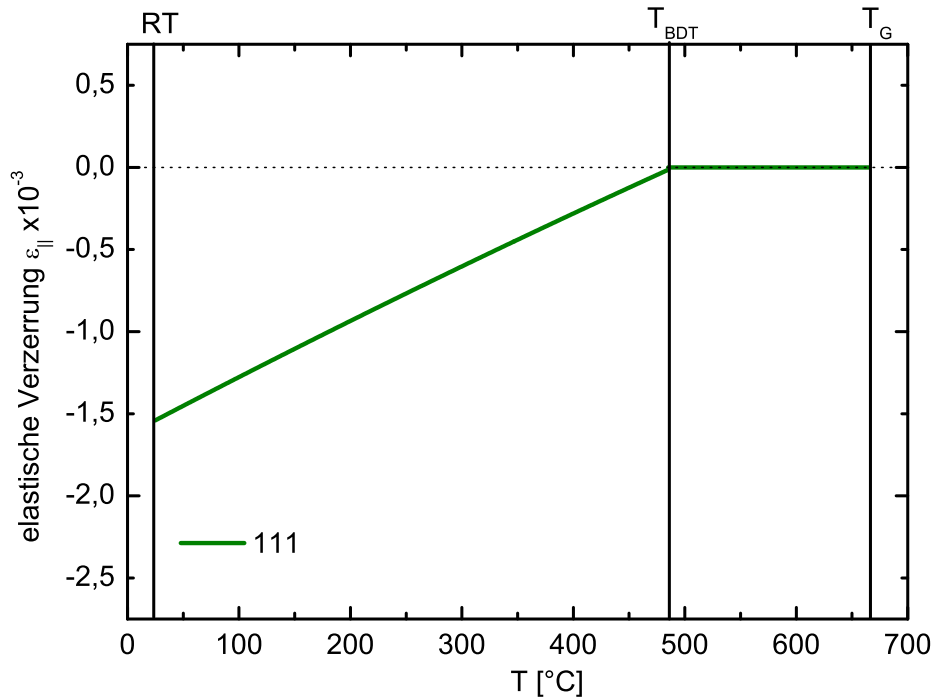


Abb. 6.13: Verlauf der Restverzerrung in Germanium auf Si(111) beim Abkühlen: Die Kurve wird von der Wachstumstemperatur T_G nach links durchlaufen. Zunächst kann der Film plastisch relaxieren, so dass die elastische Verzerrung konstant bleibt. Unterhalb des Spröd-Duktil-Übergangs bei T_{BDT} wird Spannung im Film aufgebaut. Ausgehend von dem beobachteten Wert der Verzerrung bei Raumtemperatur, ergibt sich für die Temperatur des Spröd-Duktil-Übergangs ein Wert von $T_{BDT} = 485^\circ\text{C}$.

7 SME von Ge auf Si(001)

Obwohl schon länger bekannt ist, dass die SME die Herstellung defektarmer, bauelementtauglicher Germaniumschichten auf Si(111) ermöglicht, galt es als unwahrscheinlich, dass dies auch auf Si(001) möglich sein würde [126]. Einerseits sprachen alle experimentellen Ergebnisse dagegen, andererseits schien die Wahl der Hauptgleitebene des Diamantgitters als Wachstumsebene unabdingbar für die Bildung eines regelmäßigen Versetzungsnetzwerkes an der Grenzfläche zu sein, ohne dass sich gleichzeitig eine hohe Dichte von den Film durchstoßenden Versetzungen einstellt. Im Rahmen dieser Arbeit wurden zum ersten Mal Bedingungen für das Wachstum relaxierter Germaniumschichten mit niedrigen Defektdichten in bauelementtauglicher Qualität auf (001)-orientierten Siliziumsubstraten gefunden.

In diesem Kapitel¹ werden zunächst die strukturellen Ergebnisse der mit SME hergestellten Germaniumschichten vorgestellt und mit denen von Schichten verglichen, die ohne Surfactant gewachsen wurden. Dabei wird insbesondere auf die an der Grenzfläche zum Substrat vorliegenden Versetzungen eingegangen. Anschließend wird der nur in einem engen Prozessfenster wirksame Relaxationsmechanismus erstmals beschrieben und diskutiert. Des Weiteren wird der Einbau des Surfactants während der SME untersucht. Insbesondere ist die Frage von Interesse, ob es gelingen könnte, mit der SME intrinsische Germaniumfilme auf Siliziumsubstraten herzustellen. Abschließend werden die wesentlichen Gemeinsamkeiten und Unterschiede der SME auf (111)- und (001)-orientiertem Silizium zusammengestellt.

7.1 Strukturelle Eigenschaften von Germaniumschichten auf Si(001)

Für diese Untersuchungen wurden 1 μm dicke Germaniumschichten bei 670 °C auf Si(001) Substraten gewachsen, wobei vor der Germaniumepitaxie auf der 2×1 rekonstruierten Siliziumoberfläche eine Monolage Sb aufgebracht und durch einen kontinuierlichen Sb-Fluss während des Germaniumwachstums aufrecht erhalten wurde. Bei der Vergleichsprobe wurde auf den Surfactant verzichtet.

¹Ein Teil dieser Ergebnisse wurde bereits in [193, 194, 175, 195, 196] veröffentlicht.

Im RHEED zeigt sich ein drastischer Unterschied. Die mit Surfactant gewachsene Schicht zeigt eine 2×1 rekonstruierte, zweidimensionale Oberfläche mit geringer Rauigkeit (s. Abb. 7.1). Das Wachstum ohne Surfactant führt zu 3D-Reflexen im RHEED (nicht gezeigt), die auf eine sehr raue Oberfläche schließen lassen.

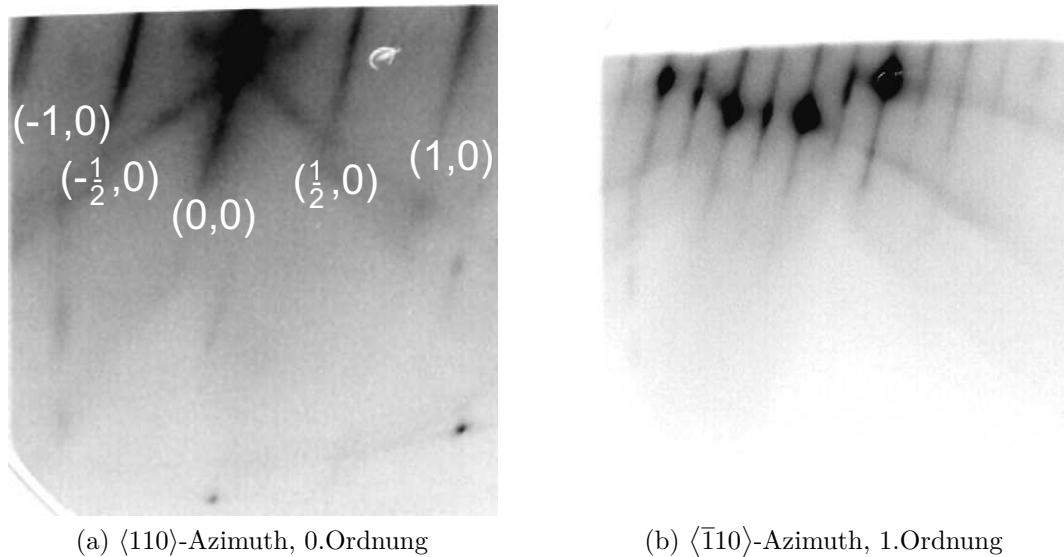


Abb. 7.1: RHEED-Bilder einer $1 \mu\text{m}$ dicken mit Antimon als Surfactant gewachsenen Germaniumschicht: Abb. 7.1a ist in $\langle 110 \rangle$ - aufgenommen, Abb. 7.1b in $\langle \bar{1}10 \rangle$ - Richtung. Man erkennt die zweifache Periodizität der 2×1 Oberflächenrekonstruktion. Der geringe Anteil diffuser Streuung und die streifenartige Form der Beugungsreflexe lassen auf eine glatte, schwach gestufte Oberfläche schließen [156]. Der helle Kontrast oben rechts in Abb. 7.1a ist einem Fehler in der Beschichtung des RHEED-Schirmes zuzuschreiben.

Untersuchungen der Oberfläche mit Rasterkraftmikroskopie im Tapping Mode bestätigen die aus der Elektronenbeugung gewonnenen Aussagen. Abbildung 7.2 und 7.3 zeigen Überblicks- und Detailaufnahmen der Proben. Die mit Surfactant gewachsenen Schichten sind sehr glatt. Sie weisen mittlere Rauigkeiten im Sub-Nanometerbereich und maximale Höhenunterschiede von wenigen Nanometern auf. Das Wachstum ohne Surfactant führt zu sehr rauen Schichten mit mittleren Rauigkeiten von $10 - 15 \text{ nm}$ und maximalen Höhenunterschieden in der Größenordnung von 100 nm .

Die strukturelle Perfektion der Proben wurde mit Transmissionselektronenmikroskopie und hochauflösender Röntgenbeugung untersucht. Abbildung 7.4 zeigt Übersichtsaufnahmen von Querschnittsproben. Die mit Surfactant gewachsene Schicht (s. Abb. 7.4a) weist eine glatte Oberfläche und eine glatte Grenzfläche zum Substrat auf. Es sind nur wenige die Schicht

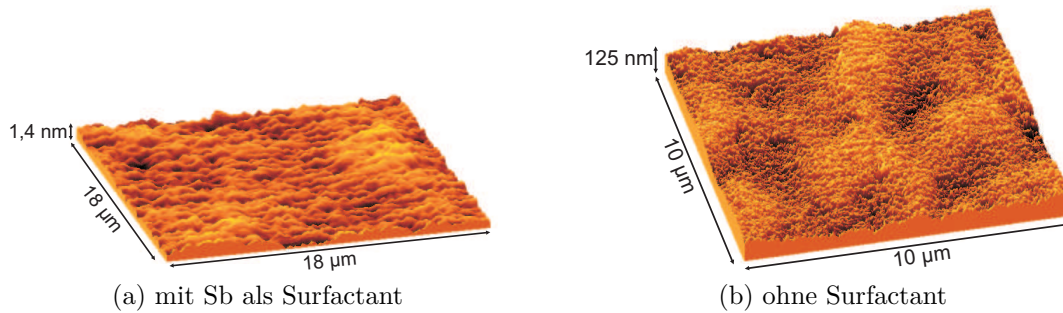


Abb. 7.2: AFM-Bilder von $1 \mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten auf Si(001) im Überblick: Die Skala der z -Achse gibt den maximalen Höhenunterschied im jeweiligen Bild an, die x - und y -Achsen liegen entlang von $\langle 110 \rangle$ -Richtungen. Die mit Surfactant gewachsene Schicht (s. Abb. 7.2a) ist sehr glatt. Die mittlere quadratische Rauigkeit (rms-Wert) beträgt $0,2 \text{ nm}$, der maximale Höhenunterschied $1,4 \text{ nm}$. Die ohne Sb gewachsene Schicht (s. Abb. 7.2b) weist eine mittlere quadratische Rauigkeit (rms-Wert) von $12,5 \text{ nm}$ auf, der maximale Höhenunterschied beträgt 125 nm .

durchdringende Defekte als dunkle Kontraste zu erkennen, während an der Grenzfläche zum Substrat eine hohe Dichte von Defekten als schmales dunkles Band sichtbar ist. Die ohne Surfactant gewachsene Probe (s. Abb. 7.4b) weist eine starke Rauigkeit an der Oberfläche und an der Grenzfläche zum Substrat auf. In der Nähe der Grenzfläche zum Substrat ist ein etwa 250 nm breiter sehr defektreicher Bereich zu erkennen. Die Anzahl durch die Schicht reichender Defekte scheint im Vergleich zu der mit Surfactant gewachsenen Probe nur leicht erhöht zu sein.

Die Ergebnisse von hochaufgelösten $\omega/2\Theta$ -Scans der mit und ohne Surfactant gewachsenen Proben sind in Abbildung 7.5 dargestellt. Die beiden Maxima sind jeweils dem Ge(004)- und Si(004)-Reflex zuzuordnen. Die durchgezogene Linie gibt die Position an, die mit der Gitterkonstante von Bulk-Germanium ($a_{\text{Ge}} = 5,658 \text{ \AA}$) korrespondiert. Die Abweichung der gemessenen Ge-Peaks zu kleineren vertikalen Gitterkonstanten hin resultiert aus der thermisch induzierten Zugspannung, die aufgrund der unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Germanium und Silizium und der beim Abkühlen nach dem Wachstum durchlaufenen Temperaturdifferenz in den Schichten vorliegt. Als gravierendste Abweichung zwischen den beiden Proben fällt auf, dass im Falle des Wachstums ohne Surfactant (Abb. 7.5b) Strukturen zwischen dem Ge- und dem Si-Peak sichtbar sind, die von einer Vermischung der Schichten herrühren könnten. Ordnet man den Beugungswinkeln Gitterkonstanten von relaxiertem $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ zu, ergibt sich ein Konzentrationsverlauf von $x = 1$ bis etwa $x = 0,5$. Bei der mit Surfactant gewachsenen Schicht ist dagegen nur eine schwach ausgeprägte Asymmetrie zu größeren Beugungswinkeln hin zu beobachten. Die Interdiffusion von Germanium und Silizium bei der Epitaxie mit Surfactant wird in

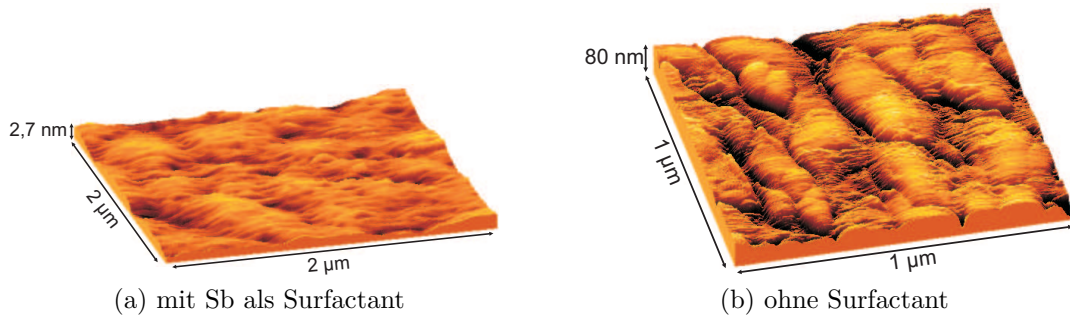


Abb. 7.3: Detail AFM-Aufnahmen von $1 \mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten auf Si(001): Die Skala der z -Achse gibt den maximalen Höhenunterschied im jeweiligen Bild an, die x - und y -Achsen liegen entlang von $\langle 110 \rangle$ -Richtungen. Die mit Surfactant gewachsene Schicht (s. Abb. 7.3a) ist sehr glatt. Die mittlere quadratische Rauigkeit (rms-Wert) beträgt $0,4 \text{ nm}$, der maximale Höhenunterschied $2,7 \text{ nm}$. Die ohne Sb gewachsene Schicht (s. Abb. 7.3b) weist eine mittlere quadratische Rauigkeit (rms-Wert) von $10,5 \text{ nm}$ auf, der maximale Höhenunterschied beträgt 80 nm .

Abschnitt 7.2 im Detail diskutiert.

Einen guten Eindruck von der strukturellen Perfektion einer epitaktischen Schicht liefern auch reziproke Gitterkarten. Dabei gibt die Intensität der diffus um einen Schichtreflex gestreuten Strahlung Auskunft über den Grad der Perfektion des Gitters. Abbildung 7.6 zeigt reziproke Gitterkarten der symmetrischen (004)-Reflexe der mit (Abb. 7.6(a)) und ohne Surfactant (Abb. 7.6(b)) gewachsenen Germaniumschichten. Ein vertikaler Schnitt bei $q_{\parallel} = 0$ entspricht einem $\omega - 2\theta$ -Scan, ein horizontaler Schnitt bei $q_{\perp} = 0$ einer Rockingkurve. Man erkennt, dass die ohne Surfactant gewachsene Probe eine stärkere Intensität der diffus gestreuten Strahlung liefert, was auf eine geringere strukturelle Perfektion hinweist. Insbesondere die Ausdehnung eines Reflexes in q_{\perp} -Richtung kann als Maß für die Defektdichte verwendet werden [145].

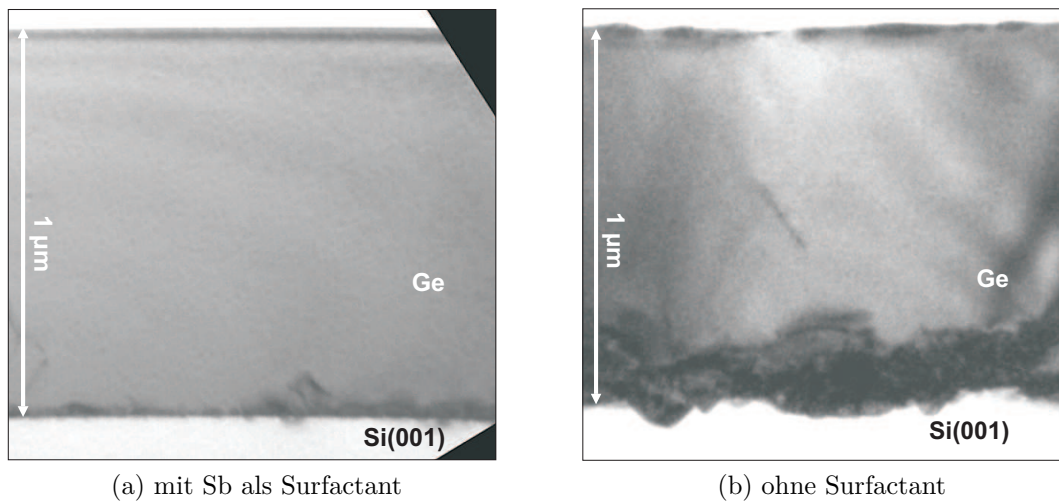


Abb. 7.4: Hellfeld TEM-Aufnahmen von Querschnitten von $1\mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten auf Si(001): Die mit Surfactant gewachsene Schicht (s. Abb. 7.4a) weist eine glatte Oberfläche und eine glatte Grenzfläche zum Substrat auf. Es sind nur wenige die Schicht durchdringende Defekte als dunkle Kontraste zu erkennen, während an der Grenzfläche zum Substrat eine hohe Dichte von Defekten als schmales dunkles Band sichtbar ist. Die ohne Surfactant gewachsene Probe (s. Abb. 7.4b) weist eine starke Rauigkeit an der Oberfläche und an der Grenzfläche zum Substrat auf. Die Anzahl durch die Schicht reichender Defekte ist nicht wesentlich erhöht. In der Nähe der Grenzfläche zum Substrat ist jedoch ein etwa 200 nm breiter sehr defektreicher Bereich zu erkennen.

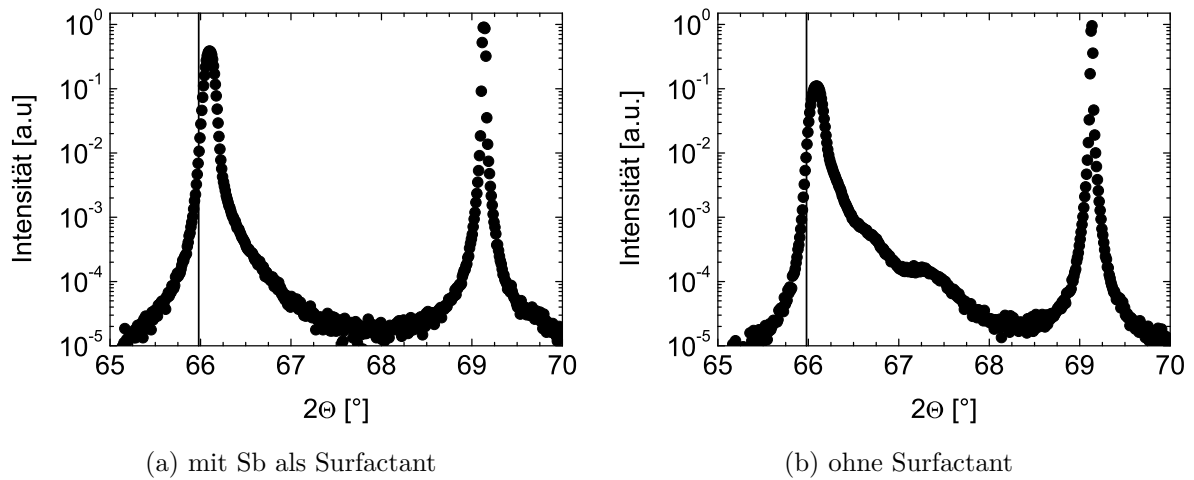


Abb. 7.5: Hochaufgelöste $\omega/2\theta$ -Scans der (004)-Reflexe von $1\ \mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten auf Si(001): Abb. 7.5a zeigt das Resultat für die Epitaxie mit Sb als Surfactant, Abb. 7.5b für die Epitaxie ohne Surfactant. Die durchgezogene senkrechte Linie gibt jeweils die Position für Bulk-Germanium ($a_{\text{Ge}} = 5,658\ \text{\AA}$) an. Die Abweichung der gemessenen Ge-Peaks resultiert aus der thermisch induzierten Spannung, die aufgrund der unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Germanium und Silizium in den Schichten vorliegt. Die Halbwertsbreite des Ge-Peaks ist im Falle des Wachstums ohne Surfactant um einen Faktor 1,25 größer, was auf eine geringere strukturelle Perfektion hinweist. Als gravierendste Abweichung zwischen den beiden Proben fällt auf, dass im Falle des Wachstums ohne Surfactant Strukturen zwischen dem Ge- und dem Si-Peak sichtbar sind, die von einer Vermischung der Schichten herrühren könnten. Bei der mit Surfactant gewachsenen Schicht ist nur eine schwache Flanke zu größeren Beugungswinkeln hin zu beobachten.

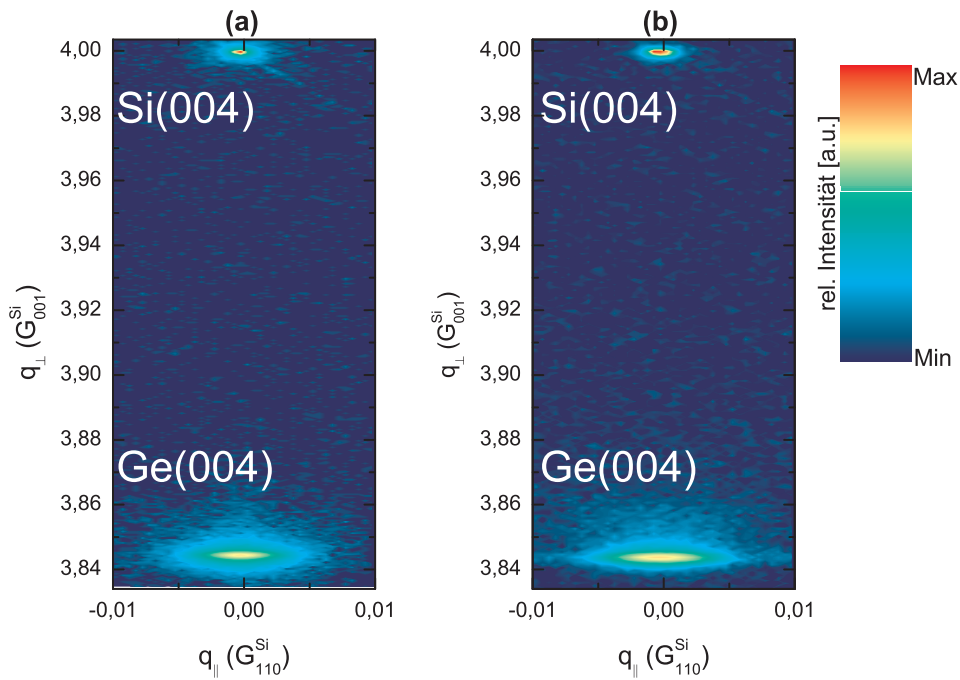


Abb. 7.6: Reziproke Gitterkarten der (004)-Reflexe von $1\ \mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten, die mit (a) bzw. ohne Surfactant (b) auf einem Si(001)-Substrat gewachsen wurden: Ein vertikaler Schnitt bei $q_{\parallel} = 0$ entspricht einem $\omega - 2\Theta$ -Scan, ein horizontaler Schnitt bei $q_{\perp} = 0$ einer Rockingkurve. Man erkennt, dass die ohne Surfactant gewachsene Probe eine größere Intensität der diffus gestreuten Strahlung liefert, was auf eine geringere strukturelle Perfektion hinweist.

7.1.1 Defektdichte

In der Literatur finden sich Defektdichten von 10^9 cm^{-2} bis 10^{12} cm^{-2} für die direkte Epitaxie von Germanium auf Si(001) bei unterschiedlichen Wachstumsbedingungen [197, 40], wobei höhere Wachstumstemperaturen aufgrund der größeren Mobilität der Versetzungen zu geringeren Defektdichten, also Dichten im Bereich von 10^9 cm^{-2} (!), führen. TEM-Untersuchungen an Querschnittsaufnahmen wie in Abbildung 7.4, sind für quantitative Aussagen über Defektdichten unterhalb von 10^9 cm^{-2} aufgrund des geringen untersuchten Volumens eher ungeeignet. Eine bessere Aussage lässt sich anhand von Aufsichtsprüben (so genannten plan-view Proben) gewinnen, die aus dem oberflächennahen Bereich der epitaktischen Schicht präpariert wurden. Allerdings lassen sich solche Untersuchungen nur schwer an sehr rauen Filmen durchführen, weshalb in dieser Arbeit nur Proben von mit Surfactant gewachsenen Germaniumschichten, untersucht wurden. Es ergaben sich Defektdichten von $1,6 \times 10^8 \text{ cm}^{-2} \pm 2 \times 10^7 \text{ cm}^{-2}$. Eine alternative Methode zur Bestimmung von Defektdichten besteht in der Auswertung der Halbwertsbreiten von XRD-Rockingkurven, wobei angenommen wird, dass Störungen des Kristallgitters in der Umgebung von Defekten eine gaussförmige Verbreiterung der Rockingkurve verursachen [145]. Die in Abbildung 7.7 gezeigten Messkurven wurden aus den entsprechenden reziproken Gitterkarten (s. Abb. 7.6) extrahiert. Mit Hilfe einer angefitteten Gausskurve wurde jeweils die Halbwertsbreite und daraus die Defektdichte bestimmt. Ohne Surfactant erhält man eine Halbwertsbreite von 238 arcsec , die fast doppelt so groß ist wie die der mit Surfactant gewachsenen Schicht ($FWHM = 130 \text{ arcsec}$). Daraus ergeben sich Defektdichten von $2,0 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$ für die ohne Sb gewachsene Schicht und mit Sb $6,0 \times 10^7 \text{ cm}^{-2}$. Dieser Wert liegt niedriger als der mit plan-view TEM bestimmte, im Rahmen der Unsicherheit (s. Abschnitt 4.1.2) kann man aber von einer recht guten Übereinstimmung sprechen.

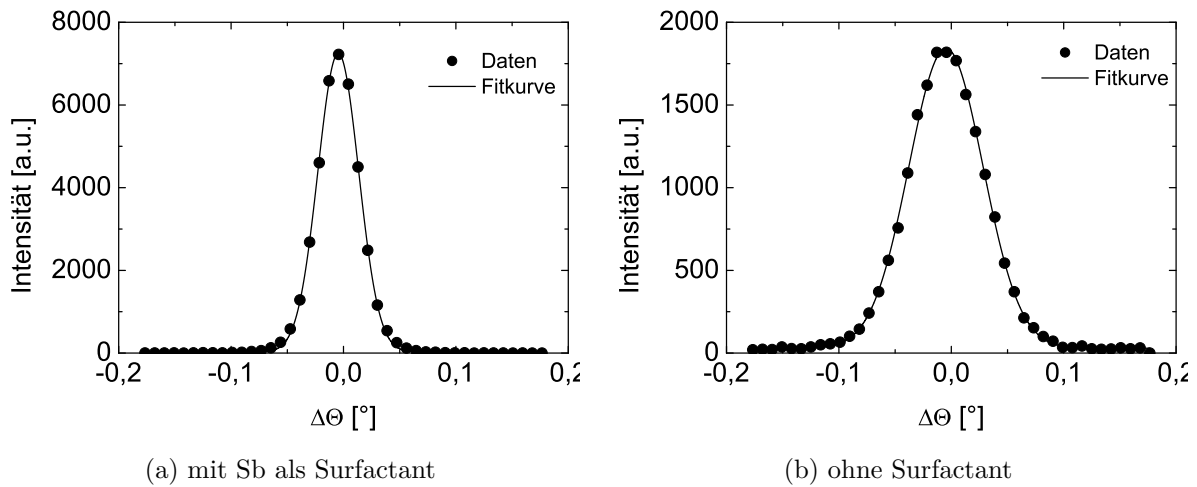


Abb. 7.7: Aus den reziproken Gitterkarten in Abb. 7.6 extrahierte Rockingkurven der (004)-Reflexe von $1\ \mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten auf Si(001): Abb. 7.7a zeigt das Ergebnis für die Epitaxie mit Sb als Surfactant, Abb. 7.7b für die Epitaxie ohne Surfactant. Die durchgezogene Linie ist eine angefittete Gausskurve, mit deren Hilfe jeweils die Halbwertsbreite bestimmt wurde. Ohne Surfactant erhält man eine Halbwertsbreite von $238\ \text{arcsec}$, die fast doppelt so groß ist wie die der mit Surfactant gewachsenen Schicht ($FWHM = 130\ \text{arcsec}$). Daraus ergeben sich Defektdichten von $2,0 \times 10^8\ \text{cm}^{-2}$ für die ohne Sb gewachsene Schicht und $6 \times 10^7\ \text{cm}^{-2}$ für die mit Sb gewachsene Schicht.

7.1.2 Das Versetzungsnetzwerk an der Grenzfläche Ge/Si(001)

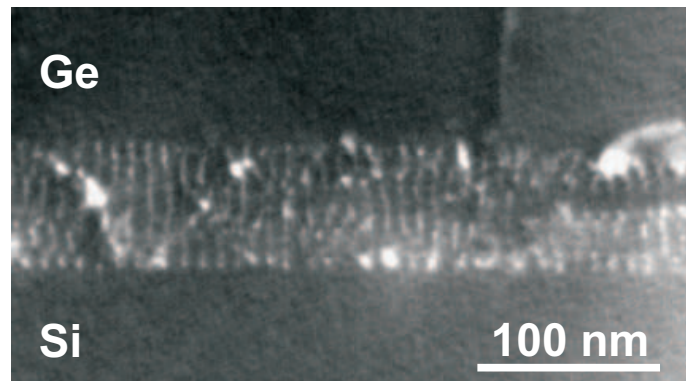
Bei der Epitaxie von relaxierten Germaniumschichten auf Silizium entstehen zahlreiche Versetzungen, die die Gitterfehlpassung ausgleichen, so genannte Misfit-Versetzungen. Sie liegen an der Grenzfläche zwischen Schicht und Substrat, wo sie ein dichtes Netzwerk bilden. Diese Netzwerke sind im Allgemeinen ungeordnet, der mittlere Versetzungsabstand hängt dabei von der auszugleichenden Gitterfehlpassung und vom Typ der Versetzungen ab. Er liegt im Falle von Ge auf Si(001) in der Größenordnung von 10 nm . Die TEM bietet mit der weak-beam Dunkelfeldmethode eine Technik, mit deren Hilfe die Struktur solcher Versetzungsnetzwerke untersucht werden kann. Abbildung 7.8 zeigt weak-beam Dunkelfeldabbildungen von Querschnittsproben, die im TEM um 25° um die $[\bar{1}10]$ -Achse gekippt wurden, so dass eine Projektion der Grenzfläche abgebildet wird. Man erkennt die Versetzungen jeweils als helle Kontraste. Das Wachstum mit Surfactant führt zu einer ebenen Grenzfläche, in der parallel verlaufende Versetzungen mit sehr regelmäßigen Abständen liegen. Ohne Surfactant ist die Grenzfläche sehr rau, wie man schon im Übersichtsbild erkennen konnte (s. Abb. 7.4b). Die Versetzungen bilden ein unregelmäßiges dichtes Netzwerk, das der Topografie der Grenzfläche angepasst ist. Eine genauere Analyse ist dadurch nur schwer möglich. Hingegen konnten die periodisch angeordneten Misfit-Versetzungen, die bei der SME von Ge auf Si(001) entstehen, im Detail untersucht werden.

Die weak-beam Dunkelfeldtechnik erlaubt die Bestimmung des Burgersvektors von Versetzungen, da Versetzungen, deren Burgersvektor \vec{b} senkrecht zu dem zur Abbildung verwendeten Gittervektor \vec{g} liegt, nach dem $\vec{g} \cdot \vec{b}$ -Kriterium keinen Kontrast liefern (s. Abschnitt 4.2.1). Variiert man nun den Abbildungsvektor, kann man anhand der Auslöschung von Versetzungen auf ihren Burgersvektor schließen. Abbildung 7.9 zeigt Aufnahmen eines Ausschnitts der Ge/Si-Grenzfläche unter verschiedenen Abbildungsbedingungen. Mit dem Abbildungsvektor $\vec{g} \parallel \langle \bar{1}10 \rangle$ erkennt man parallel zur $\langle 110 \rangle$ -Richtung verlaufende helle Kontraste (s. Abb. 7.9a). Wird ein vertikal zur $\langle \bar{1}10 \rangle$ -Richtung liegender Abbildungsvektor (hier $\vec{g} \parallel \langle 113 \rangle$) gewählt zeigen sich parallel zur $\langle \bar{1}10 \rangle$ -Richtung verlaufende helle Kontraste (s. Abb. 7.9b). Daraus lässt sich schließen, dass das Versetzungsnetzwerk aus zwei senkrecht zueinander parallel zur Grenzfläche liegenden Scharen von Versetzungen mit Linienrichtung $\vec{l} = \langle 1\bar{1}0 \rangle$ und Burgersvektor $\vec{b} \parallel \langle 110 \rangle$ besteht.

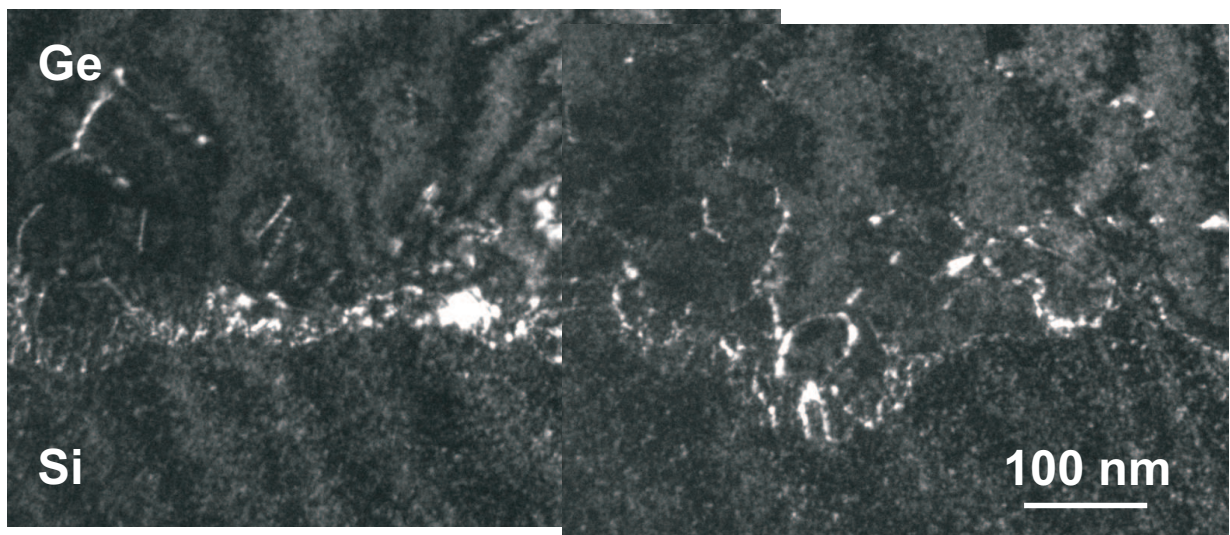
Abbildung 7.10 zeigt eine hochaufgelöste TEM-Aufnahme der Grenzfläche zwischen Germaniumschicht und Siliziumsubstrat. Die Positionen der Misfit-Versetzungen sind durch Pfeile markiert. Es ergibt sich ein Abstand von $10,5\text{ nm}$, was gut mit den in den Projektionsaufnahmen beobachteten Abständen übereinstimmt. Mit Hilfe eines Burgersumlaufs lässt sich der Typ der Versetzungen bestimmen. In Abbildung 7.11 ist das exemplarisch dargestellt. Zur besseren Orientierung ist der Verlauf des Gitters in der Umgebung der Versetzung markiert. Die roten Pfeile markieren einen Umlauf um die Versetzung. Der resultierende Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2} \langle 1\bar{1}0 \rangle$ ist ebenfalls eingezeichnet. Bei den Misfit-Versetzungen handelt es sich also um vollständige Stufenversetzungen, deren Linienrichtung und Burgersvektor

senkrecht zueinander und parallel zur Grenzfläche liegen.

Bemerkenswert ist, dass diese Versetzungen nicht zum Hauptgleitsystem des Diamantgitters $\frac{a}{2} \langle 110 \rangle \{111\}$, also zu den so genannten 60° -Versetzungen gehören, die typischerweise bei Relaxationsprozessen in der Ge/Si-Heteroepitaxie beobachtet werden. Relaxation über alternative Gleitsysteme wurde bei der Flüssigphasenepitaxie von Germanium und $\text{Ge}_{0.85}\text{Si}_{0.15}$ auf Si(001) beobachtet. Dort fand man in relaxierten Stranski-Krastanov-Inseln Versetzungen mit $\vec{l} = \langle 010 \rangle$ Linienrichtungen und um 45° zur Grenzfläche geneigtem Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2} \langle 110 \rangle$ [95, 198, 108, 96]. Bei der SME mit Arsen als Surfactant wurden V-förmige Defekte beobachtet, die $\Sigma 9$ -Korngrenzen ähneln [199]. Diese Defektstrukturen treten auch in Stranski-Krastanov-Inseln beim Wachstum von Ge auf Si(001) auf [200]. Unregelmäßige Anordnungen von vollständigen Stufenversetzungen wurden bei der Epitaxie von Ge auf Si(001) bei sehr niedrigen Wachstumstemperaturen beobachtet [40], während Sakai *et al.* in 50 nm dicken Germaniumschichten, die mit einem Niedertemperatur-CVD-Prozess hergestellt und anschließend bei 680°C getempert wurden, auch regelmäßige Anordnungen von Stufenversetzungen fanden [201]. In beiden Fällen wurde allerdings auch ein beträchtlicher Anteil (28% [40] bzw. 9% [201]) von 60° -Versetzungen sowie zahlreiche Stapelfehler beobachtet. In den hier untersuchten Proben fanden sich periodische Netzwerke, die ausschließlich aus Stufenversetzungen bestehen. Stapelfehler wurden nicht beobachtet.



(a) mit Surfactant



(b) ohne Surfactant

Abb. 7.8: Weak-beam Dunkelfeld TEM-Abbildungen von $1\ \mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten auf Si(001): Abb. 7.8a zeigt das Resultat für die Epitaxie mit Sb als Surfactant, Abb. 7.8b das für die Epitaxie ohne Surfactant. Die Querschnittsproben wurden im TEM um 25° um die $[\bar{1}10]$ -Achse, die horizontal im Bild liegt, gekippt, so dass eine Projektion der Grenzfläche abgebildet wird. Man erkennt die Versetzungen jeweils als helle Kontraste. Beim Wachstum mit Surfactant ist die Grenzfläche eben und die Versetzungen weisen sehr regelmäßige Abstände auf. Ohne Surfactant bilden die Versetzungen ein unregelmäßiges dichtes Netzwerk, das der Topografie der sehr unebenen Grenzfläche angepasst ist.

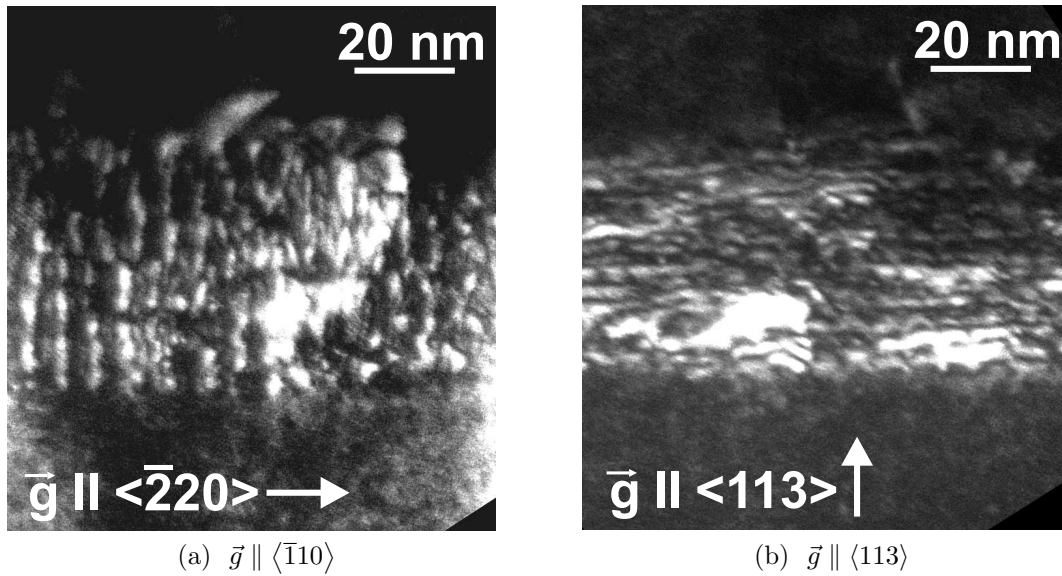


Abb. 7.9: Versetzungsnetzwerk bei der SME von Germanium auf Si(001): Die gekippte weak-beam XTEM-Aufnahme zeigt das Versetzungsnetzwerk einmal, in Abb. 7.9a, mit $\vec{g} = \langle \bar{2}20 \rangle$ und in Abb. 7.9b mit $\vec{g} = \langle 113 \rangle$. Jeweils eine Schar von Versetzungen ist sichtbar, während die um 90° gedrehte unter den gewählten Abbildungsbedingungen nach dem Kriterium $\vec{g} \cdot \vec{b} = 0$ ausgelöscht ist.

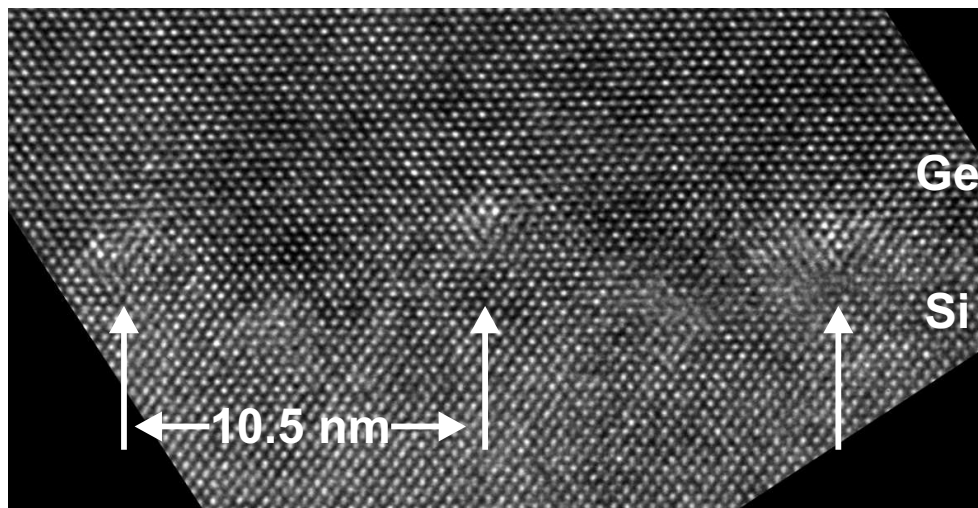
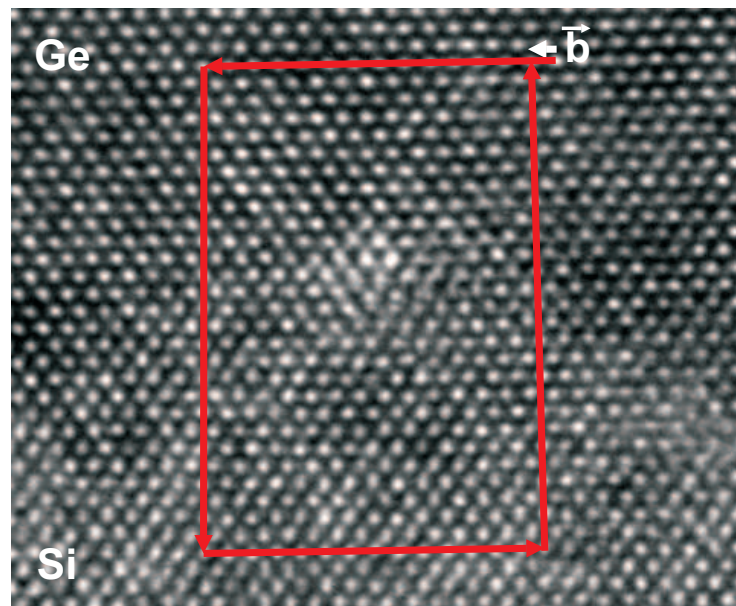
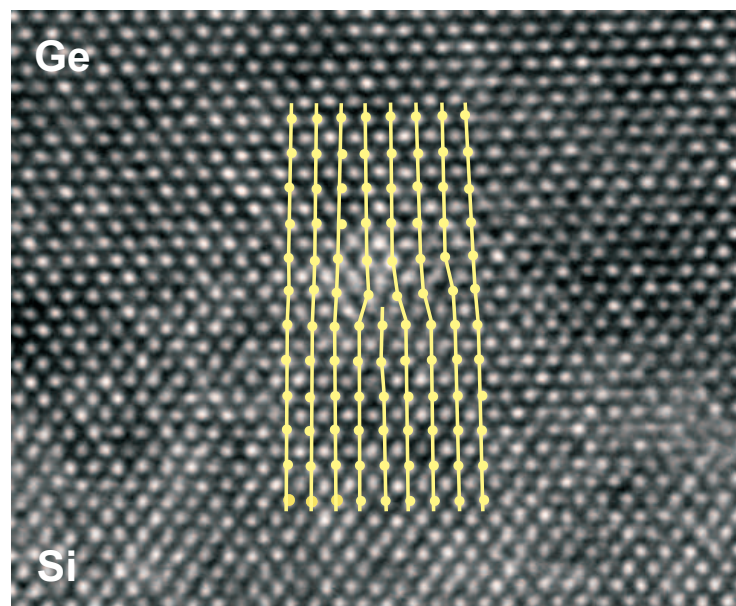


Abb. 7.10: Hochaufgelöste TEM-Querschnittsaufnahme der Ge/Si(001)-Grenzfläche: Die Positionen der Misfit-Versetzungen sind durch Pfeile markiert. Es ergibt sich ein Versetzungsabstand von $10,5 \text{ nm}$.



(a) Burgersumlauf



(b) Stufenversetzung

Abb. 7.11: Hochaufgelöste XTEM-Aufnahme einer Versetzung an der Ge/Si-Grenzfläche: Ein Burgersumlauf (Pfeile) ergibt einen Burgersvektor von $\vec{b} = \frac{a}{2} \langle 1\bar{1}0 \rangle$. Es handelt sich also um eine Stufenversetzung in der Grenzfläche. Zur besseren Orientierung ist der Verlauf des Gitters in der Umgebung der Versetzung markiert. Die roten Pfeile markieren einen Umlauf um die Versetzung. Der resultierende Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2} \langle 1\bar{1}0 \rangle$ ist ebenfalls eingezeichnet. Es handelt sich um eine vollständige Stufenversetzung.

7.2 Der Wachstumsmechanismus bei der SME auf Si(001)

Dieser Abschnitt untersucht, welchen Einfluss die Substrattemperatur und der Sb-Bedeckungsgrad auf die Relaxationsvorgänge in der Anfangsphase des Wachstums haben. Es wird ein Mechanismus vorgeschlagen, der die Bildung eines periodischen Versetzungsnetzwerkes an der Grenzfläche erklärt. Schließlich wird beschrieben, wie sich Variationen der Sb-Bedeckung auf die strukturellen Eigenschaften dickerer Germaniumschichten auswirken.

7.2.1 Relaxationsmechanismus

7.2.1.1 Modellvorstellung

Die Anfangsphase des Wachstums von Germanium auf Si(001) mit Sb als Surfactant ist von Horn-von Hoegen *et al.* in Abhängigkeit von Wachstumstemperatur und Sb-Bedeckung untersucht worden [125, 126, 127] (s. auch Abschnitt 3.2.1). Dabei wachsen die ersten 8 *ML* Germanium verspannt auf. Die Topografie dieser elastisch verspannten Germaniumschichten ist temperaturabhängig. Bei Substrattemperaturen um 500 °C erhält man glatte Filme. Mit steigender Wachstumstemperatur nimmt die Rauigkeit zu, weil auf diese Weise die Spannung im Film elastisch abgebaut werden kann. Bei etwa 700 °C liegt schließlich eine vollständige Facettierung vor, wobei sich bevorzugt niederenergetische Kristallflächen ausbilden. Die Orientierung der Facetten variiert, wie in Abbildung 7.12 dargestellt ist, abhängig vom Grad der Sb-Bedeckung (Θ_{Sb}) von [105] bei $\Theta_{Sb} < 0,5$ über nahezu runde Mischformen bei $\Theta_{Sb} \approx 0,5$ bis hin zu [117] bei $\Theta_{Sb} > 0,5$. Die [117]-Facetten zeigen eine 2×1 Oberflächenrekonstruktion, während die [105]-Facetten unrekonstruiert sind. Für sehr geringe Sb-Bedeckungen kommt es zur Bildung von 3D-Inseln, wie sie auch beim Wachstum ohne Surfactant beobachtet werden.

Beim weiteren Wachstum der Germaniumschicht kommt es zur plastischen Relaxation des Films. Dabei bietet die facettierte Oberfläche mit ihren zahlreichen Gräben, in denen es zu einer Überhöhung der Gitterverzerrung kommt, eine hohe Dichte von Nukleationszentren für Versetzungen [95, 96]. Analog zur SME von Germanium auf Si(111) [128, 129, 130, 131, 132] kann so eine große Anzahl von Versetzungen nahezu gleichzeitig entstehen und einen abrupten Spannungsabbau im Germaniumfilm hervorrufen. Eine Besonderheit des in dieser Arbeit untersuchten Wachstums bei hohen Sb-Bedeckungen ist die Bildung eines regelmäßigen Netzwerkes vollständiger Stufenversetzungen. Berücksichtigt man die oben beschriebene Abhängigkeit der Facettenorientierung von der Sb-Bedeckung, ergibt sich die in Abbildung 7.13 skizzierte Vorstellung des Relaxationsprozesses: Die ersten Monolagen Germanium wachsen verspannt und glatt auf. Nach etwa 8 *ML* hat sich die $\langle 117 \rangle$ -Oberflächenfacettierung der immer noch pseudomorphen Schicht ausgebildet. Die Gräben

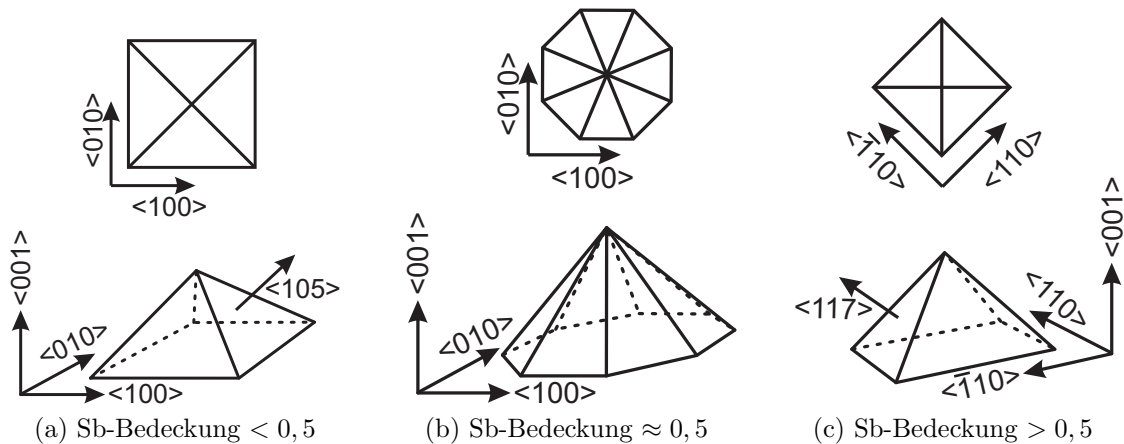


Abb. 7.12: Abhängigkeit der Oberflächenfacettierung von 8 ML dicken pseudomorphen Germaniumfilmen auf Si(001) von der Sb-Bedeckung: Die Orientierung der Facetten variiert mit dem Grad der Sb-Bedeckung (Θ_{Sb}) von $[105]$ bei $\Theta_{Sb} < 0,5$ (s. Abb. 7.12a) über nahezu runde Mischformen bei $\Theta_{Sb} \approx 0,5$ (s. Abb. 7.12b) bis hin zu $[117]$ $\Theta_{Sb} > 0,5$ (s. Abb. 7.12c). Die $[117]$ -Facetten zeigen eine 2×1 Oberflächenrekonstruktion, während die $[105]$ -Facetten unrekonstruiert sind.

zwischen den Mikropyramiden verlaufen in Richtung der Schnittlinien der $\langle 117 \rangle$ -Facetten und der (001)-Fläche, also entlang von $\langle 110 \rangle$ -Richtungen in der (001)-Ebene. In diesen Gräben ist die Gitterverzerrung maximal, so dass sie bevorzugte Nukleationsorte für Versetzungen sind. Außerdem gibt die Richtung der Gräben eine Vorzugsrichtung für die Versetzungen vor. Auf diese Weise können Versetzungen mit $\vec{l} = \langle 110 \rangle$ Linienrichtungen und parallel zur Grenzfläche liegendem Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2} \langle 1\bar{1}0 \rangle$ in unmittelbarer Nähe der Ge/Si-Grenzfläche ohne umfangreiche Gleitprozesse entstehen, wie sie bei der Relaxation über 60° -Versetzungen nötig sind (s. Abschnitt 2.4.2). Die hohe Dichte der Nukleationsorte ermöglicht die gleichzeitige Bildung vieler Versetzungen und somit einen schnellen Spannungsabbau der Schicht. Aufgrund der hohen Versetzungsdichte überlappen sich deren Spannungsfelder, was, auch begünstigt durch die hohe Substrattemperatur, eine periodische Verteilung ermöglicht. Ist die Spannung in der Germaniumschicht erstmal weitgehend reduziert, fehlt der Antrieb zur Facettierung, so dass schon nach etwa 18 ML ein glatter Film vorliegt.

Die Details des Nukleationsprozesses der vollständigen Stufenversetzungen und die Frage, welche Gleit- und/oder Kletterprozesse für die Ausbildung des periodischen Netzwerkes verantwortlich sind, können im Rahmen dieser Arbeit nicht geklärt werden. Diese Fragen könnten beispielsweise mit *in situ* TEM untersucht werden. Die Tatsache, dass in den in dieser Arbeit untersuchten Schichten ausschließlich vollständige Stufenversetzungen gefunden wurden, spricht allerdings für eine direkte Nukleation. Alternative Prozesse, die zu vollständigen Stufenversetzungen an der Grenzfläche führen können, sind in [202, 203, 204, 205]

beschrieben. Dabei reagieren zwei 60° -Versetzungen zu einer vollständigen Stufenversetzung. Allerdings müssten dann in den TEM-Untersuchungen auch 60° -Versetzungen zu sehen sein, die keinen Reaktionspartner gefunden haben.

Falls die hier beschriebene Vorstellung korrekt ist, sollte der Grad der Sb-Bedeckung und damit die Orientierung der sich bildenden Facetten ein entscheidender Parameter für den Spannungsabbau bei der SME sein. Gleichzeitig wäre es nur bei großer Sb-Bedeckung möglich, relaxierte Germaniumschichten mit den in Abschnitt 7.1 beschriebenen strukturellen Eigenschaften zu erzielen.

Im folgenden Abschnitt wird untersucht, inwieweit die durch unterschiedliche Sb-Bedeckung induzierten Oberflächenfacettierungen die strukturellen Eigenschaften dickerer Schichten bestimmen. Falls die Sb-induzierte Oberflächenfacettierung entscheidend für den Relaxationsmechanismus ist, sollte sich dies in strukturellen Unterschieden der resultierenden Germaniumschichten zeigen. Dazu wurden drei Fälle experimentell realisiert: erstens das Wachstum ohne Surfactant, das zu 3D-Inseln führen sollte, zweitens das Wachstum bei geringer Sb-Bedeckung, also mit $\langle 105 \rangle$ -Facettierung der Oberfläche und drittens das Wachstum bei großer Sb-Bedeckung, also mit $\langle 117 \rangle$ -Facettierung. In allen drei Fällen wurde zunächst nachgewiesen, dass die zu erwartende Oberflächentopografie in Abhängigkeit von der Sb-Bedeckung tatsächlich vorliegt. Danach wurden jeweils $1 \mu\text{m}$ dicke Germaniumschichten gewachsen und deren strukturelle Eigenschaften charakterisiert.

7.2.1.2 Experimente zur Sb-induzierten Oberflächentopografie

Um den Einfluss der durch unterschiedliche Sb-Bedeckung induzierten Oberflächentopografien auf die strukturellen Eigenschaften dickerer Schichten zu untersuchen, wurden drei jeweils 8 ML dicke Germaniumfilme auf Si(001) Substraten präpariert und anschließend mit RHEED², LEED und ex situ mit AFM untersucht. In Experiment A erfolgte das Wachstum ohne Surfactant. Die Elektronenbeugung zeigte, dass 3D-Inselwachstum erfolgte, was durch die AFM-Untersuchung bestätigt wurde (s. Abb. 7.16a). Hierbei ist auffällig, dass das Volumen des in den Inseln vorhandenen Materials, das des abgeschiedenen Germaniums weit übersteigt. In Experiment B erfolgte das Wachstum zunächst mit voller Sb-Bedeckung. Das RHEED-Bild zeigt dabei 3D-Reflexe, aber auch eine 2×1 -Rekonstruktion, die von den $\langle 117 \rangle$ -Facetten stammt [125]. Nach dem Ende des Germaniumwachstums wurde der Sb-Fluss reduziert, so dass Sb desorbieren konnte, bis die 2×1 -Rekonstruktion verschwunden war. Die LEED-Untersuchung bestätigte, dass $\langle 105 \rangle$ -artige³ Facetten auf der Oberfläche vorlagen. In Abb. 7.14 erkennt man, dass die Facettenreflexe mit variierender Elektronenenergie entlang von $\langle 100 \rangle$ -Richtungen wandern, was auf Facetten mit $\langle 105 \rangle$ -Charakter hinweist

²Die RHEED-Ergebnisse sind hier nicht dargestellt, bestätigen aber die Resultate der LEED-Messungen.

³Gemeint sind Facetten, deren Schnittlinien mit der (001)-Fläche in $\langle 100 \rangle$ -Richtungen weisen. Der genaue Facettenwinkel konnte in diesen Untersuchungen nicht ermittelt werden.

[156, 158]. Im AFM (s. Abb. 7.16b) zeigt sich, dass die Oberfläche vollständig von Mikropyramiden bedeckt ist. Die Gräben zwischen den Facetten verlaufen in $\langle 100 \rangle$ -Richtungen. Bei Experiment C wurde genauso verfahren, wie in Experiment B, nur dass die volle Sb-Bedeckung, kontrolliert durch die 2×1 -Rekonstruktion im RHEED, aufrechterhalten wurde. Die in Abb. 7.15 dargestellte LEED-Untersuchung zeigt Facettenreflexe, die mit variierender Elektronenenergie entlang von $\langle 110 \rangle$ -Richtungen wandern, was für Facetten mit $\langle 11\bar{7} \rangle$ -Charakter erwartet wird [125, 158]. Die AFM-Messung (s. Abb. 7.16c) ergab erneut eine vollständig facettierte Oberfläche. Die Gräben verlaufen entlang von $\langle 110 \rangle$ -Richtungen, was die LEED-Ergebnisse bestätigt. Auf Grund der hohen Wachstumstemperatur sind die Kanten der Mikropyramiden abgerundet.

Der in [125, 126, 127] beschriebene Einfluss der Sb-Bedeckung auf die Oberflächenfacettierung konnte somit für die in dieser Arbeit eingestellten Wachstumsbedingungen bestätigt werden. Die in den Experimenten A-C ermittelten Parameter wurden dann verwendet, um $1 \mu\text{m}$ dicke Germaniumschichten zu wachsen, deren strukturelle Eigenschaften im Folgenden gegenüber gestellt werden.

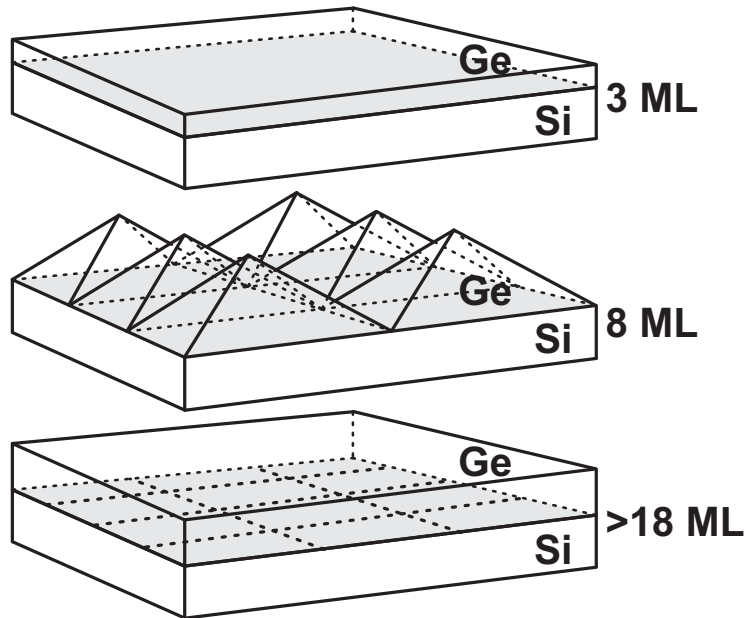


Abb. 7.13: Relaxationsmechanismus bei der SME von Germanium auf Si(001): Die ersten Monolagen Germanium wachsen verspannt und glatt auf. Nach etwa 8 *ML* hat die immer noch pseudomorphe Schicht eine $\langle 11\bar{7} \rangle$ -Oberflächenfacettierung ausgebildet. Die Gräben zwischen den Mikropyramiden verlaufen in Richtung der Schnittlinien der Facetten und der (001)-Fläche, also entlang von $\langle 110 \rangle$ -Richtungen in der (001)-Ebene. In diesen Gräben ist die Gitterverzerrung maximal, so dass sie bevorzugte Nukleationsorte für Versetzungen sind. Außerdem gibt der Verlauf der Gräben eine Vorzugsrichtung für die Versetzungen vor. Auf diese Weise können Versetzungen mit $\vec{l} = \langle 110 \rangle$ Linienrichtungen und parallel zur Grenzfläche liegendem Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2} \langle 1\bar{1}0 \rangle$ in unmittelbarer Nähe der Ge/Si-Grenzfläche entstehen. Die hohe Dichte der Nukleationsorte ermöglicht die gleichzeitige Bildung vieler Versetzungen und somit einen schnellen Spannungsabbau der Schicht. Aufgrund der hohen Versetzungsdichte überlappen sich deren Spannungsfelder, was, auch begünstigt durch die hohe Substrattemperatur, eine periodische Verteilung ermöglicht. Ist die Spannung in der Germaniumschicht erstmal weitgehend reduziert, fehlt der Antrieb zur Facettierung, so dass schon nach etwa 18 *ML* ein glatter Film vorliegt.

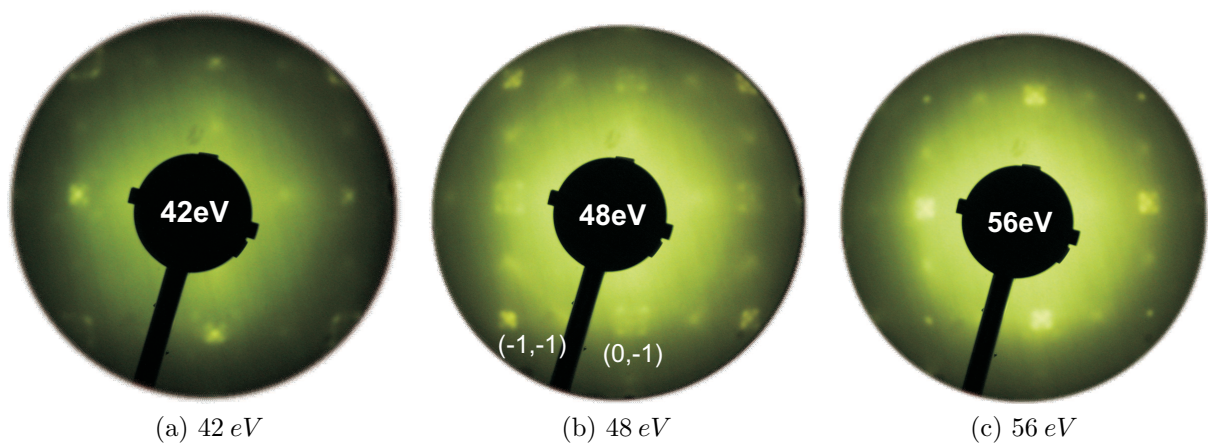


Abb. 7.14: LEED-Untersuchung der Oberflächenfacettierung von 8 ML dicken pseudomorphen Germaniumfilmen auf Si(001) bei geringer Sb-Bedeckung: Dargestellt ist das Beugungsbild für nahezu senkrechten Einfall der Elektronen bei 42 eV (s. Abb. 7.14a), 48 eV (s. Abb. 7.14b) und 56 eV (s. Abb. 7.14c). Der zentrale (0,0)-Reflex ist jeweils durch die Elektronenkanone verdeckt. Man erkennt die Aufspaltung der (1,0)- und (1,1)-Reflexe bei variierender Elektronenenergie. Die Bewegung der Facettenreflexe erfolgt entlang von [100]-Richtungen, wie es für [105]-Facetten bei $\Theta_{Sb} < 0,5$ zu erwarten ist.

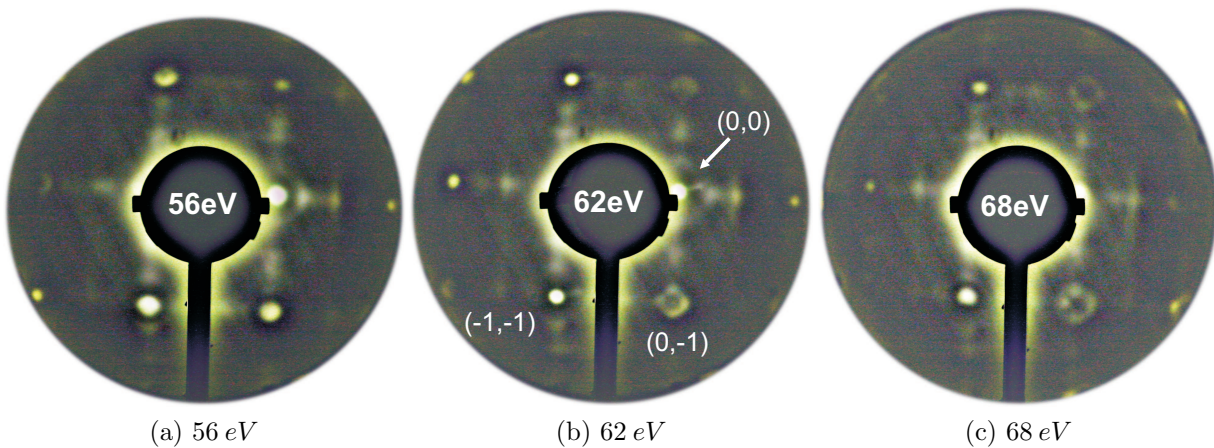


Abb. 7.15: LEED-Untersuchung der Oberflächenfacettierung von 8 *ML* dicken pseudomorphen Germaniumfilmen auf Si(001) bei vollständiger Sb-Bedeckung: Dargestellt ist das Beugungsbild bei 56 *eV* (s. Abb. 7.15a), 62 *eV* (s. Abb. 7.15b) und 68 *eV* (s. Abb. 7.15c). Das Bild ist leicht verzerrt, weil die Probe um etwa 7° zur Senkrechten verkippt wurde, damit der (0,0)-Reflex zu erkennen ist. Man sieht ihn jeweils am rechten Rand des Schattens der Elektronenkanone. Die Aufspaltung der (0,0)-, (1,0)- und (1,1)-Reflexe bei variierender Elektronenenergie ist klar zu erkennen. Die Bewegung der Facettenreflexe erfolgt entlang von [110]-Richtungen, wie es für [117]-Facetten bei $\Theta_{sb} > 0,5$ zu erwarten ist.

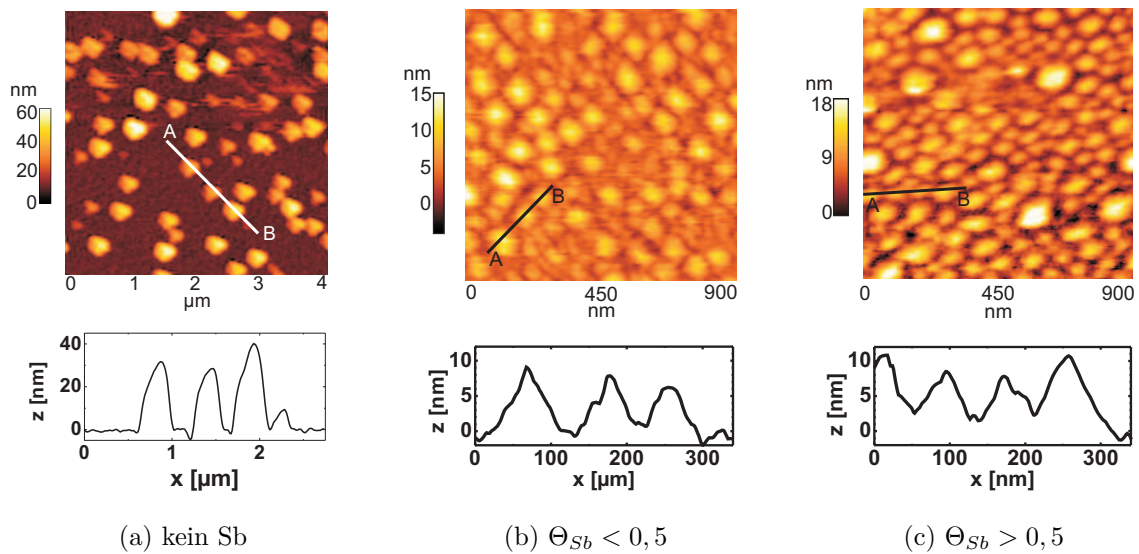


Abb. 7.16: Im Kontaktmodus *ex situ* aufgenommene AFM-Bilder (Die Kanten verlaufen in $\langle 100 \rangle$ -Richtungen.) in nach Deposition von 8 *ML* Germanium: Ohne Antimon liegen 3D-Inseln vor (s. Abb. 7.16a). Bei geringer Sb-Bedeckung liegen die Gräben zwischen den Mikropyramiden bevorzugt in $\langle 100 \rangle$ -Richtungen (s. Abb. 7.16b). Mit voller Sb-Bedeckung liegen die Gräben zwischen den Mikropyramiden bevorzugt in $\langle 110 \rangle$ -Richtungen (s. Abb. 7.16c). Wegen der hohen Wachstumstemperatur sind die Kanten der Facetten abgerundet. Abb. 7.16b und 7.16c stammen von den selben Proben wie die LEED-Bilder in Abb. 7.14 bzw. 7.15.

In Abbildung 7.17 sind Hellfeld TEM-Aufnahmen der drei Fälle gezeigt. Man erkennt, dass sowohl die Oberflächenrauigkeit als auch die Rauigkeit der Grenzfläche zum Substrat mit zunehmender Sb-Bedeckung abnehmen. Während der obere Teil der Germaniumschicht relativ wenig Defekte aufweist, ist in der Nähe der Grenzfläche zum Substrat ein stark gestörter Bereich (dunkle Kontraste) zu sehen. Die Ausdehnung dieses Bereiches ist bei der ohne Sb gewachsenen Probe am größten (ca. 150 – 200 nm). Bei der Probe, die mit geringem Sb-Fluss ($\Theta_{Sb} < 0,5$) gewachsen wurde, ist der defektreiche Bereich nur noch etwa 70 – 80 nm breit. Bei voller Sb-Bedeckung ($\Theta_{Sb} > 0,5$) ist er nur noch als schmales Band (ca. 10 – 20 nm) zu erkennen.

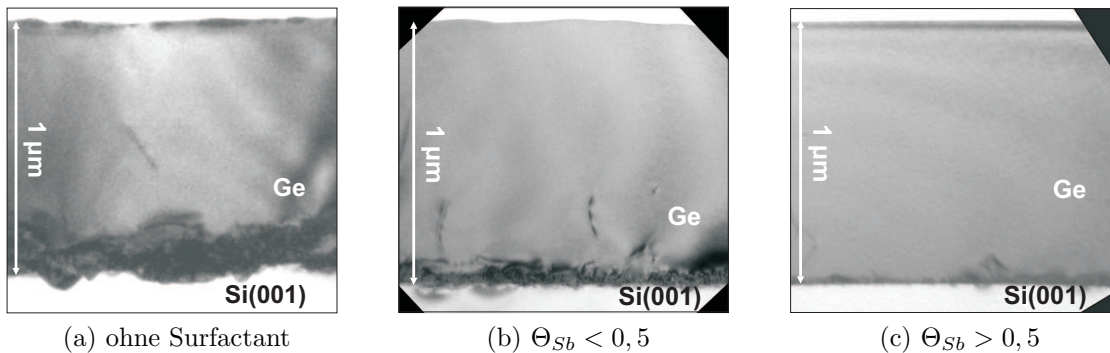


Abb. 7.17: Hellfeld TEM-Aufnahmen von Querschnitten von 1 μm dicken Germaniumschichten auf Si(001): Abb. 7.17a zeigt eine mit den Bedingungen aus Experiment A ohne Sb als Surfactant gewachsene Probe, Abb. 7.17b eine mit den Bedingungen aus Experiment B mit geringer Sb-Bedeckung gewachsene Probe und Abb. 7.17c eine mit den Bedingungen aus Experiment C mit voller Sb-Bedeckung gewachsene Probe. Man erkennt, dass sowohl die Oberflächenrauigkeit als auch die Rauigkeit der Grenzfläche zum Substrat mit zunehmender Sb-Bedeckung abnehmen. Während der obere Teil der Germaniumschicht relativ wenig Defekte aufweist, ist in der Nähe der Grenzfläche zum Substrat ein stark gestörter Bereich (dunkle Kontraste) zu sehen. Die Ausdehnung dieses Bereiches ist bei der ohne Sb gewachsenen Probe am größten (ca. 150 – 200 nm). Bei der Probe, die mit geringem Sb-Fluss ($\Theta_{Sb} < 0,5$) gewachsen wurde, ist der defektreiche Bereich nur noch etwa 70 – 80 nm breit. Bei voller Sb-Bedeckung ($\Theta_{Sb} > 0,5$) ist er nur noch als schmales Band (ca. 10 – 20 nm) zu erkennen.

Zur weiteren Analyse wurden hochaufgelöste XRD-Messungen durchgeführt, deren Ergebnisse in Abbildung 7.18 dargestellt sind. Die $\omega/2\theta$ -Scans der symmetrischen (004)-Reflexe zeigen die erwartete Verschiebung des Ge(004)-Reflexes zu kleineren vertikalen Gitterkonstanten hin, die durch die beim Abkühlen induzierte Zugspannung hervorgerufen wird. Mit sinkender Sb-Bedeckung werden Strukturen in der rechten Flanke des Ge-Reflexes sichtbar, die $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ -Gitterkonstanten entsprechen. Bei voller Sb-Bedeckung ($\Theta_{Sb} > 0,5$) ist nur eine leichte Asymmetrie des Peaks zu erkennen, die bei geringer Sb-Bedeckung ($\Theta_{Sb} < 0,5$)

zu einer deutlichen Schulter wird. Ohne Sb sind schließlich klare Nebenpeaks sichtbar. Ähnliche Ergebnisse wurden in XRD-Messungen von Germaniumschichten gefunden, die mit CVD bei Temperaturen von $350 - 750\text{ }^\circ\text{C}$ auf Si(001)-Substraten gewachsen und anschließend bei $850 - 900\text{ }^\circ\text{C}$ getempert wurden [51, 27]. SIMS-Untersuchungen ergaben eine massive Eindiffusion von Silizium aus dem Substrat in den Germaniumfilm als Ursache für die beobachteten XRD-Peakformen [48, 51, 27]. Die Ausdehnung des vermischten Bereiches betrug abhängig von den Temperbedingungen bis zu $1,5\text{ }\mu\text{m}$ [51].

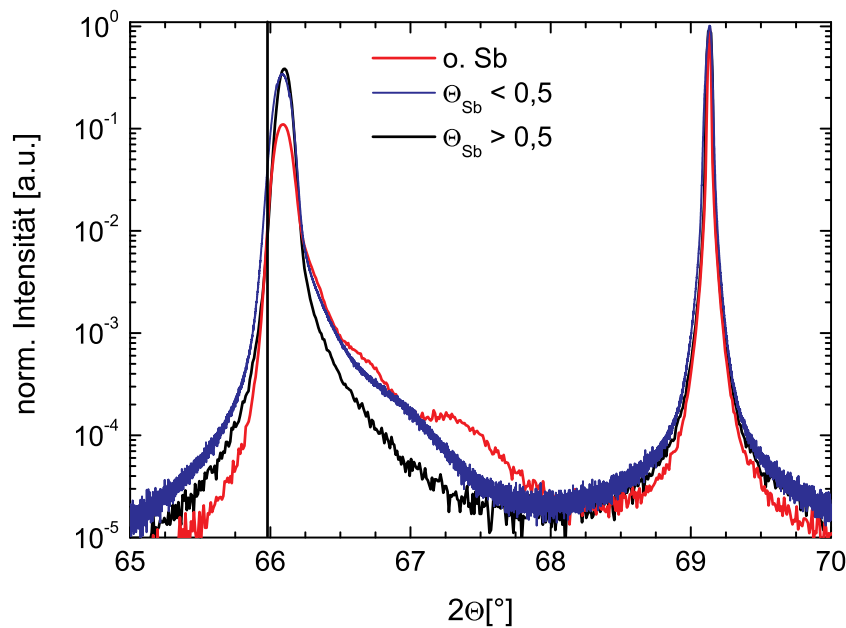


Abb. 7.18: Hochaufgelöste $\omega/2\theta$ -Scans der (004)-Reflexe von $1\text{ }\mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten auf Si(001), die mit unterschiedlicher Sb-Bedeckung gewachsen wurden: Die durchgezogene senkrechte Linie gibt die erwartete Reflex-Position für Bulk-Germanium ($a_{Ge} = 5,658\text{ \AA}$) an. Die Abweichung der gemessenen Ge-Peaks resultiert aus der thermisch induzierten Spannung, die aufgrund der unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Ge und Si in den Schichten vorliegt. Der signifikanteste Unterschied zeigt sich in der rechten Flanke des Ge(004)-Peaks: Bei voller Sb-Bedeckung ($\Theta_{Sb} > 0,5$) ist nur eine leichte Asymmetrie des Peaks zu erkennen, die bei geringer Sb-Bedeckung ($\Theta_{Sb} < 0,5$) zu einer deutlichen Schulter wird. Ohne Sb sind schließlich klare Nebenpeaks sichtbar.

Um zu überprüfen, ob auch in den hier untersuchten Schichten eine Eindiffusion von Silizium in die Germaniumschichten vorlag, wurden EDXS-Messungen an Querschnittsproben im TEM durchgeführt. Da der Herstellungsprozess der Proben in dieser Arbeit ein deutlich geringeres thermisches Budget im Vergleich zu den Prozessen in [48, 51, 27] aufweist, ist auch eine weit geringere Diffusionstiefe zu erwarten. Daher ist die gewählte Methode mit einer Ortsauflösung von wenigen Nanometern geeigneter als beispielsweise SIMS.

Die gemessenen Konzentrationsprofile sind in Abbildung 7.19 dargestellt. Die Messdaten wurden jeweils mit einem Diffusionsprofil der Form

$$N(x, t) = \frac{N_{max} - N_{min}}{2} \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x - x_0}{2\sqrt{Dt}} \right) \right) + \frac{N_{max} + N_{min}}{2} \quad (7.1)$$

angepasst. Die freien Parameter waren dabei N_{max} und N_{min} , die maximale und die minimale Konzentration, x_0 , der Ort der Stufe, und das Produkt aus der Diffusionskonstanten D und der Prozesszeit t . Die besten Fitkurven sind als durchgezogene Linien dargestellt. Der ansteigende Verlauf der Siliziumkonzentration in Abb. 7.19b und 7.19c ist ein Messartefakt aufgrund von Kohlenstoffkontamination an den Umkehrpunkten der jeweiligen Scanlinie (s. auch Abschnitt 4.2.2). Im Vergleich erkennt man, dass die Verbreiterung der Konzentrationsprofile mit abnehmender Sb-Bedeckung zunimmt. Bei voller Sb-Bedeckung (s. Abb. 7.19c) kommt das Konzentrationsprofil dem Ideal eines abrupten Übergangs sehr nahe. Die Breite der Stufe beträgt nur 5 – 10 nm und liegt damit im Bereich der Ortsauflösung der Messmethode. Bei geringerer Sb-Bedeckung (s. Abb. 7.19b) liegt die Breite des Profils bei 25 – 30 nm und ohne Sb (s. Abb. 7.19a) bei etwa 70 – 80 nm.

Setzt man als Prozesszeit unter Vernachlässigung der Abkühlzeit die Wachstumsdauer von $t = 4980$ s ein, kann man aus den Fitparametern die Diffusionskonstante D bestimmen. Es ergeben sich die in Tabelle 7.1 dargestellten Werte. Die Diffusionskonstante für das Wachstum ohne Sb ist um einen Faktor 20 größer als bei der SME mit voller Sb-Bedeckung und auch der Wert für die SME mit geringer Sb-Bedeckung ist noch um einen Faktor 5 größer als bei voller Sb-Bedeckung. Die Zunahme der Diffusion mit sinkender Sb-Bedeckung bestätigt die aufgrund der Röntgenmessungen vermutete Vermischung von Silizium und Germanium.

Sb-Bedeckung	D [cm^2s^{-1}]
ohne Sb	$1,4 \times 10^{-16}$
$\Theta_{Sb} < 0,5$	$3,7 \times 10^{-17}$
$\Theta_{Sb} > 0,5$	$7,5 \times 10^{-18}$

Tab. 7.1: Aus den Messdaten ermittelte Diffusionskonstanten für die Diffusion von Silizium in Germanium.

Abbildung 7.20 zeigt die in dieser Arbeit ermittelten Diffusionskonstanten im Vergleich mit Literaturwerten. Die Streuung der Literaturdaten ist vermutlich auf die unterschiedlichen

experimentellen Bedingungen zurückzuführen: Niedertemperatur-MBE von Silizium auf Germaniumsubstraten [101], Implantation von Silizium in Germaniumwafer [98, 206, 99], Sputtern von Siliziumschichten auf Germaniumsubstraten [100] und CVD von relaxierten Germaniumschichten auf Siliziumsubstraten [48, 51]. Es scheint bei abgeschiedenen und relaxierten Schichten eine etwas schwächere Diffusion im Vergleich zu den Versuchen mit implantiertem Si oder Niedertemperatur-MBE aufzutreten. Das könnte daran liegen, dass Silizium in Germanium über Leerstellen diffundiert, die bei der Implantation oder bei der Niedertemperatur-MBE verstärkt generiert werden [100, 101].

Die Diffusionskonstante bei der SME mit voller Sb-Bedeckung stimmt am besten mit den in [48, 51] gefundenen Werten überein. Dort wurden relaxierte Germaniumschichten mit CVD bei $400\text{ }^{\circ}\text{C}$ auf Siliziumsubstraten gewachsen und anschließend bei $850 - 900\text{ }^{\circ}\text{C}$ getempert. Die Diffusion sollte also nicht durch Verspannung oder Relaxationsvorgänge, sondern nur durch das thermische Budget angetrieben sein. Auch die gemessene Diffusionstiefe stimmt mit den für diesen Fall erwarteten Werten überein (s. Abschnitt 2.5).

Die hier beobachtete unterschiedlich starke Eindiffusion von Silizium aus dem Substrat kann durch verschiedene Relaxationsmechanismen in Abhängigkeit von der Sb-Bedeckung erklärt werden. Beim Wachstum ohne Surfactant kommt es zu dreidimensionalem Inselwachstum und schon im Anfangsstadium der Epitaxie zu einer starken Eindiffusion von Silizium aus dem Substrat [113, 102, 103, 104]. Der Spannungsabbau über Versetzungen erfolgt allmählich, so dass durch Verspannung beschleunigte Diffusionsprozesse dominieren. Bei der SME mit voller Sb-Bedeckung wird das dreidimensionale Inselwachstum vermieden. Die Oberflächenfacettierung mit $\langle 117 \rangle$ -Charakter führt schon nach wenigen Monolagen zu einer abrupten Relaxation über vollständige Stufenversetzungen, so dass die Diffusion im Wesentlichen durch das thermische Budget des Prozesses bestimmt ist. Beim Wachstum mit geringer Sb-Bedeckung wird zwar ebenfalls das dreidimensionale Inselwachstum unterdrückt. Die Verspannung kann aber aufgrund der $\langle 105 \rangle$ -artigen Oberflächenfacettierung nicht so schnell abgebaut werden wie bei voller Sb-Bedeckung. Der Anteil verspannungsgetriebener Diffusion ist also größer, aber nicht ganz so groß wie bei der Epitaxie ohne Surfactant. Auch die in den TEM-Untersuchungen beobachteten unterschiedlich ausgedehnten defektreichen Zonen in der Nähe der Grenzfläche zum Substrat unterstützen dieses Bild.

Die SME mit voller Sb-Bedeckung ermöglicht also nicht nur relaxierte Germaniumschichten mit geringen Defektdichten. Durch ihren speziellen Relaxationsmechanismus wird auch die Interdiffusion auf ein Minimum reduziert.

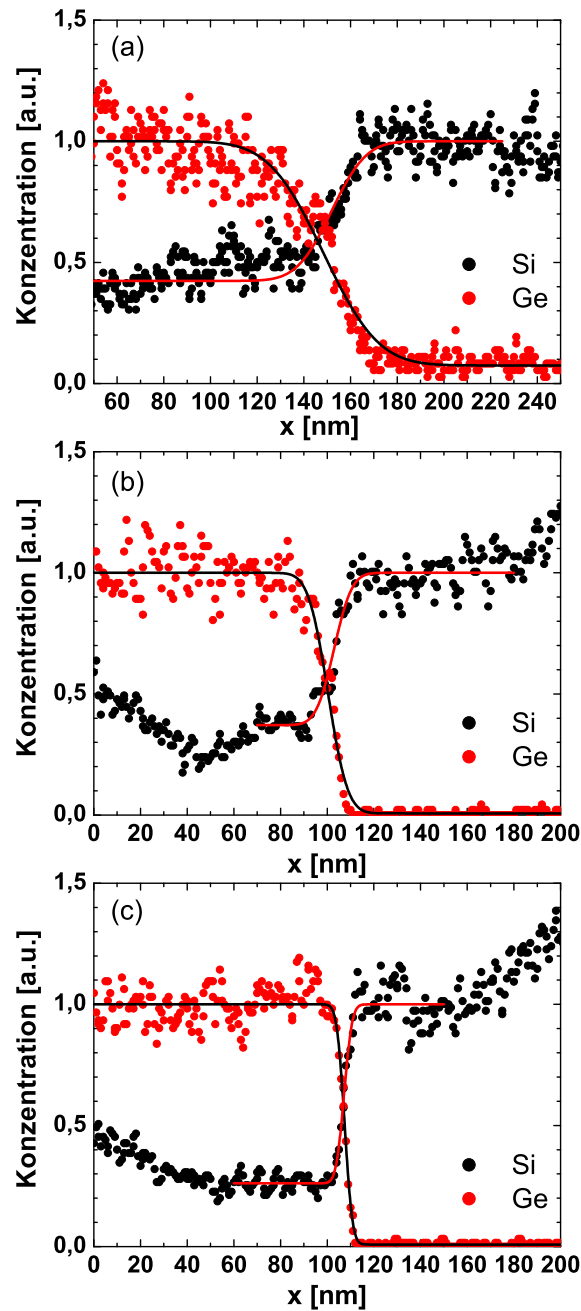


Abb. 7.19: An TEM-Querschnittsproben gemessene EDXS-Profile von $1\ \mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten auf Si(001): Abb. 7.19 (a) zeigt eine ohne Sb als Surfactant gewachsene Probe, Abb. 7.19 (b) eine mit geringer Sb-Bedeckung gewachsene Probe und Abb. 7.19 (c) eine mit voller Sb-Bedeckung gewachsene Probe. Die besten Fitkurven nach Gl. 7.1 sind als durchgezogene Linien dargestellt. Der ansteigende Verlauf der Siliziumkonzentration in Abb. 7.19 (b) und 7.19 (c) ist ein Messartefakt aufgrund von Kohlenstoffkontamination an den Umkehrpunkten der jeweiligen Scanlinie. Man erkennt schon qualitativ, dass die Konzentrationsprofile eine mit abnehmender Sb-Bedeckung zunehmende Verbreiterung aufweisen.

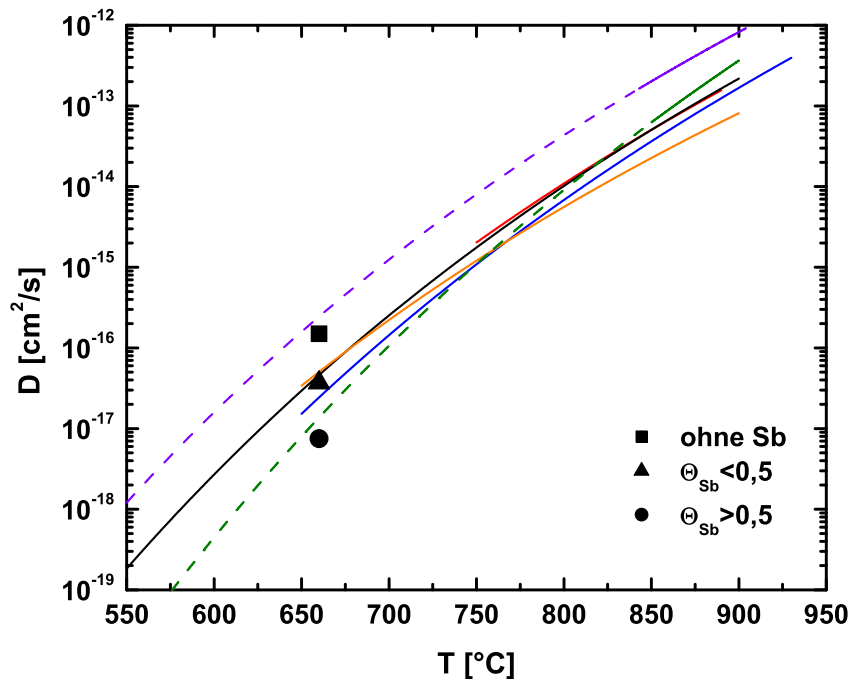


Abb. 7.20: Diffusionskonstanten für die Diffusion von Silizium in Germanium: Die in dieser Arbeit ermittelten Werte (Punkte) sind zusammen mit Literaturdaten (schwarz: [101], rot: [99], blau: [100], orange: [98], grün: [48, 51] violett: [206]) dargestellt. Die gestrichelten Verlängerungen durchgezogener Linien stellen jeweils Extrapolationen der experimentellen Daten dar. Die Streuung der Literaturdaten ist vermutlich auf die unterschiedlichen experimentellen Bedingungen zurückzuführen: Niedertemperatur-MBE von Silizium auf Germaniumsubstraten [101], Implantation von Silizium in Germanium [98, 206, 99], Sputtern von Siliziumschichten auf Germaniumsubstraten [100] und CVD von relaxierten Germaniumschichten auf Siliziumsubstraten [48, 51]. Es scheint bei abgeschiedenen und relaxierten Schichten eine etwas schwächere Diffusion im Vergleich zu den Versuchen mit implantiertem Silizium oder Niedertemperatur-MBE aufzutreten. Das könnte daran liegen, dass Silizium in Germanium über Leerstellen diffundiert, die bei der Implantation oder bei der Niedertemperatur-MBE verstärkt generiert werden [100, 101]. Die Diffusionskonstante bei der SME mit voller Sb-Bedeckung stimmt am besten mit den in [48, 51] gefundenen Werten überein. Dort wurden relaxierte Germaniumschichten mit CVD bei 400 °C auf Siliziumsubstraten gewachsen und anschließend bei 850 – 900 °C getempert. Die Diffusion sollte also nicht durch Verspannung oder Relaxationsvorgänge, sondern nur durch das thermische Budget angetrieben sein. Auch die gemessene Diffusionstiefe stimmt mit den für diesen Fall erwarteten Werten überein (s. Abschnitt 2.5).

7.2.2 Restverzerrung von Germaniumschichten auf Si(001)

Bei der Untersuchung von Germaniumschichten auf Si(111) zeigte sich, dass die Restverzerrung mit zunehmender Schichtdicke abnimmt und bei einer Schichtdicke von etwa 150 nm ein Wechsel des Vorzeichens der im Film gespeicherten Spannung von kompressiv bei kleineren Schichtdicken zu tensil bei größeren Schichtdicken erfolgt (s. Abschnitt 6.3). $1\text{ }\mu\text{m}$ dicke Germaniumfilme auf Si(001) sind ebenfalls zugverspannt. Die Abhängigkeit der Restverzerrung von der Schichtdicke wird in diesem Abschnitt untersucht.

Die Restverzerrung parallel zur Grenzfläche ϵ_{\parallel} wurde analog zum Vorgehen für (111)-orientierte Schichten mittels hoch aufgelöster reziproker Gitterkarten für Germaniumschichtdicken von $100 - 1000\text{ nm}$ gemessen. Abb. 7.21 zeigt beispielhaft die RSM von asymmetrischen $(\overline{113})$ - und (113)-Reflexe einer $1\text{ }\mu\text{m}$ dicken Schicht. Die beiden durchgezogenen Linien geben die Lage an, die Reflexe einer vollständig relaxierten Schicht hätten. Man erkennt, dass die untersuchte Germaniumschicht eine größere laterale und kleinere vertikale Gitterkonstante als vollständig relaxiertes Germanium aufweist. Dies bestätigt die schon in den $\omega/2\theta$ -Scans festgestellte Zugspannung.

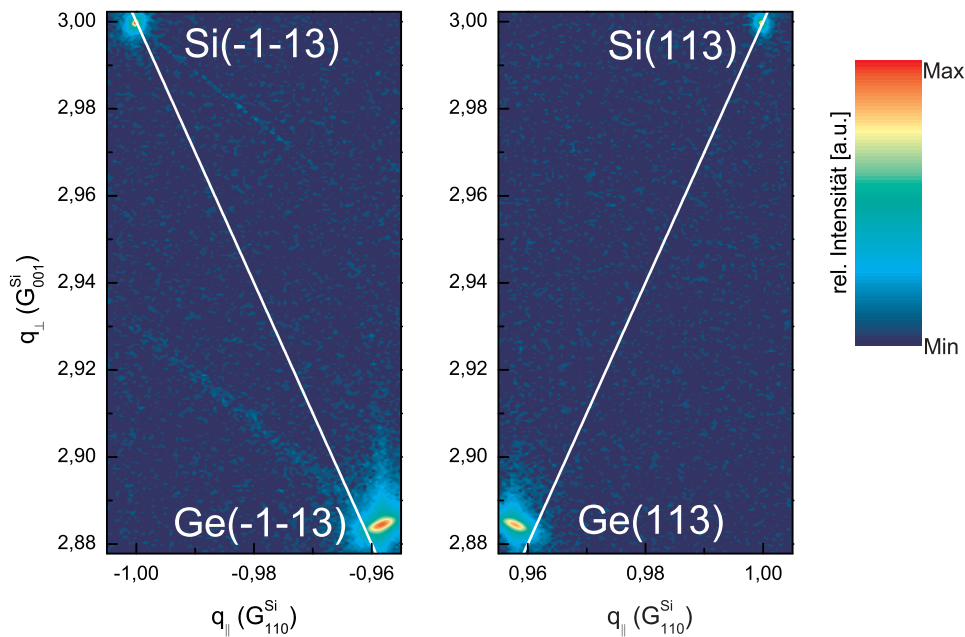


Abb. 7.21: RSM der asymmetrischen $(\overline{113})$ - und (113)-Reflexe einer $1\text{ }\mu\text{m}$ dicken Germaniumschicht auf Si(001): Die durchgezogenen Linien geben die Lage an, die Reflexe einer vollständig relaxierten Schicht hätten. Man erkennt, dass die untersuchte Germaniumschicht eine größere laterale und kleinere vertikale Gitterkonstante als vollständig relaxiertes Germanium aufweist. Die Schicht steht also unter Zugspannung.

In Abbildung 7.22 sind die aus den RSM extrahierten Werte für die Restverzerrung in der Ebene $\epsilon_{||}$ in Abhängigkeit von der Schichtdicke dargestellt. Bei einer Schichtdicke von 50 nm findet man eine kompressive Restverzerrung, wohingegen für Filmdicken oberhalb von etwa 60 nm eine zunehmende tensile Verzerrung auftritt. Die durchgezogene Linie markiert die optimale Fitkurve gemäß Gleichung 6.4. Die optimalen Fitparameter sind $C = 0,31$ und $\epsilon_{th} = -0,00206$. Der Wert für die Länge des Burgersvektors b wurde entsprechend der experimentell gefundenen vollständigen Stufenversetzungen zu $0,400\text{ nm}$ gewählt. Im Vergleich mit dem für die (111)-Orientierung beobachteten Verhalten fällt auf, dass die Restverzerrung für die (001)-Orientierung mit steigender Schichtdicke schneller abfällt. Das könnte daran liegen, dass der Spannungsabbau über vollständige Stufenversetzungen effektiver ist als der über 90° -Partialversetzungen.

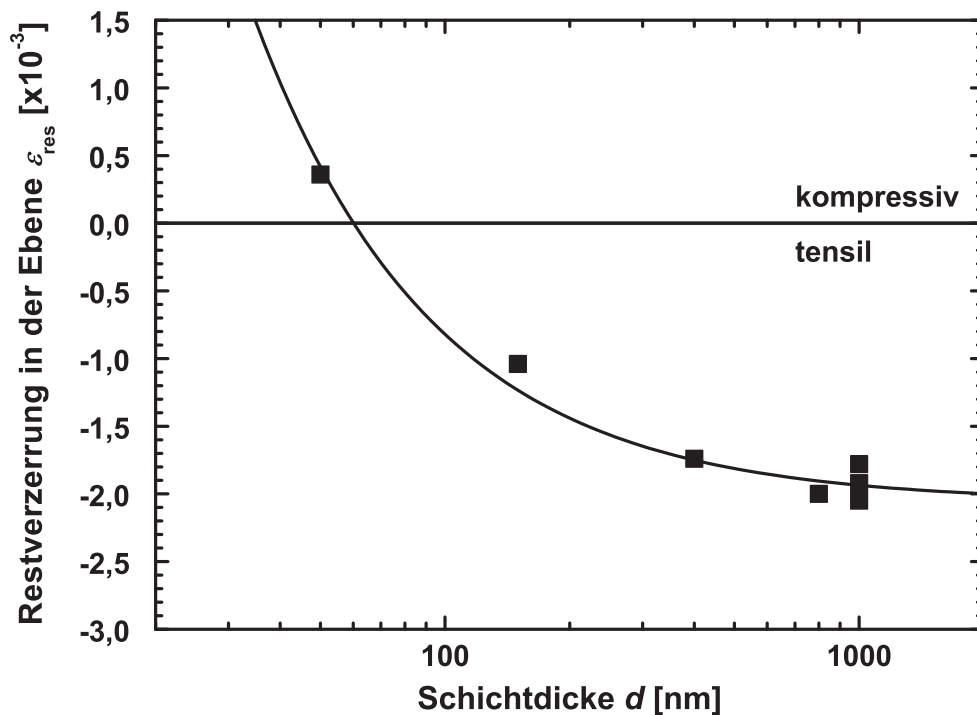


Abb. 7.22: Restverzerrung in Germanium auf Si(001): Dargestellt sind die aus den RSM extrahierten Werte in Abhängigkeit von der Schichtdicke. Bei einer Schichtdicke von 50 nm findet man eine kompressive Restverzerrung, wohingegen für Filmdicken oberhalb von etwa 60 nm eine zunehmende tensile Verzerrung auftritt. Die durchgezogene Linie markiert die optimale Fitkurve gemäß Gleichung 6.4 mit den Parametern $C = 0,31$ und $\epsilon_{th} = -0,00206$. Der Wert für die Länge des Burgersvektors b wurde entsprechend der experimentell gefundenen vollständigen Stufenversetzungen zu $0,400\text{ nm}$ gewählt.

Der ermittelte Wert für die thermische Spannung von $0,206\%$ stimmt sehr gut mit dem aus der Temperaturdifferenz zwischen Wachstumstemperatur und Raumtemperatur erwarteten

Wert von 0,205% überein. Somit scheint für im Falle der (001)-Orientierung keine plastische Relaxation aufzutreten. Der resultierende Verlauf der elastischen Verzerrung in der Germaniumschicht ist in Abbildung 7.23 zusammen mit der entsprechenden Kurve für Germanium auf Si(111) dargestellt. Das Fehlen plastischer Relaxation für die (001)-Orientierung kann dadurch erklärt werden, dass die vorliegenden vollständigen Stufenversetzungen in der (001)-Ebene eine größere Aktivierungsenergie für Gleitprozesse haben als die Partialversetzungen in der (111)-Ebene.

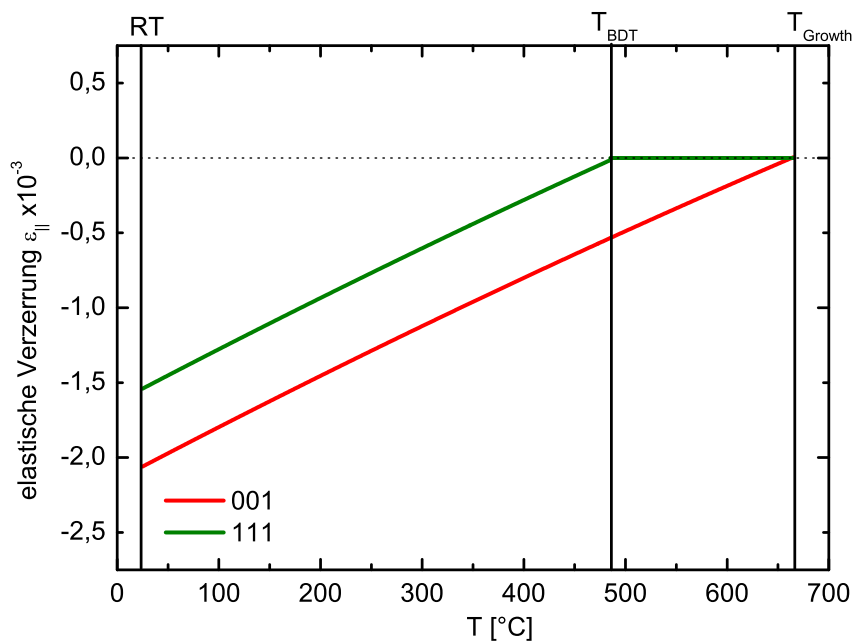


Abb. 7.23: Verlauf der Restverzerrung beim Abkühlen für Germanium auf Si(111) und Si(001): Ausgehend von den gemessenen Werten für die Restverzerrung bei Raumtemperatur ergibt sich, dass im Fall der (001)-Orientierung keine plastische Relaxation während des Abkühlens stattfindet, was auf die größere Aktivierungsenergie für das Gleiten von vollständigen Stufenversetzungen in der (001)-Ebene im Vergleich zu Gleitprozessen von Partialversetzungen in der (111)-Ebene zurückgeführt werden kann.

7.3 Hintergrunddotierung

Der Einbau von Surfactantatomen ist ein unerwünschter Nebeneffekt bei der SME, weil er zu einer Dotierung der Germaniumschichten führt. Im Falle der SME von Germanium auf

Si(111) mit Antimon als Surfactant konnte allerdings gezeigt werden, dass sich die durch Surfactanteinbau bedingte Dotierung von etwa 10^{19} cm^{-2} auf etwa 10^{16} cm^{-2} reduzieren lässt, indem die Wachstumstemperatur von $500 \text{ }^\circ\text{C}$ auf $700 \text{ }^\circ\text{C}$ erhöht wird [141, 177, 176]. Dabei nutzt man die drastische Zunahme der Oberflächensegregation des Antimon in diesem Temperaturbereich aus. In diesem Abschnitt wird untersucht, ob im Falle der SME von Germanium auf Si(001) bei hohen Wachstumstemperaturen vergleichbar niedrige Hintergrunddotierungen erzielt werden.

Dazu wurden an $1 \mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten SIMS-Messungen durchgeführt. Abbildung 7.24 zeigt ein typisches SIMS-Profil. Die Sb-Konzentration liegt in der Germaniumschicht unterhalb der Nachweisgrenze von etwa $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ [207]. Nur im oberflächennahen Bereich (s. kleines Bild) ist eine Anreicherung des Surfactants aufgrund der Segregation zu erkennen. Der Anstieg der Germaniumkonzentration an der Oberfläche und an der Grenzfläche zum Substrat ist auf eine Änderung der Sputterrate an der jeweiligen Grenzfläche zurückzuführen. An der Grenzfläche zum Substrat wird auch eine Sb-Konzentration oberhalb der Nachweisgrenze gemessen. Ob das ebenfalls durch die Änderung der Sputterrate kommt oder ob tatsächlich eine Anreicherung von Antimon z.B. an Defekten vorliegt, ist hier nicht eindeutig zu klären. Insgesamt bleibt festzuhalten, dass die verstärkte Oberflächensegregation bei hohen Wachstumstemperaturen auch bei der SME Si(001) zu Dotierungen unterhalb von $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ führt.

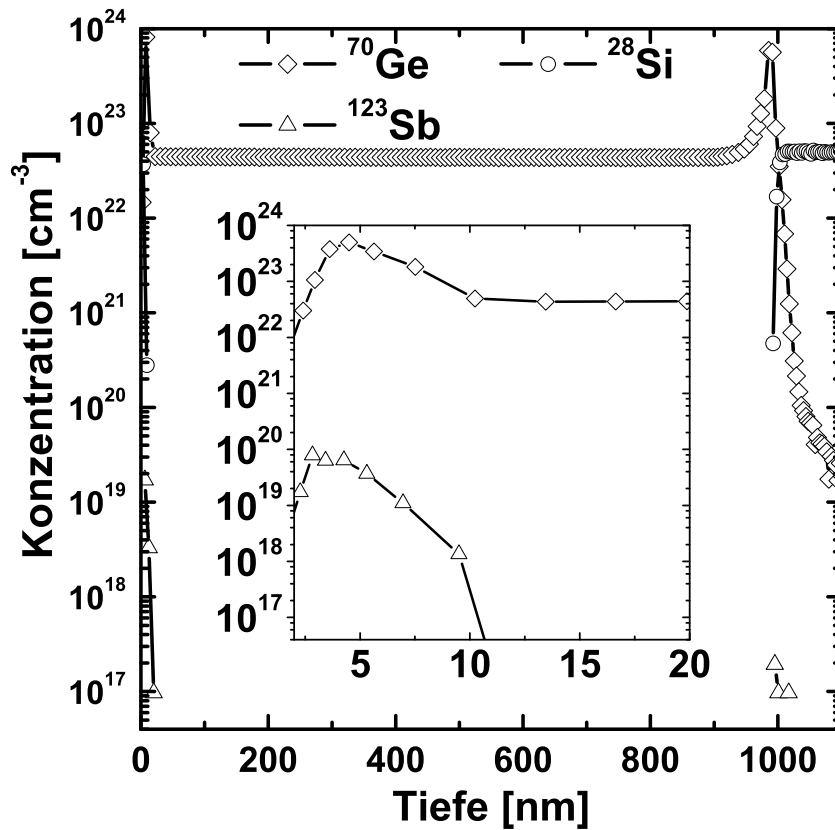


Abb. 7.24: SIMS-Tiefenprofil einer 1 μm dicken Germaniumschicht auf Si(001): Die Sb-Konzentration liegt in der Germaniumschicht unterhalb der Nachweisgrenze von etwa $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$. Der oberflächennahe Bereich (s. kleines Bild) wurde mit höherer Auflösung extra untersucht. Hier ist eine Anreicherung des Surfactants aufgrund der Segregation zu erkennen. Der Anstieg der Germaniumkonzentration an der Oberfläche und an der Grenzfläche zum Substrat ist auf eine Änderung der Sputterrate an der jeweiligen Grenzfläche zurückzuführen. An der Grenzfläche zum Substrat wird auch eine Sb-Konzentration oberhalb der Nachweisgrenze gemessen. Ob das ebenfalls durch die Änderung der Sputterrate kommt oder ob tatsächlich eine Anreicherung von Antimon z.B. an Defekten vorliegt, ist hier nicht eindeutig zu klären.

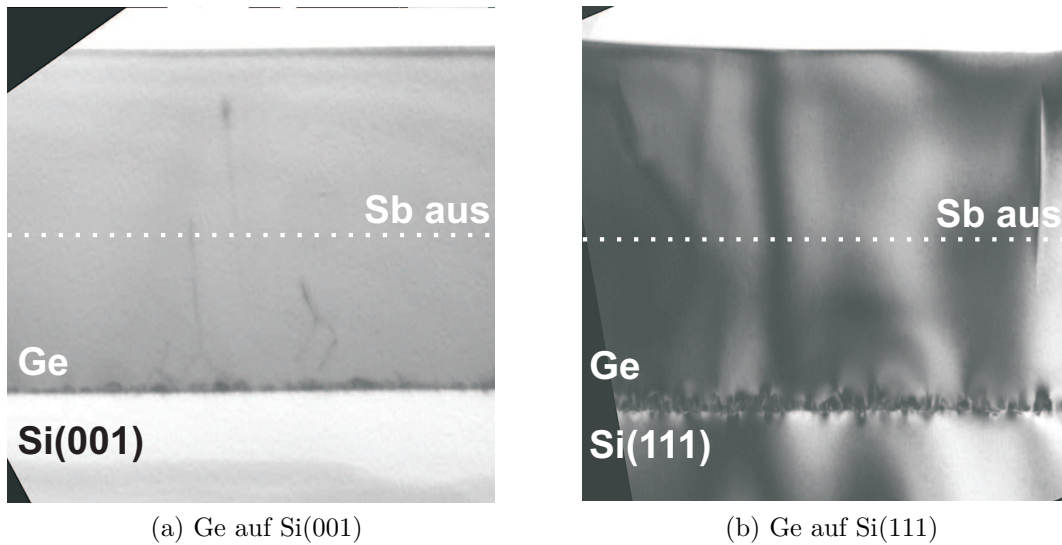
7.3.1 Intrinsische Germaniumschichten mit SME?

Aus der Literatur ist bekannt, dass eine vollständige Desorption des Antimons während oder nach der SME bei etwa 30 nm dicken Germaniumschichten zu einer sehr starken Rauigkeit führt [208]. Die Ergebnisse der Messung der schichtdickenabhängigen Restverzerrung (s. Abschnitte 6.3 und 7.2.2) legen jedoch nahe, dass nach weitgehender Relaxation der Germaniumschichten kein Sb-Angebot mehr vonnöten ist. Man könnte also die SME nutzen, um die Relaxation der Gitterfehlpassung zu erreichen, und dann zur surfactantfreien Homoepitaxie von Germanium übergehen. Damit würde möglicherweise eine Oberflächenanreicherung des Antimons vermieden, aus der sich die Hintergrunddotierung speist, und ein Weg zu intrinsischen Germaniumfilmen eröffnet. In dem folgenden Experiment wurden daher die Auswirkungen des Abschaltens des Sb-Flusses sowie von Desorptionsschritten während des Wachstums von Germanium auf Si(001) und Si(111) anhand der strukturellen Filmeigenschaften und der Sb-Konzentration untersucht.

Prozessablauf	Substrat	
für alle: $T_G = 670\text{ }^\circ\text{C}$	Si(111)	Si(001)
kontinuierliches Sb-Angebot bis 1 μm Ge	A111	A001
Sb aus nach 500 nm Ge, Ge-Epi o. Sb bis 1 μm	B111	B001
Sb aus nach 400 nm Ge, 45 min. Sb-Desorption bei T_G , Ge o. Sb Epi bis 800 nm	C111	C001

Tab. 7.2: Übersicht über die Prozessabläufe: Neben der Standardvariante (A) wurde zum einen der Sb-Fluss während des Wachstums unterbrochen (Variante B) und zum anderen eine Wachstumsunterbrechung zur Sb-Desorption eingeführt (Variante C).

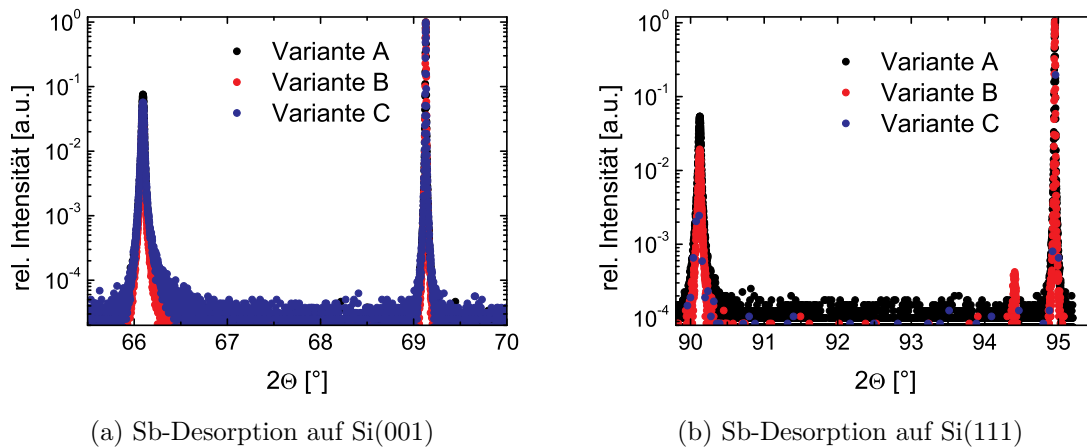
Tabelle 7.2 gibt einen Überblick über die Prozessabläufe. Neben der Standardvariante (A) wurde einmal der Sb-Fluss während des Wachstums abgeschaltet (Variante B) und zum anderen eine Wachstumsunterbrechung zur Sb-Desorption eingeführt (Variante C). *In situ* RHEED-Untersuchungen ergaben für alle Proben eine 2×1 -rekonstruierte Oberfläche. Die strukturellen Eigenschaften der Proben wurden anhand von TEM-Querschnittsproben und mit hochaufgelösten XRD-Messungen untersucht. Abbildung 7.25 zeigt TEM-Aufnahmen von Proben, die nach Variante B gewachsen wurden. Es ist keine strukturelle Veränderung durch das Abschalten des Sb-Flusses zu erkennen. Die Röntgenmessungen zeigen ebenfalls keine Abweichungen zwischen den Proben der Varianten A-C, wie in Abbildung 7.26 dargestellt ist.



(a) Ge auf Si(001)

(b) Ge auf Si(111)

Abb. 7.25: TEM-Querschnittsaufnahmen von $1\ \mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten auf Si(001) (Abb. 7.25a) und Si(111) (Abb. 7.25b): Man erkennt im Vergleich zu Proben der Variante A keinen Einfluss des Abschaltens des Sb-Flusses auf die strukturellen Eigenschaften.



(a) Sb-Desorption auf Si(001)

(b) Sb-Desorption auf Si(111)

Abb. 7.26: Hochauflöste $\omega/2\Theta$ -Scans der (004)-Reflexe von $1\ \mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten auf Si(001) (Abb. 7.26a) und der (333)-Reflexe von $1\ \mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten auf Si(111) (Abb. 7.26b): Der kleine Zusatzpeak bei $2\Theta = 94,4^\circ$ in der Messkurve zu Variante B in Abb. 7.26b ist ein Messartefakt. Insgesamt ist kein Einfluss der Variationen in den Prozessabläufen auf die strukturellen Eigenschaften zu erkennen.

In den SIMS-Messungen der Proben zeigen sich ähnliche Konzentrationsverläufe wie in Abb. 7.24. Einzig in der Sb-Konzentration an der Oberfläche zeigen sich Unterschiede. Abbildung 7.27 zeigt die integrierten Sb-Oberflächenkonzentrationen, die aus den SIMS-Profilen ermittelt wurden, aufgetragen über der Desorptionszeit für die jeweilige Prozessvariante. Nach [209] kann man für den Zusammenhang zwischen Oberflächenkonzentration $N(t)$ und Desorptionszeit t einen exponentiellen Zusammenhang annehmen:

$$N(t) = N_0^{hkl} e^{-K_D^{hkl} t} \quad (7.2)$$

Dabei sind N_0^{hkl} die Anfangskonzentration und K_D^{hkl} die temperaturabhängige Zeitkonstante des Desorptionsprozesses. Die durchgezogenen Linien in Abb. 7.27 repräsentieren die optimalen Fitkurven nach Gl. 7.2. Für die Sb-Anfangskonzentration ergeben sich $N_0^{111} = 0,88 \text{ ML}$ und $N_0^{001} = 0,83 \text{ ML}$, was in guter Übereinstimmung mit Literaturwerten für vollständig mit Antimon abgesättigte, 2×1 -rekonstruierte Germaniumoberflächen ist [210]. Die Zeitkonstante für die Desorption beträgt $K_D^{111} \approx K_D^{001} = 8 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$. Sie liegt damit im Bereich der Literaturwerte für Silizium $K_D^{111} = K_D^{001} = 1 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ [209] und Germanium $K_D^{001} = 4,5 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ [211].

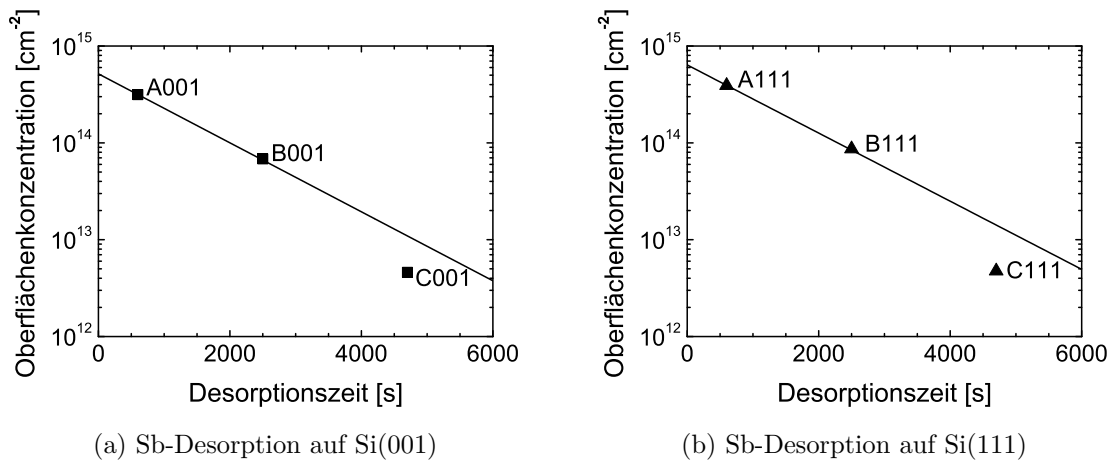


Abb. 7.27: Sb-Oberflächenkonzentration aus SIMS-Messungen an Germaniumschichten auf Si(001) (Abb. 7.27a) und Si(111) (Abb. 7.27b): Das Abschalten des Sb-Flusses und die Desorption führen zu einer 100fach reduzierten Oberflächenkonzentration. Die durchgezogenen Linien stellen exponentielle Fitkurven dar, die als Zeitkonstante für die Desorption einen Wert von etwa $K_D^{001} \approx K_D^{111} = 8 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ ergeben. Dieser Wert stimmt gut mit Literaturwerten für Silizium [209] und Germanium [211] überein.

Das Abschalten des Sb-Flusses und die Desorption führen zu einer 100fach reduzierten Oberflächenkonzentration. Die verbliebenen $0,01 \text{ ML}$ Antimon stellen jedoch ein ausreichend großes Reservoir dar, um eine Germaniumschicht von $1 \mu\text{m}$ Dicke mit $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$

zu dotieren. Eine weitere Reduktion der Sb-Oberflächenkonzentration durch längere Desorptionszeiten ist nicht zu erwarten, da ein kleiner Bruchteil der Sb-Atome stärkere Bindungen zur Oberfläche aufweist und daher erst bei Temperaturen oberhalb von $800\text{ }^{\circ}\text{C}$ desorbiert [212]. Alternativ zur Desorption bei höheren Temperaturen ist es auch möglich, nach der Wachstumsunterbrechung und weitgehender Sb-Desorption (Variante C) die Wachstumstemperatur abzusenken, um bei der folgenden Germaniumhomoepitaxie die Segregation des Antimon an die Oberfläche zu unterdrücken. Diese Methode führt ebenfalls zu keinerlei Einbußen in der strukturellen Qualität [?]. Ob sich so tatsächlich ein intrinsischer Bereich in der Germaniumschicht erzeugen lässt und welchen Einfluss eine vergrabene Sb-Schicht auf die elektrischen Eigenschaften der Germaniumschicht hat, ist noch zu klären.

7.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde erstmals die SME von Germanium auf (001)-orientierten Siliziumsubstraten bei hohen Wachstumstemperaturen beschrieben. Der Vergleich der strukturellen Eigenschaften $1\mu\text{m}$ dicker Schichten in (001)- und (111)-Orientierung zeigt keine wesentlichen Unterschiede. In beiden Fällen wird die Gitterfehlpassung durch ein periodisches Versetzungsnetzwerk an der Grenzfläche zum Substrat kompensiert. Im Falle der (001)-Orientierung handelt es sich um ein quadratisches Netzwerk aus vollständigen Stufenversetzungen, im Falle der (111)-Orientierung um ein trigonales Netzwerk aus 90° -Partialversetzungen. Sowohl Burgersvektor als auch Linienrichtung der Versetzungen liegen parallel zur Grenzfläche.

Eine wesentliche Rolle für den Relaxationsmechanismus spielt die Entwicklung der Filmtopografie während des Wachstums. Nach dem Lage-für-Lage-Wachstum der ersten Monolagen bildet der Film eine Mikro-Rauigkeit aus, deren Form von der Substratorientierung und im Falle der (001)-Orientierung vom Sb-Bedeckungsgrad abhängig ist. Die Gräben in der Filmoberfläche sind Orte maximaler Spannung und daher bevorzugte Nukleationszentren für Versetzungen. Aufgrund der hohen Dichte der Nukleationsorte können entsprechend viele Versetzungen entstehen, die die Gitterfehlpassung schlagartig ausgleichen und ein dichtes, periodisches Netzwerk bilden. Da die Versetzungen in unmittelbarer Nähe der Grenzfläche entstehen, können parallel zur Grenzfläche liegende Gleitsysteme aktiviert werden. Damit sind auch keine den Film durchstoßende Versetzungsarme nötig. Durch den weitgehenden Abbau der Spannung glättet sich der Film und kann Lage-für-Lage weiterwachsen.

Die Wirkung des Antimon als Surfactant liegt dabei zunächst darin, dass es, verglichen mit der surfactantfreien Epitaxie, das Lage-für-Lage Wachstum verlängert, wobei kinetische Effekte dominieren dürften. In der mikro-rauen Phase beeinflusst der Surfactant die Oberflächenenergieanisotropie, was auf (001)-orientierten Substraten bei hohem Sb-Bedeckungsgrad zur Ausbildung einer speziellen Oberflächenfacettierung führt, die die Entstehung von vollständigen Stufenversetzungen begünstigt.

Nachdem der größte Teil der Spannung durch die Bildung des Versetzungsnetzwerkes abgebaut ist, bleibt aber noch eine Restspannung elastisch im Film gespeichert. Mit steigender Filmdicke wird immer weniger Spannung durch elastische Verzerrung akkumuliert. Der Rest der Spannung muss durch plastische Relaxation, also über die Bildung weiterer Versetzungen abgebaut werden. Möglicherweise liegt hier die Ursache für die in $1\ \mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten beobachteten Versetzungsdichten.

Beim Abkühlen der Proben nach dem Wachstum kann es aufgrund der unterschiedlichen thermischen Ausdehnung von Schicht und Substrat ebenfalls zu plastischer Relaxation kommen. Hier wurde festgestellt, dass dies nur für (111)-orientierte Proben der Fall ist. Proben mit (001)-Orientierung speichern die thermisch induzierte Spannung komplett elastisch.

Durch den schlagartigen Spannungsabbau wird die üblicherweise beobachtete Eindiffusion von Silizium in die Germaniumschicht unterdrückt, so dass die Herstellung von abrupten Heteroübergängen möglich ist. Eine Orientierungsabhängigkeit dieses Verhaltens wurde nicht festgestellt.

Die Hintergrunddotierung durch den Einbau des Surfactants während des Wachstums liegt auch für (001)-orientierte Proben unterhalb von $5 \times 10^{16}\ \text{cm}^{-3}$, was für die Herstellung elektronischer Bauelemente ausreichend ist. Es wurde zum ersten Mal demonstriert, dass ein Übergang von SME zur Germaniumhomoepitaxie ohne Surfactant während des Wachstums ohne Einbußen bei der strukturellen Qualität der Schichten möglich ist. Damit ist auch gezeigt, dass sich der Einsatz von Surfactants und die Herstellung von intrinsischen Germaniumschichten auf Siliziumsubstraten nicht prinzipiell ausschließen.

8 Ladungsträgerbeweglichkeit in Germaniumschichten auf Si(111) und Si(001)

Neben der strukturellen Beschaffenheit sind die elektrischen Eigenschaften epitaktischer Germaniumschichten auf Silizium von größter Bedeutung für die Anwendung in elektronischen oder optoelektronischen Bauelementen. Abgesehen von der prozessbedingten Dotierung der Schichten (s. Abschnitt 7.3) ist die Ladungsträgerbeweglichkeit ein wichtiger Parameter. So stellt sich die Frage, ob die Beweglichkeit der Ladungsträger durch die verbliebenen die Schicht durchdringenden Defekte im Vergleich zu Bulk-Germanium beeinträchtigt wird. Daher wurden in diesem Kapitel die Elektronen- und Löcherbeweglichkeiten in Germaniumschichten auf Si(001) und Si(111) mit Hilfe von Hallmessungen untersucht.

8.1 Theorie der Hall-Messung

Im Folgenden werden die wesentlichen Zusammenhänge zu Ladungsträgerbeweglichkeit und Hall-Messung dargestellt. Eine ausführlichere Beschreibung findet sich in [213, 214].

8.1.1 Driftbeweglichkeit

Bei schwachen elektrischen Feldern ist die Driftgeschwindigkeit von Ladungsträgern in einem Halbleiterkristall proportional zur elektrischen Feldstärke:

$$\vec{v}_d = \mu \vec{E} \quad (8.1)$$

Die Proportionalitätskonstante μ wird als Driftbeweglichkeit bezeichnet. Die Bewegung der Ladungsträger wird durch Streuprozesse an ionisierten Störstellen und Phononen dominiert. Daher ist die Beweglichkeit mit der mittleren Flugzeit zwischen zwei Stößen τ_m und der mittleren freien Weglänge und λ_m verknüpft:

$$\mu = \frac{q\tau_m}{m^*} = \frac{q\lambda_m}{\sqrt{3kTm^*}} \quad (8.2)$$

Über die effektive Masse der Ladungsträger m^* geht die Bandstruktur des Halbleiters in Gl. 8.2 ein.

In der Regel sind mehrere Streumechanismen im Halbleiter wirksam. Für die mittleren Flugzeiten gilt dann:

$$\frac{1}{\tau_m} = \frac{1}{\tau_{m_1}} + \frac{1}{\tau_{m_2}} + \dots \quad (8.3)$$

Die resultierende Beweglichkeit berechnet sich nach der Matthiessenschen Regel:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2} + \dots \quad (8.4)$$

8.1.2 Leitfähigkeitsbeweglichkeit

Die Leitfähigkeit σ eines Halbleiters ist gegeben durch:

$$\sigma = q(n\mu_n + p\mu_p) \quad (8.5)$$

Wenn ein Ladungsträgertyp überwiegt, z. B. $n\mu_n \gg p\mu_p$, ist:

$$\sigma = qn\mu_n \quad (8.6)$$

Die Konstanten μ_n bzw. μ_p werden entsprechend als Leitfähigkeitsbeweglichkeiten der Elektronen bzw. der Löcher bezeichnet. Es konnte gezeigt werden, dass für Germanium und Silizium die Drift- und Leitfähigkeitsbeweglichkeiten übereinstimmen [215].

8.1.3 Halleffekt und Hallbeweglichkeit

Der Halleffekt wurde erstmals 1879 von E. Hall beschrieben [216]. Er bietet eine relativ einfache Möglichkeit, die Ladungsträgerbeweglichkeit in Halbleitern zu bestimmen. Der Halleffekt bewirkt, dass sich in einem stromdurchflossenen Halbleiterplättchen, das in ein Magnetfeld gebracht wird, senkrecht zum Strom und zum Magnetfeld ein elektrisches Feld, das Hallfeld, aufbaut. Es stellt sich ein Gleichgewicht zwischen der Lorentzkraft, die für die Ablenkung der Ladungsträger im Magnetfeld verantwortlich ist, und der Coulombkraft ein, die dem entstehenden Ladungsträgerüberschuss entgegenwirkt. Im stationären Zustand stellt sich in einer Probe der Dicke h senkrecht zum Strom I und zum Magnetfeld B folglich die Spannung U_H ein:

$$U_H = R_H \frac{BI}{h} \quad (8.7)$$

Der Proportionalitätsfaktor R_H wird als Hallkoeffizient bezeichnet. Im Allgemeinen ist R_H mit $b = \frac{\mu_n}{\mu_p}$:

$$R_H = r_H \frac{(p - b^2n) + (\mu_n B)^2(p - n)}{q[(p - bn)^2 + (\mu_n B)^2(p - n)^2]} \quad (8.8)$$

Für den Fall $B \ll \frac{1}{\mu_n}$, was für Germanium mit $B \ll 2,5 T$ erfüllt ist, ergibt sich:

$$R_H = r_H \frac{(p - b^2n)}{q(p - bn)^2} \quad (8.9)$$

Dominiert in einer Schicht ein Ladungsträgertyp, so dass beispielsweise $n\mu_n \gg p\mu_p$ ist, vereinfacht sich die Gleichung 8.9 für den Hallkoeffizienten zu:

$$R_H = -\frac{r_H}{qn} \quad (8.10)$$

Die Hallbeweglichkeit $\mu_{Hn,p}$ ist für den jeweiligen Leitungstyp definiert als:

$$\mu_{Hn,p} = |R_H| \sigma = r_H \mu_{n,p} \quad (8.11)$$

Sie unterscheidet sich also von der Leitfähigkeitsbeweglichkeit um den Hall-Streufaktor $r_H = \langle \tau_m^2 \rangle / \langle \tau_m \rangle^2$, der die Energieabhängigkeit der Streumechanismen im untersuchten Halbleiter berücksichtigt. Der Streufaktor ist abhängig von den im Halbleiterkristall wirksamen Streumechanismen und kann Werte zwischen 1 und 2 annehmen. Für Gitterstreuung gilt $r_H = \frac{3}{8}\pi = 1,18$, für Streuung an ionisierten Störstellen $r_H = \frac{315}{512}\pi = 1,93$ und für Streuung an neutralen Störstellen $r_H = 1$. Durch die Temperaturabhängigkeit der Streumechanismen ändert sich auch der Streufaktor mit der Temperatur. Da bei Raumtemperatur die Gitterstreuung überwiegt, erwartet man hier einen Streufaktor von $r_H = 1,18$. Bei tiefen Temperaturen überwiegt die Störstellenstreuung, so dass man meist einen Streufaktor von $r_H = 1,93$ annimmt. Experimentelle Daten für Germanium zeigen, dass der Streufaktor für Elektronen zwischen 50 und 300 K in sehr guter Näherung mit $r_H = 1$ abgeschätzt werden kann, während der Streufaktor für Löcher zwischen $r_H = 1,1$ bei 50 K und $r_H = 1,7$ bei 300 K variiert [217]. In vielen Fällen ist der genaue Streufaktor einer Probe nicht bekannt und die experimentelle Bestimmung schwer realisierbar. Daher wurden die in dieser Arbeit gemessenen Hallbeweglichkeiten immer mit Literaturwerten für Hallbeweglichkeiten und nicht mit Driftbeweglichkeiten verglichen.

Für Hallmessungen an einem System von i Schichten mit der Dicke h_i , der Leitfähigkeit σ_i und dem Hallkoeffizienten R_{Hi} ergibt sich die Gesamtleitfähigkeit nach:

$$\sigma = \sum_i \frac{h_i \sigma_i}{h} \quad (8.12)$$

Dabei ist $h = \sum_i h_i$. Der resultierende Hallkoeffizient ist dann:

$$R_H = \sum_i R_{Hi} \frac{h_i}{h} \left(\frac{\sigma_i}{\sigma} \right)^2 \quad (8.13)$$

Das Gesamtsystem betrachtet man als Parallelschaltung der einzelnen Schichten [218, 219]. Die genaue Form der Gleichungen 8.12 und 8.13 hängt dann davon ab, wie der jeweilige Leitungsmechanismus in den einzelnen Schichten aussieht.

8.2 Durchführung der Hall/van-der-Pauw-Messungen

Aufgrund der inhärenten n-Dotierung durch den Einbau von Antimon bei der SME wurden die Germaniumschichten für die Hallmessungen auf p-dotierten hochohmigen (B, $> 2000 \Omega cm$) Si(111) und Si(001)-Substraten hergestellt, um eine Isolation der Germaniumschicht vom Substrat durch die Raumladungszone des pn-Übergangs zu erreichen [220]. Aus diesen Wafern wurden $6 \times 6 mm^2$ große Proben mit auf den Seitenmitten aufgedampften ohmschen Sb/Au-Kontakten in van-der-Pauw Geometrie prozessiert [221, 222]. Für p-dotierte Germaniumschichten wurden niedrig n-dotierte (Sb, $5 - 10 \Omega cm$) Si(111)- und (P, $> 1000 \Omega cm$) Si(001)-Substrate verwendet. Ohmsche Kontakte wurden durch Aufdampfen von Aluminium in analoger Probengeometrie hergestellt.

Variationen in der Lage und den Abmessungen der Kontakte gegenüber der idealen Probengeometrie führen zu Fehlern in den Messgrößen [221, 222]. Für die in dieser Arbeit verwendeten Proben ergeben sich Fehler von $\pm 10\%$ in σ_s und R_{H_s} und $\pm 15\%$ für die Hallbeweglichkeit. Zusätzliche Fehler können durch thermo- und galvanomagnetische Effekte wie den Ettingshausen-, den Nernst- und den Righi-Leduc-Effekt entstehen und zu Spannungen führen, die die eigentliche Hallspannung überlagern. Durch eine geeignete Durchführung der Messungen können Beiträge des Nernst- und Righi-Leduc-Effektes jedoch ausgeschlossen werden. Fehler durch den Ettingshauseneffekt können als klein gegenüber den Fehlern durch geometrische Abweichungen angesehen werden.

Für die Messungen stand ein automatisierter Messaufbau (Keithley Instruments) mit magnetischen Flussdichten bis $0,6 T$ zur Verfügung, an dem kombinierte Schichtwiderstands- und Hallmessungen im Temperaturbereich von $77 - 400 K$ durchgeführt werden konnten. Dabei wurden der spezifische Schichtleitwert $\sigma_s = \sigma h$ und der Schichthallkoeffizient $R_{H_s} = \frac{R_H}{h}$ bestimmt.

8.3 Elektronenbeweglichkeit

Für die SME von Germanium auf Si(111) bei hohen Wachstumstemperaturen ist die Elektronenhallbeweglichkeit bereits vor dieser Arbeit analysiert worden [141, 176, 177]. Es zeigte sich, dass die Eigenschaften der Germaniumschichten denen von Bulk-Germanium entsprechender Dotierung gleichen. Die Elektronenbeweglichkeit ist im Wesentlichen durch Streuung am Kristallgitter und an ionisierten Störstellen und nicht durch Streuung an Defekten bestimmt. In dieser Arbeit wurden erstmals die Hallbeweglichkeiten in Germaniumschichten, die mit SME bei hohen Wachstumstemperaturen auf Si(001) hergestellt wurden, untersucht und mit den Ergebnissen für die (111)-Orientierung verglichen.

Messungen an $1\ \mu\text{m}$ dicken Schichten ergaben für (111)-orientierte Proben Elektronen-Hallbeweglichkeiten von $3176\ \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ bei einer Ladungsträgerkonzentration von $3,3 \times 10^{16}\ \text{cm}^{-3}$. Das bestätigt die früher erzielten Ergebnisse [141, 176, 177] und entspricht den für Bulk-Germanium vergleichbarer Dotierung gemessenen Werten [223]. Bei (001)-orientierten Proben wurden Elektronenhallbeweglichkeiten von $1719\ \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ bei einer Ladungsträgerkonzentration von $3,0 \times 10^{16}\ \text{cm}^{-3}$ gemessen. Die Ladungsträgerkonzentrationen stimmen gut mit den Ergebnissen der SIMS -Untersuchungen für die Sb-Dotierung überein. Die deutlich geringere Beweglichkeit für die (001)-Orientierung könnte durch eine erhöhte Streuung an Defekten aufgrund einer schlechteren strukturellen Qualität der Schichten erklärt werden. Allerdings gibt es aus den strukturellen Untersuchungen keinerlei Hinweise darauf. Daher müssen andere Ursachen in Betracht gezogen werden.

Bei Schichtwiderstands- und Hallmessungen wird die physikalische Schichtdicke der analysierten Probe auch als die Dicke der elektrisch aktiven Schicht betrachtet. Das (oftmals erwünschte) Vorhandensein von Verarmungszonen an pn-Übergängen oder auch an Oberflächen kann jedoch dazu führen, dass die elektrisch aktive Schichtdicke erheblich geringer ist als der physikalische Wert, so dass die Ergebnisse für die Ladungsträgerkonzentration verfälscht werden. Mit Hilfe von schichtdickenabhängigen Messungen, bei denen die Probe sukzessive abgedünnt wird, kann die Dicke des elektrisch aktiven Bereiches festgestellt werden.

Weiterhin wird in der Regel angenommen, dass die elektrischen Eigenschaften der untersuchten Probe vertikal und lateral homogen sind. Diese Annahme kann dadurch verletzt werden, dass eine inhomogene Verteilung der Dotieratome vorliegt [122]. Es kann auch zur Ausbildung von Inversionsgebieten an Grenzflächen kommen, wodurch dann mehrere Bereiche mit unterschiedlichem Leitungstyp und verschiedenen Ladungsträgerkonzentrationen und -beweglichkeiten in der Probe vorhanden sind [122, 224]. Ebenso kann es bei unzureichender Entkopplung von Schicht und Substrat zu Leckströmen über die Raumladungszonen kommen [122, 220]. Beide Effekte führen dazu, dass die Probe als System von mehreren gestapelten Schichten unterschiedlicher Leitfähigkeit betrachtet werden muss, was die Interpretation der Messergebnisse erschwert [218, 219]. Die übliche Ein-Schicht-Interpretation kann bei

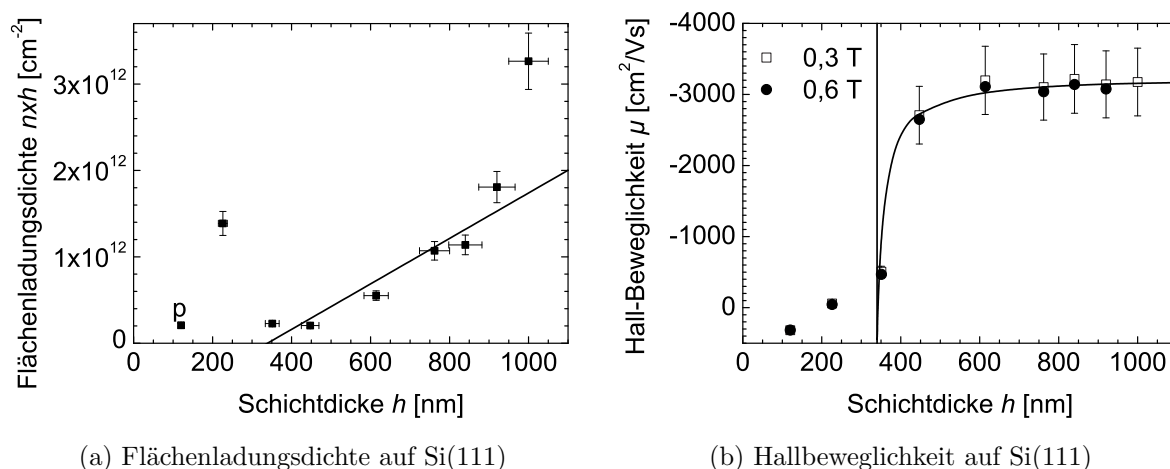
der Untersuchung von Mehrschichtsystemen zu falschen Ladungsträgertypen, scheinbar erhöhten oder reduzierten Beweglichkeiten und Ladungsträgerkonzentrationen und auch zu stark magnetfeldabhängigen Messergebnissen führen.

Zur Überprüfung, ob die Unterschiede in den Beweglichkeiten der (111)- und (001)-Proben durch vertikale Inhomogenitäten verursacht werden, und zur genaueren Verifikation der Ladungsträgerkonzentrationen wurden schichtdicken- und magnetfeldabhängige Schichtwiderstands- und Hallmessungen durchgeführt. Dazu wurden einige Proben vor der Sb/Au-Metallisierung durch Ätzen mit Ar^+ -Ionen abgedünnt. Die Schichtdicke der dünnsten Proben wurde mit spektraler Ellipsometrie kontrolliert, so dass ein Überätzen ausgeschlossen werden kann. Für die (001)-Orientierung wurde zusätzlich eine $2\ \mu\text{m}$ dicke Germaniumschicht gewachsen, deren Messergebnisse in den unten dargestellten Profilen enthalten sind. An diesen Probensätzen konnten dann Profile der Flächenladungsdichte $n \cdot h$, des Schichthallkoeffizienten $R_{H_s} = \frac{R_H}{h}$ und der Beweglichkeit $\mu_H = R_{H_s} \cdot \sigma_s$ mit $\sigma_s = \sigma h$ aufgenommen werden.

Abbildung 8.1 zeigt die Ergebnisse für die (111)-Probe. Die gemessenen Flächenladungsdichten sind in Abbildung 8.1a dargestellt. Für eine homogen dotierte Probe wird ein linearer Verlauf von $n \cdot h$ über h erwartet, so dass mit einem linearen Fit der Daten die Dotierung aus der Steigung der Geraden und die elektrisch aktive Schichtdicke aus der Nullstelle ermittelt werden kann. Für die (111)-Probe ergibt sich eine Dotierung von $2,6 \times 10^{16}\ \text{cm}^{-3}$ und eine elektrisch aktive Schichtdicke von $660\ \text{nm}$. Beide Werte stimmen gut mit früheren Daten aus Kapazitäts-Spannungsmessungen überein [176]. Die übrigen $340\ \text{nm}$ der Germaniumschicht müssen folglich als Summe der Raumladungszone auf der Germaniumseite des pn-Übergangs und einer eventuellen Oberflächenverarmungszone betrachtet werden. Für geringe Schichtdicken um $100\ \text{nm}$ wird bereits p-Leitung gemessen, was auf einen Stromfluss über das Substrat hindeutet. Allerdings liegt die gemessene Flächenladungsdichte von $2 \times 10^{11}\ \text{cm}^{-2}$ um viele Größenordnungen über dem der Substratdotierung entsprechenden Wert von $1,6 \times 10^5\ \text{cm}^{-2}$.

Der Verlauf der Hallbeweglichkeit ist in Abb. 8.1b dargestellt, wobei die Elektronenbeweglichkeiten zur besseren Übersicht mit negativem Vorzeichen oberhalb der Dickenachse eingezeichnet sind. Die senkrechte Linie markiert die aus dem Verlauf der Flächenladungsdichte bestimmte Grenze des verarmten Bereiches der Germaniumschicht. Für größere Schichtdicken sättigt die Beweglichkeit bei etwa $3200\ \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$. Mit Erreichen des verarmten Bereiches fällt die Beweglichkeit steil ab und wechselt für geringe Schichtdicken schließlich das Vorzeichen. Sie nähert sich dabei der erwarteten Beweglichkeit des Substrates von etwa $450\ \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ [225]. Eine Abhängigkeit der Beweglichkeit von der magnetischen Flussdichte ist nicht zu erkennen. Die durchgezogene Linie in Abb. 8.1b entspricht dem errechneten Verlauf der Hallbeweglichkeit einer n-dotierten Germaniumschicht auf einem p-dotierten Siliziumsubstrat mit folgenden Parametern: $\mu_{\text{Sub}} = 450\ \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$, $p_{\text{Sub}} = 6 \times 10^{12}\ \text{cm}^{-3}$, $h_{\text{Sub}} = 525\ \mu\text{m}$, $\mu_{\text{Ge}} = 3250\ \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$, $n_{\text{Ge}} = 2,6 \times 10^{16}\ \text{cm}^{-3}$. Dabei wurde angenommen, dass beide Schichten

parallel geschaltet sind (s. Abschnitt 8.1.3). Die errechnete Kurve gibt den Verlauf der Messdaten recht gut wieder, so dass die Annahme von Leckströmen über den pn-Übergang zwischen Schicht und Substrat bei geringen Dicken und damit vollständiger Verarmung der Germaniumschicht als sinnvoll angesehen werden kann.



(a) Flächenladungsdichte auf Si(111)

(b) Hallbeweglichkeit auf Si(111)

Abb. 8.1: Flächenladungsdichte und Hallbeweglichkeit der (111)-orientierten Probe (s. Abb. 8.1a bzw. 8.1b): Die durchgezogene Linie in Abb. 8.1a repräsentiert einen linearen Fit der Messdaten. Daraus ergeben sich eine Dotierung von $2,6 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ und eine elektrisch aktive Schichtdicke von 660 nm . Beide Werte stimmen gut mit früheren Daten aus Kapazitäts-Spannungsmessungen überein [176]. Für geringe Schichtdicken um 100 nm wird bereits p-Leitung gemessen, was auf einen Stromfluss über das Substrat hindeutet. Der Verlauf der Hallbeweglichkeit ist in Abb. 8.1b dargestellt, wobei die Elektronenbeweglichkeiten zur besseren Übersicht mit negativem Vorzeichen oberhalb der Dickenachse eingezeichnet sind. Die senkrechte Linie markiert die aus dem Verlauf der Flächenladungsdichte bestimmte Grenze des verarmten Bereiches der Germaniumschicht. Die Fehlerbalken ergeben sich im Wesentlichen aus Abweichungen von der idealen Probengeometrie (s. Abschnitt 8.2). Für größere Schichtdicken sättigt die Beweglichkeit bei etwa $3200 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$. Mit Erreichen des verarmten Bereiches fällt die Beweglichkeit steil ab und wechselt für geringe Schichtdicken schließlich das Vorzeichen. Sie nähert sich dabei der erwarteten Beweglichkeit des Substrates von etwa $450 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ [225]. Eine Abhängigkeit der Beweglichkeit von der magnetischen Flussdichte ist nicht zu erkennen. Die durchgezogene Linie in Abb. 8.1b entspricht dem errechneten Verlauf der Hallbeweglichkeit einer n-dotierten Germaniumschicht auf einem p-dotierten Siliziumsubstrat mit folgenden Parametern: $\mu_{\text{Sub}} = 450 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$, $p_{\text{Sub}} = 6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, $h_{\text{Sub}} = 525 \mu\text{m}$, $\mu_{\text{Ge}} = 3250 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$, $n_{\text{Ge}} = 2,6 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Dabei wurde angenommen, dass beide Schichten parallel geschaltet sind (s. Abschnitt 8.1.3). Die errechnete Kurve gibt den Verlauf der Messdaten recht gut wieder, so dass die Annahme von Leckströmen über den pn-Übergang zwischen Schicht und Substrat bei geringen Dicken und damit vollständiger Verarmung der Germaniumschicht als sinnvoll angesehen werden kann.

Die Resultate der Untersuchung der (001)-Probe sind in Abbildung 8.2 zusammengefasst. Die Messung der Flächenladungsdichte (s. Abb. 8.2a) liefert eine Dotierung von $6,3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ und eine Breite der Verarmungszonen von 600 nm . Angesichts der höheren Dotierkonzentration erscheint es im Vergleich zur (111)-Probe widersprüchlich, dass eine größere Verarmungszone vorliegen soll. Die gemessene Dotierung liegt noch innerhalb des Fehlers der SIMS-Nachweisgrenze [207]. Bereits für Schichtdicken unterhalb von 400 nm wird p-Leitung bei einer Flächenladungsdichte von $5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ gemessen, was auf Stromfluss über das Substrat hindeuten könnte. Auch hier liegt die gemessene Flächenladungsdichte weit höher als für das Substrat zu erwarten wäre.

Die gemessenen Hall-Beweglichkeiten der (001)-Probe, die in Abbildung 8.2 dargestellt sind, zeigen einen nicht so eindeutigen Verlauf wie bei der (111)-Probe. Die Beweglichkeit steigt zwischen 600 und 1000 nm stetig an. Erst für die $2 \mu\text{m}$ dicke Schicht deutet sich eine Sättigung bei etwa $1950 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ an. Die Beweglichkeit von Bulk-Germanium vergleichbarer Dotierung beträgt $2350 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$, liegt also 20% darüber [223]. Mit Erreichen des verarmten Bereiches fällt die Beweglichkeit ab und wechselt das Vorzeichen. Sie liegt bei $300 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ und damit etwas unter dem für das Substrat erwarteten Wert von etwa $450 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ [225]. Eine Abhängigkeit der Beweglichkeit von der magnetischen Flussdichte ist nicht zu erkennen. Die gestrichelte Linie in Abb. 8.2b entspricht dem errechneten Verlauf der Hallbeweglichkeit unter der Annahme einer Parallelschaltung einer n-dotierten Germaniumschicht mit einem p-dotierten Siliziumsubstrat analog zum Vorgehen bei der (111)-Probe. Die Parameter sind: $\mu_{\text{Sub}} = 450 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$, $p_{\text{Sub}} = 6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, $h_{\text{Sub}} = 525 \mu\text{m}$, $\mu_{\text{Ge}} = 2350 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$, $n_{\text{Ge}} = 6,3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Man erkennt, dass dieses Modell die gemessenen Werte hier nicht gut beschreibt.

In einem alternativen Ansatz könnte man annehmen, dass an der Grenzfläche zwischen Schicht und Substrat eine Inversionsschicht vorliegt. Das resultierende Drei-Schicht-Modell (durchgezogene Linie) liefert eine recht gute Übereinstimmung mit den Messwerten. Die gewählten Parameter sind: $\mu_{\text{Sub}} = 450 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$, $p_{\text{Sub}} = 6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, $h_{\text{Sub}} = 525 \mu\text{m}$, $\mu_{\text{Ge}} = 2350 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$, $n_{\text{Ge}} = 6,3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $\mu_{\text{Inv}} = 18 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$, $p_{\text{Inv}} = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $h_{\text{Inv}} = 40 \text{ nm}$.

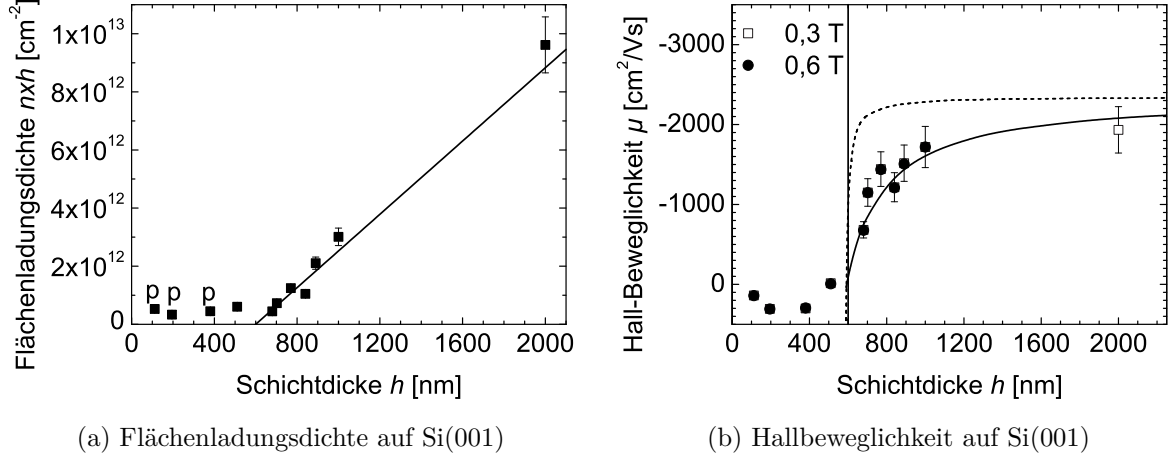


Abb. 8.2: Flächenladungsdichte und Hallbeweglichkeit der (001)-orientierten Probe (s. Abb. 8.2a bzw. 8.2b): Die durchgezogene Linie in Abb. 8.2a repräsentiert einen linearen Fit der Messdaten. Daraus ergeben sich eine Dotierung von $6,3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ und Verarmungszonenbreite von 600 nm . Bereits für Schichtdicken unterhalb von 400 nm wird p-Leitung bei einer Flächenladungsdichte von $5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ gemessen, was auf Stromfluss über das Substrat hindeuten könnte. Auch hier liegt die gemessene Flächenladungsdichte weit höher als für das Substrat zu erwarten wäre. Die gemessene Hallbeweglichkeit (s. Abb. 8.2) steigt zwischen 600 und 1000 nm stetig an. Erst für die $2 \mu\text{m}$ dicke Schicht deutet sich eine Sättigung bei etwa $1950 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ an. Mit Erreichen des verarmten Bereiches fällt die Beweglichkeit ab und wechselt das Vorzeichen. Sie liegt bei $300 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ und damit etwas unter dem für das Substrat erwarteten Wert von etwa $450 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ [225]. Eine Abhängigkeit der Beweglichkeit von der magnetischen Flussdichte ist nicht zu erkennen. Die gestrichelte Linie in Abb. 8.2b entspricht dem errechneten Verlauf der Hallbeweglichkeit unter der Annahme einer Parallelschaltung einer n-dotierten Germaniumschicht mit einem p-dotierten Siliziumsubstrat analog zum Vorgehen bei der (111)-Probe. Die Parameter sind: $\mu_{\text{Sub}} = 450 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$, $p_{\text{Sub}} = 6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, $h_{\text{Sub}} = 525 \mu\text{m}$, $\mu_{\text{Ge}} = 2350 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$, $n_{\text{Ge}} = 6,3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Man erkennt, dass das Modell die gemessenen Werte hier nicht gut beschreibt. In einem alternativen Ansatz könnte man annehmen, dass an der Grenzfläche zwischen Schicht und Substrat eine Inversionsschicht vorliegt. Das resultierende Drei-Schicht-Modell (durchgezogene Linie) liefert eine recht gute Übereinstimmung mit den Messwerten. Die gewählten Parameter sind: $\mu_{\text{Sub}} = 450 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$, $p_{\text{Sub}} = 6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, $h_{\text{Sub}} = 525 \mu\text{m}$, $\mu_{\text{Ge}} = 2350 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$, $n_{\text{Ge}} = 6,3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $\mu_{\text{Inv}} = 18 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$, $p_{\text{Inv}} = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $h_{\text{Inv}} = 40 \text{ nm}$.

Das einfache Schicht/Substrat-Modell reproduziert die Ergebnisse der (111)-Probe recht gut, solange die Verarmungszone noch nicht erreicht ist. Für geringere Schichtdicken gilt die Annahme des pn-Übergangs mit Leckströmen durch die Raumladungszone nicht mehr. Außerdem ist die Voraussetzung ohmscher Kontakte dann nicht mehr erfüllt. Die hohe Flächenladungsdichte, die für dünne Germaniumschichten gemessen wird, könnte auf die Versetzungen an der Grenzfläche zurückzuführen sein, die auch das elektrische Verhalten in n-Ge/p-Si(111) Dioden dominieren [130].

Zur Erklärung der Ergebnisse der (001)-orientierten Probe reicht das einfache Modell nicht mehr aus. Die Einbeziehung eines p-leitenden Bereiches im Germanium an der Grenzfläche zum Substrat führt zu einer besseren Reproduktion der Messdaten. Die Annahme einer Inversionsschicht an der Ge/Si-Grenzfläche beruht auf der Vorstellung, dass die am Ge/Si-Übergang vorliegenden ungepaarten Elektronen Zustände mit Energieniveaus in der Bandlücke generieren [226, 227]. Diese können analog zu Oberflächenzuständen zur Bildung einer Verarmungszone oder Inversionsschicht führen [228, 229, 230]. Die maximale Dichte versetzungsinduzierter Zustände an der Grenzfläche kann mit der Dichte ungepaarter Elektronen zu etwa $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ abgeschätzt werden [229, 231]. Die energetische Lage der Zustände in der Bandlücke und die tatsächlich wirksame Dichte von Grenzflächenzuständen sind allerdings in der Literatur umstritten [227, 232, 229, 233, 230]. Variationen in der energetischen Lage und der effektiven Zustandsdichte könnten auch das unterschiedliche Verhalten von (111)- und (001)-orientierten Proben erklären, wobei die Grenzflächenzustände dann nur bei (001)-Orientierung zu einer Inversionsschicht führen.

Aktuelle, noch unveröffentlichte Untersuchungen an n-Ge/n-Si(001) Heterodioden, die am Institut für Materialien und Bauelemente der Leibniz Universität Hannover durchgeführt werden, deuten darauf hin, dass diese Vorstellung einer Inversionsschicht an der Grenzfläche zutreffend ist [234]. Ein Vergleich der hier gewählten Parameter für die Inversionsschicht mit den zukünftigen Ergebnissen muss zeigen, ob der Ansatz zur Erklärung der gemessenen Hallbeweglichkeiten ausreichend ist.

Die etwas höhere Dotierung der Germaniumschichten, die bei der SME auf Si(001) im Vergleich zur (111)-Orientierung auftritt, wurde ebenfalls durch Messungen an n-Ge/n-Si Heterodioden bestätigt [234]. Sie könnte auf orientierungsabhängige Segregationskoeffizienten bzw. auf einen durch die jeweilige Oberflächenstruktur bedingten unterschiedlichen Einbau von Sb hindeuten. Um auf Si(001) geringere Dotierungen und damit höhere Beweglichkeiten zu erreichen, müsste die Wachstumstemperatur erhöht werden. Es lässt sich aber festhalten, dass die Elektronenbeweglichkeit in den mit SME hergestellten Germaniumschichten auf Si(001) genauso wenig durch strukturelle Defekte beeinträchtigt wird wie auf Si(111).

8.4 Löcherbeweglichkeit

Im Rahmen dieser Arbeit wurde erstmals die Löcherbeweglichkeit in mit SME hergestellten p-dotierten Germaniumschichten auf Si-Substraten untersucht. Die Ergebnisse zur Löcherhallbeweglichkeit in Germaniumschichten auf Si(111)-Substraten wurden bereits in [174] veröffentlicht. Die Untersuchungen für die (001)-Orientierung basieren auf einer Diplomarbeit, die am Institut für Materialien und Bauelemente durchgeführt wurde [235]. Deshalb erfolgt hier nur eine zusammenfassende Darstellung.

Aufgrund der inhärenten n-Dotierung durch den Surfactanteinbau während der SME kann p-leitendes Material nur durch Kompensationsdotierung erreicht werden. Dies wurde mittels Koverdampfen von Bor während des Schichtwachstums realisiert. Durch den Vergleich von AES-Messungen mit Schichtwiderstandsmessungen konnte eine vollständige Aktivierung des aufgedampften Bors nachgewiesen werden.

Die resultierende Löcherkonzentration N_{net} in einer kompensationsdotierten Schicht ist bestimmt durch die Differenz der Konzentrationen der ionisierten Akzeptoren und Donatoren:

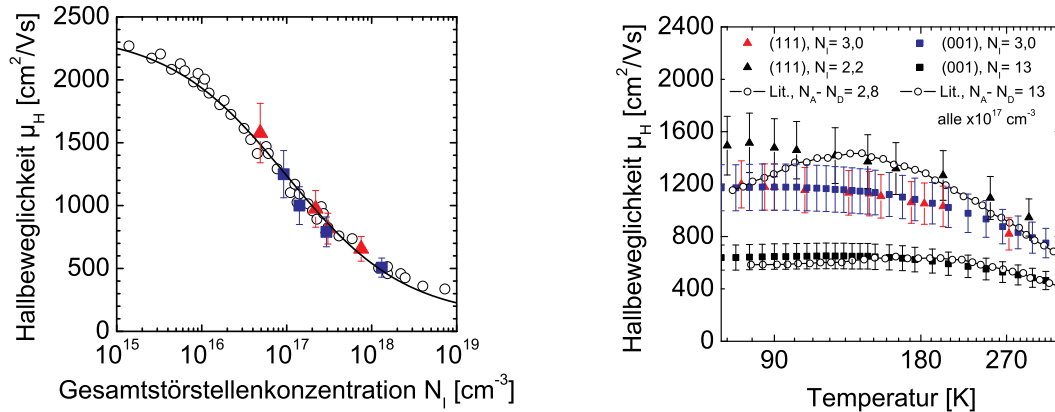
$$N_{net} = N_A - N_D \quad (8.14)$$

Für die Ladungsträgerbeweglichkeit ist jedoch die Streuung an der Gesamtkonzentration N_I der ionisierten Störstellen ausschlaggebend, wobei man annehmen kann, dass die Streuung unabhängig von der Art der Störstellen ist:

$$N_I = N_A + N_D \quad (8.15)$$

Abb. 8.3a zeigt die Abhängigkeit der Hallbeweglichkeit von der Störstellenkonzentration N_I bei Raumtemperatur. Daten für (111)-orientierte Proben sind als Dreiecke dargestellt, Daten von (001)-orientierten Proben als Quadrate. Zum Vergleich sind Literaturwerte für die Hallbeweglichkeit von Bulk-Germanium dargestellt (offene Kreise) [225]. Die durchgezogene Linie ist eine empirische Fitkurve der Literaturdaten [236]. Die Werte für die SME-Germaniumschichten entsprechen den Literaturwerten für die jeweilige Störstellenkonzentration. Zur Bestimmung der Gesamtkonzentration der ionisierten Störstellen N_I wurde für die (111)-Proben eine Donatorkonzentration von $N_D = 1,5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ angenommen [174]. Für die (001)-Proben wurde mit $N_D = 6,3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ gerechnet. Die höchste Beweglichkeit wurde mit $1576 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ bei einer Störstellenkonzentration von $N_I = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ bei einer (111)-orientierten Probe gemessen. Die gemessenen Werte stimmen gut mit den der jeweiligen Störstellenkonzentration entsprechenden Literaturwerten überein. Ein Einfluss der Substratorientierung ist nicht zu erkennen.

In Abb. 8.3b ist die Temperaturabhängigkeit der Hallbeweglichkeit für (111)- und (001)-Proben (Dreiecke bzw. Quadrate) mit $N_I = 2,2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ und $N_I = 3,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$



(a) Hallbeweglichkeit über Störstellenkonzentration

(b) Temperaturabhängigkeit der Hallbeweglichkeit

Abb. 8.3: Löcherhallbeweglichkeit in mit SME hergestellten Germaniumschichten: Abb. 8.3a zeigt die Abhängigkeit der Hallbeweglichkeit von der Störstellenkonzentration N_I bei Raumtemperatur. Daten für (111)-orientierte Proben sind als Dreiecke dargestellt, Daten von (001)-orientierten Proben als Quadrate. Zum Vergleich sind Literaturwerte für die Hallbeweglichkeit von Bulk-Germanium dargestellt (offene Kreise) [225]. Die durchgezogene Linie ist eine empirische Fitkurve der Literaturdaten [236]. Die Werte für die SME-Germaniumschichten entsprechen den Literaturwerten für die jeweilige Störstellenkonzentration. In Abb. 8.3b ist die Temperaturabhängigkeit der Hallbeweglichkeit für (111)- und (001)-Proben (Dreiecke bzw. Quadrate) mit $N_I = 2,2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ und $N_I = 3,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ bzw. $N_I = 3,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ und $N_I = 1,3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ zusammen mit entsprechenden Literaturdaten aus [225] (offene Kreise) dargestellt.

bzw. $N_I = 3,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ und $N_I = 1,3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ zusammen mit entsprechenden Literaturdaten aus [225] (offene Kreise) dargestellt. Für die am höchsten dotierte Probe ist die Übereinstimmung der gemessenen Hallbeweglichkeiten mit den entsprechenden Literaturdaten sehr gut. Die schwächer dotierten Proben zeigen mit sinkender Temperatur im Bereich von 200 – 350 K einen Anstieg der Hallbeweglichkeit, der dem Verlauf der Literaturwerte entspricht. Man kann annehmen, dass in diesem Temperaturbereich neben der Streuung an Phononen und ionisierten Störstellen keine weiteren Streumechanismen eine Rolle spielen. Bei Temperaturen von 120 – 200 K zeigen die Messdaten im Vergleich zu den Literaturwerten kein so ausgeprägtes Maximum und unterhalb von 120 K eine schwächere Abnahme der Hallbeweglichkeit. Das erscheint zunächst widersprüchlich. Während der flachere Verlauf der Kurven auf einen zusätzlichen Streumechanismus hindeutet, weist die schwächere Abnahme bei Temperaturen unter 120 K auf eine geringere Streuung hin. Hier sind noch weitere Untersuchungen, z. B. auch in Abhängigkeit von der Schichtdicke nötig, um das Verhalten bei tieferen Temperaturen endgültig zu klären.

8.5 Zusammenfassung

Die Elektronenhallbeweglichkeit in mit SME gewachsenen Germaniumschichten wurde erstmals vergleichend auf Si(111)- und Si(001)-Substraten in Abhängigkeit von der Schichtdicke untersucht. Proben mit (001)-Orientierung zeigen eine geringere Beweglichkeit als (111)-orientierte Proben, was eine Folge der höheren Dotierung sein könnte. Außerdem ist die Verarmungszone im Germanium bei (001)-Orientierung weiter ausgedehnt, was durch das Vorhandensein einer Inversionsschicht an der Grenzfläche zum Siliziumsubstrat erklärt werden könnte. Eine Abschätzung des Einflusses einer Inversionsschicht auf die gemessenen Parameter ergibt, dass die Elektronenbeweglichkeiten in den (001)-orientierten Germaniumschichten die für vergleichbar dotierte Bulk-Germanium erwarteten Werte von etwa $2350 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ erreichen. Für (111)-orientierte Proben werden, Beweglichkeiten von $3250 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ gemessen, was durch geringere Dotierung bedingt ist. Eine Orientierungsabhängigkeit des Sb-Einbaus bei der SME erscheint durchaus plausibel und könnte die unterschiedlichen Dotierkonzentrationen erklären. Um die Ergebnisse für Germaniumschichten auf Si(001) zu optimieren, sollten Experimente bei höheren Wachstumstemperaturen durchgeführt werden. Das Auftreten einer Inversionsschicht an der Grenzfläche zwischen Germanium und Si(001) kann durch das an der Grenzfläche liegende Versetzungsnetzwerk und die damit verbundenen Grenzflächenzustände erklärt werden. Für (111)-orientierte Proben scheinen die Grenzflächenzustände keine Inversionsschicht hervorzurufen. Mit der hier entwickelten Methode für die definierte Herstellung von periodischen Versetzungsnetzwerken auch in (001)-orientierten Ge/Si-Heterostrukturen stehen optimale Teststrukturen für die Untersuchung des Einflusses der verschiedenen Versetzungstypen auf die elektrischen Eigenschaften zur Verfügung.

Die Kompensationsdotierung durch Koverdampfen mit Bor wurde zur Untersuchung der Löcherhallbeweglichkeit in mit SME gewachsenen Germaniumschichten auf Si(111)- und Si(001)-Substraten etabliert. Für die untersuchten Dotierkonzentrationen zeigte sich kein Einfluss der Substratorientierung auf die Hallbeweglichkeit. Temperaturabhängige Messungen ergaben oberhalb von 200 K eine gute Übereinstimmung mit Literaturwerten, für tiefere Temperaturen zeigen sich im Vergleich zu dem Verhalten von Bulk-Germanium kleine Abweichungen. Ob hier zusätzliche Streumechanismen neben der Streuung am Gitter und an ionisierten Störstellen wirksam sind, kann im Rahmen der vorliegenden Daten nicht geklärt werden.

9 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde die Surfactant-modifizierte Epitaxie relaxierter Germaniumschichten auf (111)- und (001)-orientierten Siliziumsubstraten untersucht. Dabei gelang es erstmals, Bedingungen für die SME glatter, relaxierter Germaniumschichten mit niedrigen Defektdichten auf Si(001) zu finden. Die strukturellen Eigenschaften 1 μm dicker Germaniumschichten auf Si(001) wurden *in situ* mit Elektronenbeugung und *ex situ* mittels Transmissionselektronenmikroskopie, hochauflösender Röntgenbeugung und Rasterkraftmikroskopie charakterisiert. Die untersuchten Schichten haben eine mittlere Rauigkeit von weniger als einem Nanometer. Sie sind bis auf eine kleine Zugspannung, die durch die unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten beim Abkühlen hervorgerufen wird, vollständig relaxiert. Die Dichte der durchdringenden Versetzungen wurde mit TEM zu $1,6 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$ bestimmt, die Auswertung der Halbwertsbreite von XRD-Rockingkurven ergab $6 \times 10^7 \text{ cm}^{-2}$. Im Vergleich mit bauelementtauglichen Germaniumschichten, die mit SME auf (111)-orientierten Siliziumsubstraten gewachsen wurden, zeigen sich keine wesentlichen Unterschiede in den strukturellen Parametern.

Die Gitterfehlpassung zwischen Germanium und Silizium wird bei der SME auf (111)-Substraten durch ein periodisches Versetzungsnetzwerk an der Grenzfläche zum Substrat kompensiert. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit konnte zum ersten Mal gezeigt werden, dass das auch für die (001)-Orientierung der Fall ist. Die Untersuchung dieser Versetzungsnetzwerke mit Hilfe der Beugungskontrastanalyse im TEM war ein Schwerpunkt der Arbeit und lieferte wesentliche Anhaltspunkte für das Verständnis des Relaxationsmechanismus. Im Falle der (111)-Orientierung handelt es sich um ein trigonales Netzwerk aus 90° -Partialversetzungen mit Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{6}\langle\bar{1}12\rangle$ und $\langle 110\rangle$ -Linienrichtung. Der Versetzungsabstand von 8 nm gleicht dem bei vollständiger Kompensation der Gitterfehlpassung erwarteten Wert. Bei (001)-orientierten Schichten entsteht ein quadratisches Netzwerk aus vollständigen Stufenversetzungen mit Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2}\langle\bar{1}10\rangle$ und $\langle 110\rangle$ -Linienrichtung mit einem Abstand von 10 nm , was ebenfalls dem erwarteten Wert entspricht. Für beide Orientierungen liegen sowohl Burgersvektor als auch Linienrichtung der Versetzungen parallel zur Grenzfläche. Das ist besonders für die (001)-orientierten Proben bemerkenswert, da die hier beobachteten Versetzungen nicht dem Hauptgleitsystem des Diamantgitters angehören. Eine solche Konfiguration wurde in der Literatur bisher noch nicht beschrieben.

Erstmals wurde in dieser Arbeit der Einfluss der Sb-Bedeckung auf den Relaxationsprozess und damit auf die strukturellen Parameter der Germaniumschichten bei der SME auf Si(001)

experimentell nachgewiesen. Eine wesentliche Rolle für den Relaxationsprozess spielt die Entwicklung der Filmtopografie während des Wachstums bei Temperaturen um $670\text{ }^{\circ}\text{C}$. Die Wirkung des Sb bei der SME liegt dabei zunächst darin, dass es, verglichen mit der surfactantfreien Epitaxie, das Lage-für-Lage-Wachstum zu größeren Schichtdicken hin verlängert. Nach dieser Phase bildet der Film eine Mikro-Rauigkeit aus, deren Form von der Substratorientierung und im Falle der (001)-Orientierung auch vom Sb-Bedeckungsgrad abhängig ist. Der Surfactant beeinflusst die Oberflächenenergieanisotropie, was auf (111)-Substraten zur Ausbildung von [113]-Facetten führt. Auf (001)-Substraten bilden sich bei geringer Sb-Bedeckung [105]-Facetten und bei hoher Sb-Bedeckung [117]-Facetten. Die zwischen den Facetten liegenden Gräben in der Filmoberfläche sind Orte maximaler Spannung und daher bevorzugte Nukleationszentren für Versetzungen. Die Richtung, in der die Gräben auf der Oberfläche verlaufen, beeinflusst den Typ der entstehenden Versetzungen und ist damit entscheidend für die Effizienz des Spannungsabbaus. Nur bei hoher Sb-Bedeckung entstehen auf der (001)-Oberfläche [117]-Facetten und damit [110]-orientierte Gräben, die dann zur Bildung vollständiger Stufenversetzungen führen. Aufgrund der hohen Dichte der Nukleationsorte können entsprechend viele Versetzungen entstehen, die die Gitterfehlpassung schlagartig ausgleichen und ein dichtes, periodisches Netzwerk bilden. Aufgrund der hohen Spannungen können alternative, parallel zur Grenzfläche liegende, Gleitsysteme aktiviert werden. Da die Versetzungen unmittelbar an der Grenzfläche entstehen, müssen sie sich zur Bildung des Netzwerkes nicht vertikal durch die Schicht bewegen, so dass auch keine den Film durchstoßende Versetzungsarme nötig sind. Durch den weitgehenden Abbau der Spannung glättet sich der Film und kann schon nach wenigen Nanometern Lage-für-Lage weiterwachsen. Damit definieren die hohe Wachstumstemperatur und die erforderliche Sb-Bedeckung ein enges Wachstumfenster zur Herstellung von Germaniumschichten von hoher struktureller Perfektion auf Si(001).

In einer weiteren Messreihe wurde der Einfluss des Surfactant-modifizierten Relaxationsprozesses auf die Eindiffusion von Silizium in die Germaniumschicht mit Hilfe von EDXS-Messungen an TEM-Querschnittsproben untersucht. Dabei ergab sich, dass die üblicherweise beobachtete ausgeprägte Vermischung durch den schlagartigen Spannungsabbau unterdrückt wird, so dass mit Einsatz der SME im Gegensatz zu anderen Verfahren die Herstellung von abrupten Ge/Si-Heteroübergängen möglich ist. Eine Orientierungsabhängigkeit wurde dabei nicht festgestellt.

Die bisher beschriebenen Relaxationsvorgänge sind bereits nach dem Wachstum weniger Nanometer Germanium abgeschlossen. Für dünne (111)-orientierte Filme ist jedoch aus der Literatur bekannt, dass sie noch eine kleine kompressive Restverzerrung enthalten, wohingegen $1\text{ }\mu\text{m}$ dicke Schichten eine geringe tensile Verzerrung aufweisen. Daher wurde im Rahmen dieser Arbeit erstmalig der Verlauf der Restverzerrung in Germaniumschichten mit Schichtdicken von $50 - 1000\text{ nm}$ auf (111)- und (001)-Substraten mit Röntgenbeugung untersucht. Es zeigte sich, dass mit steigender Filmdicke immer weniger Spannung elastisch im Film gespeichert ist. Der Rest der Spannung muss durch plastische Relaxation, also über die

Bildung weiterer Versetzungen oder über eine Umstrukturierung des Versetzungsnetzwerkes an der Grenzfläche abgebaut werden. Möglicherweise ist dies die Ursache für die in $1\ \mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten beobachteten Durchstoßversetzungen. Ein Weg zur weiteren Verringerung dieser Versetzungen liegt damit in der Untersuchung und Optimierung von Schichten mit Dicken unterhalb von $100\ \text{nm}$.

Während die Gitterfehlpassung kompressive Spannungen im Film hervorruft, induziert die unterschiedliche thermischen Ausdehnung von Schicht und Substrat beim Abkühlen der Proben nach dem Wachstum eine Zugspannung, die ebenfalls zu plastischer Relaxation führen kann. In der vorliegenden Arbeit wurde erstmals eine Orientierungsabhängigkeit dieses Verhaltens festgestellt. Für (111)-orientierte Proben tritt oberhalb von $485\ ^\circ\text{C}$ plastische Relaxation auf, während in Proben mit (001)-Orientierung die thermisch induzierte Spannung komplett durch elastische Verzerrung kompensiert wird. Hier bietet sich ein Ansatzpunkt zur gezielten Nutzung von zugverspannten Germaniumschichten in optoelektronischen Bauelementen.

Eine wichtige Problematik bei der SME ist die Hintergrunddotierung durch den Einbau des Surfactants während des Wachstums. SIMS-Analysen zeigten, dass sie für (001)-orientierte Proben im Bereich von $\leq 5 \times 10^{16}\ \text{cm}^3$ liegt, was für die Herstellung von Bauelementen ausreichend ist. Es wurde zum ersten Mal demonstriert, dass ein Übergang von SME zur Germaniumhomoepitaxie ohne Surfactant während des Wachstums ohne Einbußen bei der strukturellen Qualität der Schichten möglich ist. Damit wurde auch gezeigt, dass sich der Einsatz von Surfactants und die Herstellung von intrinsischen Germaniumschichten auf Siliziumsubstraten nicht prinzipiell ausschließen.

Darüberhinaus wurde erstmals im Hinblick auf eine mögliche Anwendung in elektronischen Bauelementen eine vergleichende Analyse der Hallbeweglichkeit von Elektronen und Löchern in Germaniumschichten auf (111)- und (001)-orientierten Substraten durchgeführt. Die Elektronenhallbeweglichkeit in mit SME gewachsenen Germaniumschichten wurde in Abhängigkeit von der Schichtdicke untersucht. Proben mit (001)-Orientierung zeigen eine geringere Beweglichkeit als (111)-orientierte Proben, was eine Folge der höheren Dotierung sein könnte. Außerdem ist die Verarmungszone im Germanium bei (001)-Orientierung weiter ausgedehnt, was durch das Vorhandensein einer Inversionsschicht an der Grenzfläche zum Siliziumsubstrat erklärt werden könnte. Eine Abschätzung des Einflusses einer Inversionsschicht auf die gemessenen Parameter ergab, dass die Elektronenbeweglichkeiten in den (001)-orientierten Germaniumschichten die für vergleichbar dotierte Bulk-Germanium erwarteten Werte von etwa $2350\ \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ erreichen. Für (111)-orientierte Proben wurden, Beweglichkeiten von $3250\ \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ gemessen, was durch geringere Dotierung bedingt ist. Eine Orientierungsabhängigkeit des Sb-Einbaus bei der SME erscheint durchaus plausibel und könnte die unterschiedlichen Dotierkonzentrationen erklären. Um die Ergebnisse für Germaniumschichten auf Si(001) zu optimieren, sollten Experimente bei höheren Wachstumstemperaturen durchgeführt werden. Das Auftreten einer Inversionsschicht an der Grenzfläche zwischen Germanium und Si(001) kann durch das an der Grenzfläche liegende Versetzungsnetzwerk und die damit

verbundenen Grenzflächenzustände erklärt werden. Für (111)-orientierte Proben scheinen die Grenzflächenzustände keine Inversionsschicht hervorzurufen. Weitere Untersuchungen an geeigneten Teststrukturen, beispielsweise mit Strom-Spannungs- und Kapazitätsspannungsmessungen an Ge/Si-Heterodioden, sind erforderlich, um den Einfluss des periodischen Versetzungsnetzwerks auf das elektrische Verhalten von Ge/Si-Heterobauelementen vollständig aufzuklären. Mit der hier entwickelten Methode für die definierte Herstellung von periodischen Versetzungsnetzwerken auch in (001)-orientierten Ge/Si-Heterostrukturen stehen optimale Teststrukturen für die Untersuchung des Einflusses der verschiedenen Versetzungstypen auf die elektrischen Eigenschaften zur Verfügung.

Zur Untersuchung der Löcherhallbeweglichkeit in mit SME gewachsenen Germaniumschichten auf Si(111)- und Si(001)-Substraten wurde die Kompensationsdotierung durch Koverdampfen von Bor etabliert. Für Dotierkonzentrationen oberhalb von $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ entsprechen die gemessenen Löcherbeweglichkeiten denen von vergleichbar dotiertem Bulk-Germanium. Die maximale gemessene Löcherbeweglichkeit betrug $1576 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$. Ein Einfluss der Substratorientierung auf die Hallbeweglichkeit wurde nicht festgestellt, lediglich die Untergrenze für die Kompensationsdotierung lag aufgrund der stärkeren Hintergrunddotierung bei (001)-Substraten höher. Temperaturabhängige Messungen ergaben oberhalb von 200 K eine gute Übereinstimmung mit Literaturwerten, für tiefere Temperaturen zeigen sich im Vergleich zu dem Verhalten von Bulk-Germanium kleine Abweichungen. Ob hier zusätzliche Streumechanismen neben der Streuung am Kristallgitter und an ionisierten Störstellen wirksam sind, kann auf der Basis der vorliegenden Daten nicht geklärt werden.

Diese Arbeit hat gezeigt, dass die Surfactant-modifizierte Epitaxie von Germanium auf Silizium die Herstellung n- und p-dotierter Germaniumschichten von hoher struktureller Perfektion auf verschiedenen orientierten Substraten¹ erlaubt. Damit ist sie ein vielseitiges Verfahren zur Fabrikation von Ge/Si-Heterobauelementen.

¹In weiteren Untersuchungen konnte gezeigt werden, dass strukturell hochwertige Germaniumschichten mit SME auch auf Si(110) und auf strukturierten Substraten gewachsen werden können [237, 238].

A Anhang

A.1 Bestimmung des Relaxationsgrades

Bei der Ge/Si-Heteroepitaxie setzt oberhalb einer kritischen Schichtdicke die Relaxation des epitaktischen Films ein. Es ist daher von Interesse, den Relaxationsgrad R einer Schicht zu bestimmen.

R ist das Verhältnis zwischen der Gitterfehlpassung parallel zur Oberfläche $\left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{\parallel}$ und der Gitterfehlpassung zwischen Substrat und vollständig relaxierter Schicht $\left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{rel}$:

$$R = \frac{\left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{\parallel}}{\left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{rel}} \quad (\text{A.1})$$

Hierbei ist $\left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{rel} = (a_{Film} - a_{Sub})/a_{Sub}$ und analog für die senkrechten und parallelen Gitterkonstanten von Film und Substrat.

Mit:

$$\left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{rel} = \frac{1}{k^{hkl}} \left[\left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{\perp} + (k^{hkl} - 1) \left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{\parallel} \right] \quad (\text{A.2})$$

ergibt sich:

$$R = \frac{k^{hkl} \left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{\parallel}}{\left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{\perp} + ((k^{hkl} - 1) \left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{\parallel})} \quad (\text{A.3})$$

Für den Fall einer $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ -Schicht auf einem Si-Substrat gilt mit der Vegardschen Regel 2.1:

$$\left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{rel} = \frac{a_{Ge} - a_{Si}}{a_{Si}} x = 0,0418 x \quad (\text{A.4})$$

Somit lässt sich R schreiben als:

$$R = \frac{1}{k^{hkl} - 1} \left(k^{hkl} - \frac{\left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{\perp}}{0,0418 x} \right) = \frac{\left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{\parallel}}{0,0418 x} \quad (\text{A.5})$$

und:

$$x = \frac{1}{0,0418 k^{hkl}} \left[\left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{\perp} + (k^{hkl} - 1) \left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{\parallel} \right] \quad (\text{A.6})$$

Für die elastische Restverzerrung im Film parallel zur Grenzfläche ϵ_{\parallel} erhält man:

$$\begin{aligned} \epsilon_{\parallel} &= (1 - R) \left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{rel} = \left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{rel} - \left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{\parallel} \\ &= \frac{1}{k^{hkl} - 1} \left[\left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{\perp} - \left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{rel} \right] = \frac{1}{k^{hkl}} \left[\left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{\perp} - \left(\frac{\Delta a}{a_{Sub}}\right)_{\parallel} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

A.2 Abschätzungen zur Halbwertsbreite von Rockingkurven

Nach [239] gilt für die schichtdickenabhängige Halbwertsbreite einer Rockingkurve mit der Wellenlänge λ , der Schichtdicke h und dem Beugungswinkel Θ_{hkl} :

$$\beta_L^2 = \frac{4\lambda^2 \ln 2}{\pi h^2 \cos^2 \Theta_{hkl}} \quad (\text{A.8})$$

Für eine Germaniumschicht und $Cu_{K\alpha}$ -Strahlung ergeben sich die in Abbildung A.1 dargestellten Werte, z.B. für eine $1 \mu m$ dicke Schicht und den (004)-Reflex eine Halbwertsbreite von $35,6 \text{ arcsec}$.

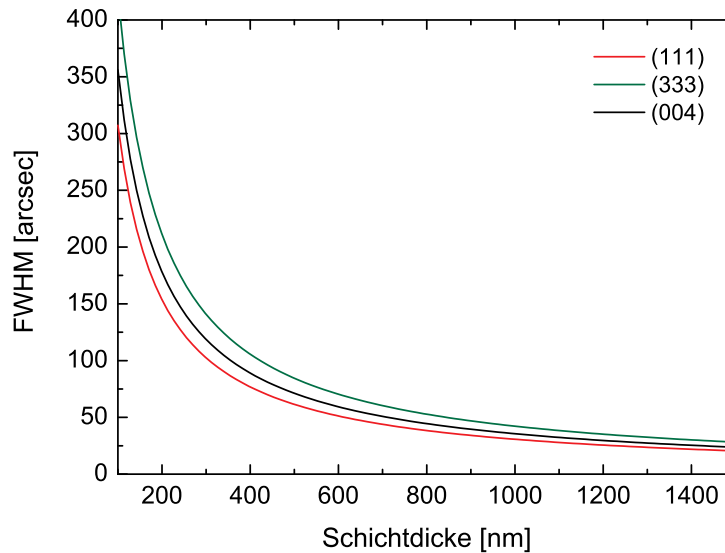


Abb. A.1: Einfluss der Schichtdicke auf die Halbwertsbreite einer Rockingkurve.

Nach [145] tragen Versetzungen im Kristall auf zwei Arten zur Halbwertsbreite einer Rockingkurve bei. Ein Beitrag entsteht durch die Verkipfung der Netzebenen:

$$\beta_\alpha^2 = 2\pi b^2 \ln(2) n_D \quad (\text{A.9})$$

Der Andere durch die Verzerrung des Gitters:

$$\beta_\epsilon^2 = F_{geom} b^2 n_D \left| \ln(2 \times 10^{-7} \text{ cm} \sqrt{n_D}) \right| \tan^2(\Theta_{hkl}) \quad (\text{A.10})$$

Dabei sind b der Betrag des Burgersvektors der Versetzungen, n_D die Versetzungsdichte pro cm^2 , Θ_{hkl} der Beugungswinkel und F_{geom} ein Geometriefaktor, der vom Typ der Versetzung abhängt. Beispielsweise gilt für Schraubenversetzungen im Diamantgitter $F_{geom} = 0,09$ und für 60° -Versetzungen $F_{geom} = 0,16$. In Abbildung A.2 ist das Verhältnis der beiden Beiträge zur Halbwertsbreite der Rockingkurve für Defektdichten von $10^5 - 10^9 cm^{-2}$ dargestellt. Für den Ge(004)-Reflex ist $\frac{\beta_\epsilon}{\beta_\alpha} \approx 0,1$, die Gitterverkipfung dominiert also. Man erkennt auch, dass der Versetzungstyp nur einen schwachen Einfluss auf die resultierende Halbwertsbreite hat, so dass eine genaue Kenntnis über die Art der Versetzungen für die Bestimmung der Defektdichte keine große Rolle spielt.

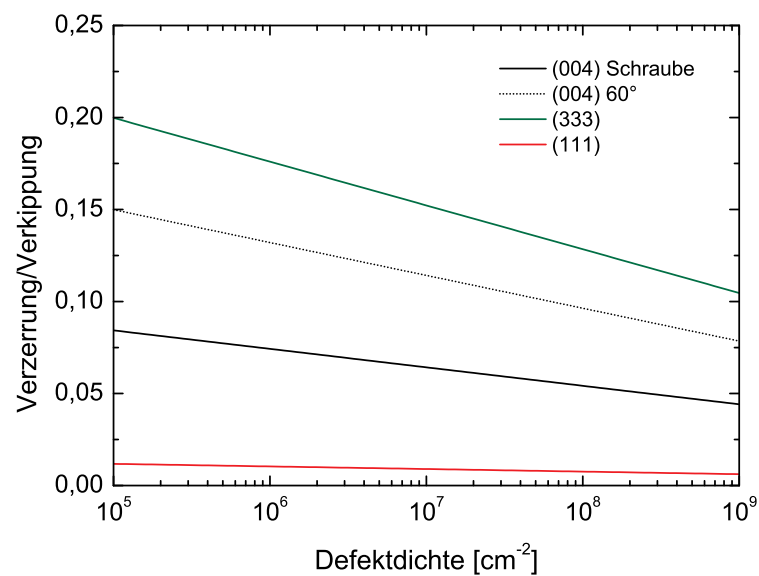


Abb. A.2: Einfluss von Gitterverzerrung und Gitterverkipfung auf die Halbwertsbreite einer Rockingkurve für verschiedene Beugungsreflexe und Versetzungstypen.

A.3 Uniformität der Schichtdicke

Die Uniformität U beschreibt die Gleichförmigkeit der Verteilung einer Messgröße, wie z.B. der Schichtdicke beim Mapping über einen Wafer. Sie ist wie folgt definiert:

$$U = \frac{Max - Min}{2 Mittelwert} \quad (A.11)$$

Verzeichnis der Symbole und Abkürzungen

Symbole

a	Gitterkonstante
a_{Film}	Gitterkonstante der Schicht
a_{Ge}	Gitterkonstante von Germanium ($a_{Ge} = 0,5658 \text{ nm}$)
a_{\parallel}, a_{\perp}	Gitterkonstanten parallel und senkrecht zur Grenzfläche
a_{Si}	Gitterkonstante von Silizium ($a_{Si} = 0,3571 \text{ nm}$)
a_{Sub}	Gitterkonstante des Substrats
\vec{b}	Burgersvektor einer Versetzung
B	magnetische Flussdichte
b	Verhältnis von Elektronen- zu Löcherbeweglichkeit
C	Konstante
c_{11}, c_{12}, c_{44}	elastische Konstanten
D	Versetzungsabstand oder Diffusionskonstante
D_0	Sprungfrequenz bei der Diffusion
d_{hkl}	Netzebenenabstand im Kristall
E_A	Aktivierungsenergie für die Diffusion
E_{act}^{MF}	Energiebarriere für die Relaxation über Versetzungen
E_{act}^{SK}	Energiebarriere für die elastische Relaxation

E_{elast}	elastische Energie des Verzerrungsfeldes einer Versetzung
E_{Kern}	Energie des Versetzungskerns
E_L	Linienenergie einer Versetzung
E_{strain}	Spannungsenergie
\vec{E}	elektrisches Feld
F	Kraft
f	Gitterfehlpassung
F_{geom}	geometrischer Faktor
G	Schubmodul
\vec{g}	reziproker Gittervektor bei der TEM
h	Schichtdicke
h_{inv}	Dicke der Inversionsschicht
h, k, l	Millersche Indizes
h_{MF}	kritische Schichtdicke für die Relaxation über Versetzungen
h_{SK}	kritische Schichtdicke für die elastische Relaxation
h_{Sub}	Dicke des Substrates
I	elektrischer Strom
i	Index
k	Permittivitätszahl oder Boltzmann-Konstante ($k = 1,38 \times 10^{-23} \frac{J}{K}$)
K_D^{hkl}	temperaturabhängige Zeitkonstante des Desorptionsprozesses
k^{hkl}	Verhältnis der Gitterverzerrung senkrecht und parallel zur Grenzfläche
k_{SiO_2}	Permittivitätszahl von Siliziumdioxid ($k_{SiO_2} = 3,9$)
\vec{k}	Wellenvektor
\vec{l}	Linienrichtung einer Versetzung

Verzeichnis der Symbole und Abkürzungen

L	Abstand der Koinzidenzpunkte
m^*	effektive Masse
n, p	Elektronen- bzw. Löcherkonzentration
N_0^{hkl}	Anfangskonzentration
N_A, N_D	Konzentrationen der ionisierten Akzeptoren bzw. Donatoren
n_D	Versetzungsdichte
N_I	Gesamtkonzentration der ionisierten Störstellen
N_{max}, N_{min}	maximale und minimale Konzentration
N_{net}	resultierende Ladungsträgerkonzentration in einer kompensationsdotierten Schicht
$N(x, t)$	Konzentrationsprofil
n_{Ge}	Elektronenkonzentration in der Germaniumschicht
p_{inv}	Löcherkonzentration in der Inversionsschicht
p_{Sub}	Löcherkonzentration im Substrat
Q_{\perp}, Q_{\parallel}	Komponenten des reziproken Gittervektors
q_{\perp}, q_{\parallel}	Koordinaten im reziproken Raum
q	Elementarladung ($q = 1,602 \times 10^{-19} C$)
\vec{Q}	reziproker Gittervektor bei der Röntgenbeugung
R	Relaxationsgrad
R_a, R_i	äußerer und innerer Abschneideradius des Verzerrungsfeldes einer Versetzung
R_H	Hallkoeffizient
r_H	Hall-Streufaktor
R_{H_s}	Schichthallkoeffizient
R_{int}	Ausdehnung eines Versetzungsknotens

RT	Raumtemperatur (300 K)
s_g	Anregungsfehler bei der TEM
T	Temperatur
t	Zeit
T_{BDT}	Temperatur des Spröd-Duktil-Übergangs (engl. brittle to ductile transition)
T_G	Substrattemperatur beim Wachstumsprozess
U	Uniformität
U_H	Hallspannung
\vec{u}	Verschiebungsvektor einer Gitterstörung
\vec{v}_d	Driftgeschwindigkeit
w	Kontrastbreite
x	Ortskoordinate oder Germaniumanteil im Ge_xSi_{1-x} Mischkristall
x_0	Ort der Stufe
y, z	Ortskoordinate
α	Parameter zur Abschätzung der Energie des Versetzungskerns
$\alpha(T)$	linearer thermischer Ausdehnungskoeffizient
β_0	intrinsische Halbwertsbreite einer XRD-Rockingkurve
β_α	von Versetzungen durch Verkipfung von Netzebenen hervorgerufene Halbwertsbreite einer XRD-Rockingkurve
β_{asym}	durch den asymmetrischen Monochromator hervorgerufene Halbwertsbreite einer XRD-Rockingkurve
β_d	durch den Monochromator hervorgerufene Halbwertsbreite einer XRD-Rockingkurve
β_ϵ	durch die Spannungsfelder von Versetzungen hervorgerufene Halbwertsbreite einer XRD-Rockingkurve

Verzeichnis der Symbole und Abkürzungen

β_L	durch die Probendicke hervorgerufene Halbwertsbreite einer XRD-Rockingkurve
β_{mess}	Halbwertsbreite einer XRD-Rockingkurve
β_r	durch die Krümmung der Probe hervorgerufene Halbwertsbreite einer XRD-Rockingkurve
β_{sym}	durch den symmetrischen Monochromator hervorgerufene Halbwertsbreite einer XRD-Rockingkurve
Δa	Differenz zweier Gitterkonstanten
$\epsilon_{ }, \epsilon_{\perp}$	Gitterverzerrung parallel bzw. senkrecht zur Grenzfläche
ϵ_{mf}	durch Gitterfehlpassung induzierte Gitterverzerrung
ϵ_{res}	Restverzerrung der Schicht
ϵ_{th}	thermisch induzierte Gitterverzerrung
$\gamma_s, \gamma_f, \gamma_i$	freie Oberflächenenergien des Substrates, des Films bzw. der Grenzfläche
γ_{SF}	Stapelfehlerenergie
λ	Wellenlänge
λ_m	mittlere freie Weglänge
μ	Driftbeweglichkeit
μ_{ge}	Hallbeweglichkeit der Germaniumschicht
$\mu_{Hn,p}$	Hallbeweglichkeit für Elektronen bzw. Löcher
μ_{inv}	Hallbeweglichkeit der Inversionsschicht
μ_n, μ_p	Elektronen- bzw. Löcherleitfähigkeitsbeweglichkeit
μ_{Sub}	Hallbeweglichkeit des Substrates
ν	Poissonzahl
ω	Winkel zwischen Probe und Quelle bei der Röntgenbeugung
Ψ, Δ	Ellipsometerwinkel
σ	Leitfähigkeit

σ_s	spezifischer Schichtleitwert
τ_s	Peierlsspannung
θ	Winkel zwischen Burgersvektor und Linienrichtung einer Versetzung
τ_m	mittlere Flugzeit
Θ	Einfallswinkel bei der Röntgenbeugung
Θ_{hkl}	Braggwinkel einer Netzebene
Θ_{Sb}	Grad der Oberflächenbedeckung mit Antimon

Abkürzungen

AFM	Rasterkraftmikroskopie, engl.: Atomic Force Microscopy
CMOS	Complementary Metal-Oxide-Semiconductor
CMP	chemisch-mechanisches Polieren, engl.: Chemical-Mechanical Polishing
CVD	chemische Abscheidung aus der Gasphase, engl.: Chemical Vapor Deposition
DI H ₂ O	deionisiertes Wasser
EDXS	energiedispersive Röntgenspektrometrie, engl.: Energy Dispersive X-ray Spectrometry
EIES	Electron Impact Emission Sensor
ESV	Elektronenstrahlverdampfer
FWHM	Halbwertsbreite, engl.: Full Width at Half Maximum
GOI	Germanium On Insulator
HEMT	High Electron Mobility Transistor
IHP	Institut für High Performance Microelectronics
LEED	Beugung niederenergetischer Elektronen, engl.: Low Energy Electron Diffraction
LPE	Flüssigphasenepitaxie, engl.: Liquid Phase Epitaxy
MBE	Molekularstrahlepitaxie, engl.: Molecular-Beam Epitaxy
<i>ML</i>	Monolagen
MOS	Metal-Oxide-Semiconductor
MOSFET	Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor
RHEED	Beugung hochenergetischer Elektronen in Reflexion, engl.: Reflection High Energy Electron Diffraction
rms	mittlere quadratische Rauigkeit, engl.: Root-Mean-Square Roughness
RSM	reziproke Gitterkarte, engl.: Reciprocal Space Map

RTD	Resonant Tunnel Diode
SIMS	Sekundärionen Massenspektroskopie
SME	Surfactant-modifizierte Epitaxie, engl.: Surfactant-Mediated Epitaxy
SOI	Silicon On Insulator
SPA-LEED	Spot Profile Analysis - Low Energy Electron Diffraction
STM	Rastertunnelmikroskopie, engl.: Scanning Tunnelling Microscopy
TEM	Transmissionselektronenmikroskopie
THEED	Beugung hochenergetischer Elektronen in Transmission, engl.: Transmission High Energy Electron Diffraction
UHV	Ultrahochvakuum
UV	Ultraviolett
XRD	Röntgenbeugung, engl.: X-ray Diffraction
XTEM	TEM an Querschnittsproben, engl.: cross-sectional TEM

Abbildungsverzeichnis

1.1	Eigenschaften alternativer Kanalmaterialien.	2
1.2	Absorptionskoeffizient von Silizium und Germanium	3
2.1	Diamantgitter	10
2.2	Bestimmung des Burgersvektors einer Versetzung	11
2.3	Shockley-Partialversetzung mit Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{6} \langle 112 \rangle$	12
2.4	Gleiten einer Versetzung	13
2.5	Wachstumsmodi bei der Heteroepitaxie	15
2.6	Formen elastischer Relaxation	17
2.7	60°-Versetzung im Diamantgitter	17
2.8	kritische Schichtdicken im Vergleich	18
2.9	Eindiffusion von Silizium in Germanium aus einer unerschöpflichen Quelle .	20
2.10	thermische Ausdehnung und thermische Spannung	21
2.11	elastische Verzerrung mit und ohne plastische Verformung	22
3.1	Jean-Baptiste Romé de L'Isle	26
3.2	Surfactants in der Literatur	27
3.3	Entwicklung der Oberflächenrauigkeit bei der SME	28
3.4	Spannungsabbau im Germaniumfilm bei der SME auf Si(001)	29
4.1	Veranschaulichung der Braggschen Beugungsbedingung im realen und im reziproken Raum	33
4.2	Reziprokes Gitter einer Epitaxieschicht mit Substrat	34
4.3	Prinzip des $\Theta - 2\Theta$ -Scans und typisches Messergebnis	35
4.4	Prinzip des ω -Scans und typisches Messergebnis	37
4.5	Lage eines asymmetrischen Schicht- und Substratreflexes für verschiedene Verspannungszustände.	38
4.6	EDXS Prinzip	41
4.7	Kontamination bei der EDXS-Messung	42
4.8	Experimentelle Anordnung bei RHEED und LEED	44
4.9	Ewald-Konstruktion für RHEED und LEED	44
4.10	SIMS Prinzip	45
4.11	Schematische Darstellung des Messprinzips bei der Rasterkraftmikroskopie	46

5.1	Skizze der MBE-Anlage	50
5.2	Kalibrationskurve der Temperaturmessung am Substratmanipulator der MBE	51
5.3	Spektrale Messung der Ellipsometriewinkel Ψ und Δ für unterschiedlich dicke Germaniumschichten	52
5.4	Wafermapping der Schichtdicke von Germaniumkalibrationsschichten . . .	53
5.5	Typischer Wachstumsprozess bei der SME von Germanium auf Silizium . .	55
6.1	$\omega - 2\Theta$ XRD-Scan der (333)-Reflexe einer $1 \mu\text{m}$ dicken Germaniumschicht auf Si(111)	58
6.2	TEM-Querschnitt einer $1 \mu\text{m}$ Germaniumschicht auf Si(111)	59
6.3	Konstruktion des Koinzidenzgitters auf Si(111)	61
6.4	Koinzidenznetzwerk in der (111)-Grenzfläche	64
6.5	Dissoziation eines I-Knotens	65
6.6	mögliche Gleichgewichtskonfigurationen auf Si(111)	65
6.7	Gleichgewichtsabstand der Versetzungen auf Si(111)	66
6.8	Netzwerkmodelle auf Si(111) für dünne Germaniumschichten	68
6.9	mögliche Versetzungsnetzwerke auf Si(111)	69
6.10	Versetzungsnetzwerk auf Si(111)	70
6.11	RSM der (513)-Reflexe von Germanium auf Si(111)	72
6.12	Restverzerrung in Germanium auf Si(111)	73
6.13	Verlauf der Restverzerrung in Germanium auf Si(111) beim Abkühlen . . .	74
7.1	RHEED-Bilder einer $1 \mu\text{m}$ dicken mit SME gewachsenen Germaniumschicht auf Si(001)	76
7.2	AFM-Bilder von $1 \mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten auf Si(001)	77
7.3	Detail AFM-Aufnahmen von $1 \mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten auf Si(001)	78
7.4	Hellfeld TEM-Aufnahmen von Querschnitten von $1 \mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten auf Si(001)	79
7.5	Hochaufgelöste $\omega/2\Theta$ -Scans der (004)-Reflexe von $1 \mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten auf Si(001)	80
7.6	RSM der (004)-Reflexe von $1 \mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten	81
7.7	Rockingkurven der (004)-Reflexe von $1 \mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten auf Si(001)	83
7.8	Weak-beam Dunkelfeld TEM-Abbildungen von $1 \mu\text{m}$ dicken Germaniumschichten auf Si(001)	86
7.9	$\vec{g} \cdot \vec{b}$ -Analyse des Versetzungsnetzwerks bei der SME von Germanium auf Si(001)	87
7.10	Hochaufgelöste TEM-Querschnittsaufnahme der Ge/Si(001)-Grenzfläche . .	87
7.11	Hochaufgelöste XTEM-Aufnahme einer Versetzung an der Ge/Si-Grenzfläche	88
7.12	Abhängigkeit der Oberflächenfacettierung von 8 ML dicken pseudomorphen Germaniumfilmen auf Si(001) von der Sb-Bedeckung	90

7.13	Relaxationsmechanismus bei der SME von Germanium auf Si(001)	93
7.14	LEED-Untersuchung der Oberflächenfacettierung von 8 <i>ML</i> dicken pseudomomorphen Germaniumfilmen auf Si(001) bei geringer Sb-Bedeckung	94
7.15	LEED-Untersuchung der Oberflächenfacettierung von 8 <i>ML</i> dicken pseudomomorphen Germaniumfilmen auf Si(001) bei vollständiger Sb-Bedeckung	95
7.16	AFM-Bilder nach Deposition von 8 <i>ML</i> Germanium	96
7.17	Hellfeld XTEM-Aufnahmen von 1 μm dicken Germaniumschichten auf Si(001)	97
7.18	Hochaufgelöste $\omega/2\Theta$ -Scans der (004)-Reflexe von 1 μm dicken Germaniumschichten auf Si(001) für unterschiedliche Sb-Bedeckungsgrade	98
7.19	EDXS-Profile von 1 μm dicken Germaniumschichten auf Si(001)	101
7.20	Diffusionskonstanten für die Diffusion von Silizium in Germanium	102
7.21	RSM der (113)-Reflexe von Germanium auf Si(001)	103
7.22	Restverzerrung in Germanium auf Si(001)	104
7.23	Verlauf der Restverzerrung in Germanium auf Si(111) und Si(001) beim Abkühlen	105
7.24	SIMS-Tiefenprofil einer 1 μm dicken Germaniumschicht auf Si(001)	107
7.25	XTEM-Aufnahmen von 1 μm dicken Germaniumschichten auf Si(001) und Si(111)	109
7.26	Hochaufgelöste $\omega/2\Theta$ -Scans von 1 μm dicken Germaniumschichten auf Si(001) und Si(111)	109
7.27	Sb-Oberflächenkonzentration aus SIMS-Messungen	110
8.1	Flächenladungsdichte und Hallbeweglichkeit der (111)-orientierten Probe	120
8.2	Flächenladungsdichte und Hallbeweglichkeit der (001)-orientierten Probe	122
8.3	Löcherhallbeweglichkeit in mit SME hergestellten Germaniumschichten	125
A.1	schichtdickenabhängige Halbwertsbreite einer Rockingkurve	133
A.2	Einfluss von Gitterverzerrung und Gitterverkipfung auf die Halbwertsbreite einer Rockingkurve	134

Tabellenverzeichnis

1.1	Verfahren zur Herstellung epitaktischer Germaniumschichten auf Siliziumsubstraten.	6
5.1	Reinigungsverfahren für Siliziumsubstrate	54
6.1	Experimentelle Ergebnisse zur Struktur von Versetzungsnetzwerken	67
7.1	ermittelte Diffusionskonstanten für die Diffusion von Silizium in Germanium	99
7.2	Übersicht über die Prozessabläufe	108

Literaturverzeichnis

- [1] MOORE, Gordon E.: Cramming more components onto integrated circuits. In: *Electronics* (1965), S. 114–117 1
- [2] LUNDSTROM, Mark: Moore's law forever? In: *Science* 299 (2003), S. 210–211 1
- [3] CHAU, Robert ; DOYLE, Brian ; DATTA, Suman ; KAVALIEROS, Jack ; ZHANG, Kevin: Integrated nanoelectronics for the future. In: *Nature Materials* 6 (2007), S. 810–812 1
- [4] NATORI, Kenji: Ballistic metal-oxide-semiconductor field effect transistor. In: *Journal of Applied Physics* 76 (1994), S. 4879–4890 1
- [5] LUNDSTROM, Mark: Elementary scattering theory of the Si MOSFET. In: *IEEE Electron Device Letters* 18 (1997), Nr. 7, S. 361–363 1
- [6] LUNDSTROM, M. S.: On the mobility versus drain current relation for a nanoscale MOSFET. In: *IEEE Electron Device Letters* 22 (2001), Nr. 6, S. 293–295 1
- [7] LUNDSTROM, M. ; REN, Z.: Essential physics of carrier transport in nanoscale MOSFETs. In: *IEEE Transactions on Electron Devices* 49 (2002), Nr. 1, S. 133–141 1
- [8] ANTONIADIS, Dimitri A.: MOSFET scalability limits and "New Frontier" devices. In: *2002 Symposium on VLSI Technology. Digest of Technical Papers.*, 2002, S. 2 – 5 1
- [9] ITRS. *International Technology Roadmap for Semiconductors. 2006 Update.* www.itrs.org. 2006 1
- [10] SHANG, H. ; FRANK, M. M. ; GUSEV, E. P. ; CHU, J. O. ; BEDELL, S. W. ; GUARINI, K. W. ; IEONG, M.: Germanium channel MOSFETs: Opportunities and challenges. In: *IBM Journal of Research and Development* 50 (2006), Nr. 4-5, S. 377–386 1, 2
- [11] CLAEYS, Cor (Hrsg.) ; SIMOEN, Eddy (Hrsg.): *Germanium-Based Technologies - From Materials to Devices.* Oxford, Amsterdam : Elsevier, 2007 1, 2, 19
- [12] CHAU, Robert ; BRASK, Justin ; DATTA, Suman ; DEWEY, Gilbert ; DOCZY, Mark ; DOYLE, Brian ; KAVALIEROS, Jack ; JIN, Ben ; METZ, Matthew ; MAJUMDAR, Amlan ; RADOSAVLJEVIC, Marko: Application of high-k gate dielectrics and metal gate electrodes to enable silicon and non-silicon logic nanotechnology. In: *Microelectronic Engineering* 80 (2005), S. 1 – 6 2

- [13] TOSHIBA CORPORATION. *Toshiba Develops a New High-k/Ge Gate Stack Technology for LSIs at 16 Nanometers (nm) Node and Beyond*. Press Release. 15 June 2009 2
- [14] ILES, P. A. ; YEH, Y.-C. M. ; HO, F. H. ; CHU, C.-L. ; CHENG, C.: High-efficiency (>20% AM0) GaAs solar cells grown on inactive-Ge substrates. In: *IEEE Electron Device Letters* 11 (1990), Nr. 4, S. 140–142 2
- [15] D'HONDT, M. ; YU, Z.-Q. ; DEPRETER, B. ; SYS, C. ; MOERMAN, I. ; DEMEESTER, P. ; MIJLEMANS, P.: High quality InGaAs/AlGaAs lasers grown on Ge substrates. In: *Journal of Crystal Growth* 195 (1998), S. 655–659 2, 4
- [16] TAKAMOTO, T. ; AGUI, T. ; IKEDA, E. ; KURITA, H.: High efficiency InGaP/InGaAs tandem solar cells on Ge substrates. In: *Conference Record of the Twenty-Eighth IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, 2000, S. 976–981 2
- [17] DERLUYNA, J. ; DESSEIN, K. ; FLAMAND, G. ; MOLSA, Y. ; POORTMANS, J. ; BORGHS, G. ; MOERMAN, I.: Comparison of MOVPE grown GaAs solar cells using different substrates and group-V precursors. In: *Journal of Crystal Growth* 247 (2003), S. 237–244 2
- [18] DIMROTH, F.: High-efficiency solar cells from III-V compound semiconductors. In: *Physica Status Solidi C* 3 (2006), Nr. 3, S. 373–379 2
- [19] UMICORE. *Listen. Create. Deliver. Umicore Electro-Optic Materials*. Marketing Brochure. June 2009 2
- [20] COLACE, L. ; MASINI, G. ; ASSANTO, G. ; LUAN, Hsin-Chiao ; WADA, K. ; KIMERLING, L. C.: Efficient high-speed near-infrared Ge photodetectors integrated on Si substrates. In: *Applied Physics Letters* 76 (2000), Nr. 10, S. 1231–1233 3
- [21] JUTZI, M. ; BERROTH, M. ; WÖHL, G. ; OEHME, M. ; KASPER, E.: Ge-on-Si vertical incidence photodiodes with 39-GHz bandwidth. In: *IEEE Photonics Technology Letters* 17 (2005), Nr. 7, S. 1510–1512 3, 6, 7
- [22] OKYAY, Ali K. ; NAYFEH, Ammar M. ; SARASWAT, Krishna C. ; YONEHARA, Takao ; MARSHALL, Ann ; MCINTYRE, Paul C.: High-efficiency metal-semiconductor-metal photodetectors on heteroepitaxially grown Ge on Si. In: *Optics Letters* 31 (2006), Nr. 17, S. 2565–2567 3
- [23] AHN, Donghwan ; YIN HONG, Ching ; LIU, Jifeng ; GIZIEWICZ, Wojciech ; BEALS, Mark ; KIMERLING, Lionel C. ; MICHEL, Jurgen ; CHEN, Jian ; KÄRTNER, Franz X.: High performance, waveguide integrated Ge photodetectors. In: *Optics Express* 15 (2007), Nr. 7, S. 3916–3921 3

-
- [24] KANG, Yimin ; LIU, Han-Din ; MORSE, Mike ; PANICCIA, Mario J. ; ZADKA, Moshe ; LITSKI, Stas ; SARID, Gadi ; PAUCHARD, Alexandre ; KUO, Ying-Hao ; CHEN, Hui-Wen ; ZAOUI, Wissem S. ; BOWERS, John E. ; BELING, Andreas ; MCINTOSH, Dion C. ; ZHENG, Xiaoguang ; CAMPBELL, Joe C.: Monolithic germanium/silicon avalanche photodiodes with 340 GHz gain-bandwidth product. In: *Nature Photonics* 3 (2009), Nr. 1, S. 59–63 3
- [25] LEGOUES, F. K.: The effect of strain on the formation of dislocations at the SiGe/Si interface. In: *MRS Bulletin* 21 (1996), Nr. 4, S. 38–44 3
- [26] ISMAIL, K.: Effect of dislocations in strained Si/SiGe on electron mobility. In: *Journal of Vacuum Science and Technology B* 14 (1996), Nr. 4, S. 2776–2779 3, 4
- [27] TERZIEVA, V. ; SOURIAU, L. ; CAYMAX, M. ; BRUNCO, D.P. ; MOUSSA, A. ; ELSHOCHT, S. V. ; LOO, R. ; CLEMENTE, F. ; SATTI, A. ; MEURIS, Marc: Benefits and side effects of high temperature anneal used to reduce threading dislocation defects in epitaxial Ge layers on Si substrates. In: *Thin Solid Films* 517 (2008), Nr. 1, S. 172 – 177 4, 5, 6, 98, 99
- [28] HUANG, C. H. ; YANG, M. Y. ; CHIN, Albert ; CHEN, W. J. ; ZHU, C. X. ; CHO, B. J. ; LI, M.-E. ; KWONG, D. L.: Very low defects and high performance Ge-On-Insulator p-MOSFETs with Al₂O₃ gate dielectrics. In: *2003 Symposium on VLSI Technology. Digest of Technical Papers.*, 2003, S. 119–120 4, 6, 7
- [29] TAKAGI, Shin-ichi ; TORIUMI, Akira ; IWASE, Masao ; TANGO, Hiroyuki: On the universality of inversion layer mobility in Si MOSFETs: Part II - Effects of surface orientation. In: *IEEE Transactions on Electron Devices* 41 (1994), Nr. 12, S. 2363–2368 4
- [30] TAKAGI, Shin-ichi: Re-examination of subband structure engineering in ultra-short channel MOSFETs under ballistic carrier transport. In: *2003 Symposium on VLSI Technology. Digest of Technical Papers.*, 2003, S. 115–116 4
- [31] TAKAGI, Shin-ichi: Material and structure design for advanced CMOS channels. In: *International Meeting for Future of Electron Devices*, 2004, S. 117–118 4, 6, 7
- [32] LOW, Tony ; LI, M. F. ; SHEN, Chen ; YEO, Yee-Chia ; HOU, Y. T. ; ZHU, Chunxiang ; CHIN, Albert ; KWONG, D. L.: Electron mobility in Ge and strained-Si channel ultrathin-body metal-oxide semiconductor field-effect transistors. In: *Applied Physics Letters* 85 (2004), Nr. 12, S. 2402–2404 4
- [33] LOW, Tony ; LI, Ming-Fu ; SAMUDRA, Ganesh ; YEO, Yee-Chia ; ZHU, Chunxiang ; CHIN, Albert ; KWONG, Dim-Lee: Modeling study of the impact of surface roughness

- on silicon and germanium UTB MOSFETs. In: *IEEE Transactions on Electron Devices* 52 (2005), Nr. 11, S. 2430–2439 4
- [34] MONROE, Don ; XIE, Y. H. ; FITZGERALD, E. A. ; SILVERMAN, P. J. ; WATSON, G. P.: Comparison of mobility-limiting mechanisms in highmobility $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ heterostructures. In: *Journal of Vacuum Science and Technology B* 11 (1993), Nr. 4, S. 1731–1737 4
- [35] KROEMER, Herbert: Polar-on-nonpolar epitaxy. In: *Journal of Crystal Growth* 81 (1987), Nr. 1-4, S. 193 – 204 4
- [36] ISHIKAWA, Yasuhiko ; WADA, Kazumi ; CANNON, Douglas D. ; LIU, Jifeng ; LUAN, Hsin-Chiao ; KIMERLING, Lionel C.: Strain-induced band gap shrinkage in Ge grown on Si substrate. In: *Applied Physics Letters* 82 (2003), Nr. 13, S. 2044–2046 4
- [37] VOGELSANG, T. ; HOFMANN, K. R.: Electron mobilities and high-field drift velocities in strained silicon on silicon-germanium substrates. In: *IEEE Transactions on Electron Devices* 39 (1992), Nr. 11, S. 2641–2642 4
- [38] VOGELSANG, T. ; HOFMANN, K. R.: Electron-transport in strained Si layers on $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ substrates. In: *Applied Physics Letters* 63 (1993), Nr. 2, S. 186–188 4
- [39] EAGLESHAM, D. J. ; CERULLO, M.: Dislocation-free Stranski-Krastanow growth of Ge on Si(100). In: *Physical Review Letters* 64 (1990), Nr. 16, S. 1943–1946 4, 24
- [40] EAGLESHAM, D. J. ; CERULLO, M.: Low-temperature growth of Ge on Si(100). In: *Applied Physics Letters* 58 (1991), Nr. 20, S. 2276–2278 4, 5, 24, 82, 85
- [41] BARIBEAU, J. M. ; JACKMAN, T. E. ; HOUGHTON, D. C. ; MAIGNÉ, P. ; DENHOFF, M. W.: Growth and characterization of $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ and Ge epilayers on Si(001). In: *Journal of Applied Physics* 63 (1988), Nr. 12, S. 5738–5746 5, 6
- [42] CHEN, H. ; GUO, L. W. ; CUI, Q. ; HU, Q. ; HUANG, Q. ; ZHOU, J. M.: Low-temperature buffer layer for growth of a low-dislocation-density SiGe layer on Si by molecular-beam epitaxy. In: *Journal of Applied Physics* 79 (1996), Nr. 2, S. 1167–1169 5, 6
- [43] LI, J. H. ; PENG, C. S. ; WU, Y. ; DAI, D. Y. ; ZHOU, J. M. ; MAI, Z. H.: Relaxed $\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$ layers grown on low-temperature Si buffers with low threading dislocation density. In: *Applied Physics Letters* 71 (1997), Nr. 21, S. 3132–3134 5, 6
- [44] PENG, C. S. ; ZHAO, Z. Y. ; CHEN, H. ; LI, J. H. ; LI, Y. K. ; GUO, L. W. ; DAI, D. Y. ; HUANG, Q. ; ZHOU, J. M. ; ZHANG, Y. H. ; SHENG, T. T. ; TUNG, C. H.: Relaxed $\text{Ge}_{0.9}\text{Si}_{0.1}$ alloy layers with low threading dislocation densities grown on

- low-temperature Si buffers. In: *Applied Physics Letters* 72 (1998), Nr. 24, S. 3160–3162
5
- [45] PENG, C. S. ; KAWANAMI, H. ; LI, Y. K. ; LI, G. H. ; HUANG, Q. ; ZHOU, J. M.: Study of Ge_{0.96}Si_{0.04} epilayers grown on Si(001) at high temperature. In: *Journal of Crystal Growth* 227-228 (2001), S. 786 – 790 5, 6
- [46] MALTA, D. P. ; POSTHILL, J. B. ; MARKUNAS, R. J. ; HUMPHREYS, T. P.: Low-defect-density germanium on silicon obtained by a novel growth phenomenon. In: *Applied Physics Letters* 60 (1992), Nr. 7, S. 844–846 5, 6
- [47] LUAN, Hsin-Chiao ; LIM, Desmond R. ; LEE, Kevin K. ; CHEN, Kevin M. ; SANDLAND, Jessica G. ; WADA, Kazumi ; KIMERLING, Lionel C.: High-quality Ge epilayers on Si with low threading-dislocation densities. In: *Applied Physics Letters* 75 (1999), Nr. 19, S. 2909–2911 5, 6
- [48] HARTMANN, J. M. ; ABBADIE, A. ; PAPON, A. M. ; HOLLIGER, P. ; ROLLAND, G. ; BILLON, T. ; FÉDÉLI, J. M. ; ROUVIÈRE, M. ; VIVIEN, L. ; LAVAL, S.: Reduced pressure-chemical vapor deposition of Ge thick layers on Si(001) for 1.3-1.55- μm photodetection. In: *Journal of Applied Physics* 95 (2004), Nr. 10, S. 5905–5913 5, 6, 19, 98, 99, 100, 102
- [49] NAYFEH, Ammar ; CHUI, Chi O. ; SARASWAT, Krishna C. ; YONEHARA, Takao: Effects of hydrogen annealing on heteroepitaxial-Ge layers on Si: Surface roughness and electrical quality. In: *Applied Physics Letters* 85 (2004), Nr. 14, S. 2815–2817 5, 6
- [50] SARASWAT, Krishna C. ; CHUI, Chi O. ; KRISHNAMOHAN, Tejas ; NAYFEH, Ammar ; MCINTYRE, Paul: Ge based high performance nanoscale MOSFETs. In: *Microelectronic Engineering* 80 (2005), S. 15–21 5
- [51] HARTMANN, J. M. ; DAMLENCOURT, J.-F. ; BOGUMILOWICZ, Y. ; HOLLIGER, P. ; ROLLAND, G. ; BILLON, T.: Reduced pressure-chemical vapor deposition of intrinsic and doped Ge layers on Si(001) for microelectronics and optoelectronics purposes. In: *Journal of Crystal Growth* 274 (2005), S. 90–99 5, 19, 98, 99, 100, 102
- [52] YEO, Chia C. ; CHO, Byung J. ; GAO, F. ; LEE, S. J. ; LEE, H. M. ; YU, C. Y. ; LIU, C. W. ; TANG, J. L. ; LEE, T. W.: Electron mobility enhancement using ultrathin pure Ge on Si substrate. In: *IEEE Electron Device Letters* 26 (2005), Nr. 10, S. 761–763 5, 6
- [53] FITZGERALD, E. A. ; XIE, Y.-H. ; GREEN, M. L. ; BRASEN, D. ; KORTAN, A. R. ; MICHEL, J. ; MII, Y.-J. ; WEIR, B. E.: Totally relaxed Ge_xSi_{1-x} layers with low threading dislocation densities grown on Si substrates. In: *Applied Physics Letters* 59 (1991), Nr. 7, S. 811–813 5, 6

- [54] LEGOUES, F. K. ; MEYERSON, B. S. ; MORAR, J. F.: Anomalous strain relaxation in SiGe thin films and superlattices. In: *Phys. Rev. Lett.* 66 (1991), Jun, Nr. 22, S. 2903–2906 5
- [55] HÖCK, G. ; KOHN, E. ; ROSENBLAD, C. ; VON KÄNEL, H. ; HERZOG, H.-J. ; KÖNIG, U.: High hole mobility in Si_{0.17}Ge_{0.83} channel metal-oxide-semiconductor field-effect transistors grown by plasma-enhanced chemical vapor deposition. In: *Applied Physics Letters* 76 (2000), Nr. 26, S. 3920–3922 5
- [56] LEE, Minjoo L. ; LEITZ, C. W. ; CHENG, Z. ; PITERA, A. J. ; LANGDO, T. ; CURRIE, M. T. ; TARASCHI, G. ; FITZGERALD, E. A. ; ANTONIADIS, Dimitri A.: Strained Ge channel p-type metal-oxide-semiconductor field-effect transistors grown on Si_{1-x}Ge_x/Si virtual substrates. In: *Applied Physics Letters* 79 (2001), Nr. 20, S. 3344–3346 5
- [57] T. IRISAWA, T. Hattori K. Nakagawa S. K. ; SHIRAKI, Y.: Ultrahigh room-temperature hole Hall and effective mobility in Si_{0.3}Ge_{0.7}/Ge/Si_{0.3}Ge_{0.7} heterostructures. In: *Applied Physics Letters* 81 (2002), Nr. 5, S. 847–849 5
- [58] RITENOUR, A. ; YU, S. ; LEE, M. L. ; LU, N. ; BAI, W. ; PITERA, A. ; FITZGERALD, E. A. ; KWONG, D. L. ; ANTONIADIS, D.A.: Epitaxial strained germanium p-MOSFETs with HfO₂ gate dielectric and TaN gate electrode. In: *IEEE International Electron Devices Meeting* (2003), S. 18.2.1–4 5
- [59] LEE, M. L. ; FITZGERALD, E. A.: Strained Si/strained Ge dual-channel heterostructures on relaxed Si_{0.5}Ge_{0.5} for symmetric mobility p-type and n-type metal-oxide semiconductor field-effect transistors. In: *Applied Physics Letters* 83 (2003), Nr. 20, S. 4202–4204 5
- [60] SHANG, H. ; CHU, J. O. ; WANG, X. ; MOONEY, P. M. ; LEE, K. ; OTT, J. ; RIM, K. ; CHAN, K. ; GUARINI, K. ; IEONG, M.: Channel design and mobility enhancement in strained germanium buried channel MOSFETs. In: *2004 Symposium on VLSI Technology, Digest of Technical Papers*, 2004, S. 19.5.1–2 5
- [61] CURRIE, M. T. ; SAMAVEDAM, S. B. ; LANGDO, T. A. ; LEITZ, C. W. ; FITZGERALD, E. A.: Controlling threading dislocation densities in Ge on Si using graded SiGe layers and chemical-mechanical polishing. In: *Applied Physics Letters* 72 (1998), Nr. 14, S. 1718–1720 5, 6
- [62] KASPER, Erich ; LYUTOVICH, Klara ; BAUER, Matthias ; OEHME, Michael: New virtual substrate concept for vertical MOS transistors. In: *Thin Solid Films* 336 (1998), S. 319–322 6, 7

- [63] BAUER, M. ; LYUTOVICH, K. ; OEHME, M. ; KASPER, E. ; HERZOG, H.-J. ; ERNST, F.: Relaxed SiGe buffers with thicknesses below 0.1 μm . In: *Thin Solid Films* 369 (2000), S. 152–156 6, 7
- [64] OSTEN, H. J. ; BUGIEL, E.: Relaxed $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x / \text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ buffer structures with low threading dislocation density. In: *Applied Physics Letters* 70 (1997), Nr. 21, S. 2813–2815 6, 7
- [65] KELLY, D. Q. ; WIEDMANN, I. ; DONNELLY, J. P. ; JOSHI, S. V. ; DEY, S. ; BANERJEE, S. K. ; GARCIA-GUTIERREZ, D. I. ; JOSE-YACAMAN, M.: Thin germanium-carbon alloy layers grown directly on silicon for metal-oxide-semiconductor device applications. In: *Applied Physics Letters* 88 (2006), Nr. 15, S. 152101 6, 7
- [66] TEZUKA, Tsutomu ; SUGIYAMA, Naoharu ; MIZUNO, Tomohisa ; SUZUKI, Masamichi ; TAKAGI, Shin-ichi: A novel fabrication technique of ultrathin and relaxed SiGe buffer layers with high Ge fraction for sub-100 nm strained Silicon-on-Insulator MOSFETs. In: *Japanese Journal of Applied Physics* 40 (2001), Nr. Part 1, No. 4B, S. 2866–2874 6, 7
- [67] NAKAHARAI, Shu ; TEZUKA, Tsutomu ; SUGIYAMA, Naoharu ; MORIYAMA, Yoshihiko ; TAKAGI, Shin-ichi: Characterization of 7-nm-thick strained Ge-on-insulator layer fabricated by Ge-condensation technique. In: *Applied Physics Letters* 83 (2003), Nr. 17, S. 3516–3518 6, 7
- [68] MAEDA, Tatsuro ; IKEDA, Keiji ; NAKAHARAI, Shu ; TEZUKA, Tsutomu ; SUGIYAMA, Naoharu ; MORIYAMA, Yoshihiko ; TAKAGI, Shin-ichi: High mobility Ge-on-Insulator p-channel MOSFETs using Pt germanide schottky source/drain. In: *IEEE Electron Device Letters* 26 (2005), Nr. 2, S. 102–104 6, 7
- [69] LIU, Yaocheng ; DEAL, Michael D. ; PLUMMER, James D.: High-quality single-crystal Ge on insulator by liquid-phase epitaxy on Si substrates. In: *Applied Physics Letters* 84 (2004), Nr. 14, S. 2563–2565 6, 7
- [70] LIU, Yaocheng ; GOPALAFISHAN, Kailash ; GRIFFIN, Peter B. ; MA, Kai ; DEAL, Michael D. ; PLUMMER, James D.: MOSFETs and hgh-speed photodetectors on Ge-on-Insulator substrates fabricated using rapid melt growth. In: *IEDM2004*, 2004, S. 40.4.1–4 6, 7
- [71] YU, D. S. ; HUANG, C. H. ; CHIN, Albert ; ZHU, Chunxiang ; LI, M. F. ; CHO, Byung J. ; ; KWONG, Dim-Lee: Al_2O_3 -Ge-On-Insulator n- and p-MOSFETs with fully NiSi and NiGe dual gates. In: *IEEE Electron Device Letters* 25 (2004), Nr. 3, S. 138–140 7

- [72] YU, D. S. ; CHIANG, K. C. ; CHENG, C. F. ; CHIN, Albert ; ZHU, Chunxiang ; LI, M. F. ; KWONG, Dim-Lee: Fully silicided NiSi:Hf-LaAlO₃/SC-GOI n-MOSFETs with high electron mobility. In: *IEEE Electron Device Letters* 25 (2004), Nr. 8, S. 559–561 7
- [73] GARCIA-GUTIERREZA, D. I. ; JOSÉ-YACAMÁN, M. ; LU, Shifeng ; KELLY, D. Q. ; BANERJEE, S. K.: Carbon segregation as a strain relaxation mechanism in thin germanium-carbon layers deposited directly on silicon. In: *Journal of Applied Physics* 100 (2006), S. 044323 7
- [74] KELLY, D.Q. ; DONNELLY, J.P. ; DEY, S. ; JOSHI, S.V. ; GUTIERREZ, D.I.G. ; YACAMAN, M.J. ; BANERJEE, S.K.: BC high-k/metal gate Ge/C alloy pMOSFETs fabricated directly on Si (100) substrates. In: *IEEE Electron Device Letters* 27 (2006), Nr. 4, S. 265–268 7
- [75] LANGDO, T. A. ; LEITZ, C. W. ; CURRIE, M. T. ; FITZGERALD, E. A. ; LOCHTEFELD, A. ; ANTONIADIS, D. A.: High quality Ge on Si by epitaxial necking. In: *Applied Physics Letters* 76 (2000), Nr. 25, S. 3700–3702 7
- [76] COPEL, M. ; REUTER, M. C. ; KAXIRAS, E. ; TROMP, R. M.: Surfactants in epitaxial growth. In: *Physical Review Letters* 63 (1989), Nr. 6, S. 632–635 7, 26
- [77] ROYER, L.: Recherches expérimentales sur l'épitaxie ou orientation mutuelle de cristaux d'espèces différentes. In: *Bull. Soc. franç. Minér. Crist.* 51 (1928), S. 7–159 9
- [78] SCHNEIDER, H. G.: Bemerkung zur Terminologie des Begriffes Epitaxie. In: *Acta Crystillographica A* 16 (1963), S. 1261–1262 9
- [79] VEGARD, L.: Die Konstitution der Mischkristalle und die Raumfüllung der Atome. In: *Zeitschrift für Physik* 5 (1921), S. 17–26 9
- [80] HIRTH, John P. ; LOTHE, Jens: *Theory of Dislocations*. 2nd. New York : Wiley-Interscience, 1982 9, 11
- [81] NABARRO, Frank Reginald N.: *Theory of Crystal Dislocations*. 31 East 2nd Street, Mineola, N.Y. 11501, USA : Dover Publications, Inc., 1987 9
- [82] HULL, Robert ; BEAN, John C.: Misfit dislocations in lattice-mismatched epitaxial films. In: *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences* 17 (1992), S. 507–546 9, 17
- [83] HULL, R.: Misfit strain and accommodation in SiGe heterostructures. In: HULL, Robert (Hrsg.) ; BEAN, John C. (Hrsg.): *Germanium Silicon: Physics and Materials* Bd. 56. San Diego London : Academic Press, 1999, Kapitel 3, S. 102–164 9, 11, 21

-
- [84] HINCKLEY, J. M. ; SINGH, J.: Influence of substrate composition and crystallographic orientation on the band structure of pseudomorphic Si-Ge alloy films. In: *Physical Review B* 42 (1990), Nr. 6, S. 3546–3566 14
- [85] VAN DE WALLE, Chris G. ; MARTIN, Richard M.: Theoretical calculations of heterojunction discontinuities in the Si/Ge system. In: *Physical Review B* 34 (1986), Nr. 8, S. 5621–5634 14
- [86] BRANTLEY, W. A.: Calculated elastic constants for stress problems associated with semiconductor devices. In: *Journal of Applied Physics* 44 (1973), Nr. 1, S. 534–535 14, 62
- [87] BAUER, Ernst: Phänomenologische Theorie der Kristallabscheidung an Oberflächen. In: *Zeitschrift für Kristallographie* 110 (1958), S. 372–394 15
- [88] VOLMER, M. ; WEBER, A.: Keimbildung in übersättigten Gebilden. In: *Zeitschrift für Physikalische Chemie* 119 (1926), S. 277–301 15
- [89] FRANK, F. C. ; VAN DER MERWE, J. H.: One-dimensional dislocations. I. Static theory. In: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* 198 (1949), Nr. 1053, S. 205–216 15
- [90] FRANK, F. C. ; VAN DER MERWE, J. H.: One-dimensional dislocations. II. Misfitting monolayers and oriented overgrowth. In: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* 198 (1949), Nr. 1053, S. 216–225 15
- [91] STRANSKI, I. N. ; KRASTANOV, L.: Zur Theorie der orientierten Ausscheidung von Ionenkristallen aufeinander. In: *Sitzungsberichte der Mathematisch-Naturwissenschaftliche Klasse der Akademie der Wissenschaften in Wien. Abteilung IIb*. 146 (1938), S. 797–810 15
- [92] SNYDER, C. W. ; MANSFIELD, J. F. ; ORR, B. G.: Kinetically controlled critical thickness for coherent islanding and thick highly strained pseudomorphic films of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ on GaAs(100). In: *Physical Review B* 46 (1992), Nr. 15, S. 9551–9554 16, 18
- [93] TERSOFF, J. ; LEGOUES, F. K.: Competing relaxation mechanisms in strained layers. In: *Physical Review Letters* 72 (1994), Nr. 22, S. 3570–3573 16, 18, 28
- [94] LEE, Minjoo L. ; ANTONIADIS, Dimitri A. ; FITZGERALD, Eugene A.: Challenges in epitaxial growth of SiGe buffers on Si (111), (110), and (112). In: *Thin Solid Films* 508 (2006), Nr. 1-2, S. 136–139 17

- [95] ALBRECHT, M. ; STENKAMP, D. ; STRUNK, H. P. ; JÄGER, W. ; HANSSON, P. O. ; BAUSER, E.: Structure of dislocations formed in Ge(Si) by glide on secondary glide planes. In: *Microscopy of Semiconducting Materials* 134 (1993), S. 77–82 17, 24, 85, 89
- [96] ALBRECHT, M. ; CHRISTIANSEN, S. ; HANSSON, P. O. ; STRUNK, H. P. ; BAUSER, E.: Formation of misfit dislocation networks in Ge/Si as dependent on the substrate orientation. In: *Solid State Phenomena* 37-38 (1994), S. 41–46 17, 24, 85, 89
- [97] THEODOROU, G.: The Si/Ge interface: structure, energy and interdiffusion. In: KASPER, E. (Hrsg.) ; LYUTOVICH, K. (Hrsg.): *Properties of Silicon Germanium and SiGe:Carbon*. INSPEC, The Institution of electrical engineers, London, UK, 2000 (EMIS Datareviews Series 24), Kapitel 2, S. 59–62 19, 20
- [98] J. RÄISÄNEN, J. H. ; ANTILA, A.: The diffusion of silicon in germanium. In: *Solid-State Electronics* 24 (1981), S. 33–36 19, 100, 102
- [99] UPPAL, Suresh ; WILLOUGHBY, A. F. W. ; BONAR, J. M. ; COWERN, N. E. B. ; MORRIS, R. J. H. ; DOWSETT, M. G.: Diffusion of ion-implanted boron and silicon into germanium. In: *Materials Research Society Symposium Proceedings* 809 (2004), S. 237–242 19, 100, 102
- [100] SÖDERVALL: Diffusion of silicon and phosphorus into germanium as studied by secondary ion mass spectrometry. In: *Diffusion and defect data. Pt. A, Defect and diffusion forum* 143 (1997), S. 1053–1058 19, 100, 102
- [101] SILVESTRI, H. H. ; BRACHT, H. ; HANSEN, J. L. ; LARSEN, A. N. ; HALLER, E. E.: Diffusion of silicon in crystalline germanium. In: *Semiconductor Science and Technology* 21 (2006), JUN, Nr. 6, S. 758–762 19, 100, 102
- [102] LIAO, X. Z. ; ZOU, J. ; COCKAYNE, D. J. H. ; QIN, J. ; JIANG, Z. M. ; WANG, X. ; LEON, R.: Strain relaxation by alloying effects in Ge islands grown on Si(001). In: *Physical Review B* 60 (1999), Nr. 23, S. 15605–15608 20, 25, 100
- [103] KOCH, R. ; WASSERMANN, B. ; WEDLER, G.: On the role of interdiffusion during the growth of Ge on Si(001) and Si(111). In: *Defect and Diffusion and defect data. Pt. A, Defect and diffusion forum* 183-185 (2000), S. 95–102 20, 24, 25, 100
- [104] MEDEIROS-RIBEIRO, G. ; MALACHIAS, A. ; KYCIA, S. ; MAGALHAES-PANIAGO, R. ; KAMINS, T. I. ; WILLIAMS, R. S.: Elastic energy mapping of epitaxial nanocrystals. In: *Applied Physics A* 80 (2005), S. 1211–1214 20, 25, 100
- [105] AKIS, R. ; FERRY, D. K.: Simulations of germanium epitaxial growth on the silicon (100) surface incorporating intermixing. In: *Physica E* 32 (2006), S. 207–210 20

-
- [106] ALEXANDER, Helmut: Plastische Verformung von Germanium-Einkristallen. In: *Zeitschrift für Metallkunde* 52 (1961), Nr. 5, S. 344–352 21, 74
- [107] SERBENA, F. C. ; ROBERTS, S. G.: The brittle-to-ductile transition in Germanium. In: *Acta Metallurgica et Materialia* 42 (1994), Nr. 7, S. 2505–10 21, 74
- [108] ALBRECHT, M. ; CHRISTIANSEN, S. ; STRUNK, H. P. ; HANSSON, P. O. ; BAUSER, E.: Stress relaxation mechanisms by dislocations in the system Ge on Si. In: *Solid State Phenomena* 32-33 (1993), S. 433–444 24, 85
- [109] MO, Y.: Kinetic pathway in Stranski-Krastanov growth of Ge on Si(001). In: *Physical Review Letters* 65 (1990), Nr. 8, S. 1020–1023 24
- [110] MEDEIROS-RIBEIRO, Gilberto ; BRATKOVSKI, Alexander M. ; KAMINS, Theodore I. ; OHLBERG, Douglas A. A. ; WILLIAMS, R. S.: Shape transition of germanium nanocrystals on a silicon (001) surface from pyramids to domes. In: *Science* 297 (1998), S. 353–355 24
- [111] CULLIS, A.G. ; BOOKER, G.R.: The epitaxial growth of silicon and germanium films on (111) silicon surfaces using UHV sublimation and evaporation techniques. In: *Journal of Crystal Growth* 9 (1971), S. 132 – 138 24
- [112] EAGLESHAM, D. J. ; UNTERWALD, F. C. ; JACOBSON, D. C.: Growth morphology and the equilibrium shape: The role of 'surfactants' in Ge/Si island formation. In: *Physical Review Letters* 70 (1993), Nr. 7, S. 966–969 24, 27
- [113] GUNNELLA, R. ; CASTRUCCI, P. ; PINTO, N. ; DAVOLI, I. ; SÉBILLEAU, D. ; CRESCENZI, M. D.: X-ray photoelectron-diffraction study of intermixing and morphology at the Ge/Si(001) and Ge/Sb/Si(001) interface. In: *Phys. Rev. B* 54 (1996), Nr. 12, S. 8882–8891 25, 28, 100
- [114] EGELHOFF, JR., W. F. ; STEIGERWALD, D. A.: The role of adsorbed gases in metal on metal epitaxy. In: *Journal of Vacuum Science and Technology A* 7 (1989), Nr. 3, S. 2167–2173 25
- [115] DE ROMÉ DE L'ISLE, Jean-Baptiste: *Cristallographie*. Bd. 1-4. 2nd. Paris : Imprimerie de Monsieur, 1783 25
- [116] KANDEL, Daniel ; KAXIRAS, Efthimios: The surfactant effect in semiconductor thin-film growth. In: *Solid State Physics* 54 (2000), S. 219–262 26
- [117] TRENHAILE, B. R. ; XU, G. J. ; WEAVER, J. H.: Germanium growth on Br-terminated Si(100). In: *Surface Science* 600 (2006), Nr. 14, S. 2907–2912 26
- [118] eigene Literturrecherche in der INSPEC-Datenbank (Stand:2009) 27

- [119] VOIGTLÄNDER, B. ; ZINNER, A.: Surfactant-mediated epitaxy of Ge on Si(111): The role of kinetics and characterization of the Ge layers. In: *Journal of Vacuum Science and Technology A* 12 (1994), Nr. 4, S. 1932–1937 27, 57, 71
- [120] KANDEL, Daniel ; KAXIRAS, Efthimios: Surfactant mediated crystal growth of semiconductors. In: *Physical Review Letters* 75 (1995), Nr. 14, S. 2742–2745 27
- [121] ANTONS, Armin: *First-principles investigation of initial stages of surfactant mediated growth on the Si(111) substrate*, RWTH Aachen, Diss., 2001 27
- [122] SCHROEDER, K. ; ANTONS, A. ; BERGER, R. ; BLÜGEL, S.: Surfactant mediated heteroepitaxy versus homoepitaxy: Kinetics for group-IV adatoms on As-passivated Si(111) and Ge(111). In: *Physical Review Letters* 88 (2002), Nr. 4, S. 046101/1–046101/4 27, 117
- [123] LIU, En-Zuo ; WANG, Chong-Yu ; WANG, Jian-Tao: Dimer-breaking-assisted exchange mechanism in surfactant-mediated epitaxial growth of Ge on Si(001): Ab initio total energy calculations. In: *Physical Review B* 76 (2007), S. 193301 27
- [124] OSTEN, H. J.: Modification of growth modes in lattice-mismatched epitaxial systems: Si/Ge. In: *Physica Status Solidi A* 145 (1994), S. 235–245 27, 29
- [125] HORN-VON HOEGEN, M. ; MÜLLER, B. H. ; AL-FALOU, A. ; HENZLER, M.: Surfactant induced reversible changes of surface morphology. In: *Physical Review Letters* 71 (1993), Nr. 19, S. 3170–3173 28, 89, 91, 92
- [126] HORN-VON HOEGEN, M. ; MÜLLER, B. H. ; AL-FALOU, A.: Strain relief by micro-roughness in surfactant-mediated growth of Ge on Si(001). In: *Physical Review B* 50 (1994), Nr. 16, S. 11640–11 652 28, 29, 30, 75, 89, 92
- [127] HORN-VON HOEGEN, M. ; AL-FALOU, A. ; MÜLLER, B. H. ; KÖHLER, U. ; ANDER-SOHN, L. ; DAHLHEIMER, B. ; HENZLER, M.: Surfactant-stabilized strained Ge cones on Si(001). In: *Physical Review B* 49 (January 1994), Nr. 4, S. 2637–2650 28, 89, 92
- [128] HORN-VON HOEGEN, M. ; POOK, M. ; AL-FALOU, A. ; MÜLLER, B. H. ; HENZLER, M.: The interplay of surface morphology and strain relief in surfactant mediated growth of Ge on Si(111). In: *Surface Science* 284 (1993), S. 53–66 28, 30, 89
- [129] HORN-VON HOEGEN, M. ; AL-FALOU, A. ; PIETSCH, H. ; MÜLLER, B. H. ; HENZLER, M.: Formation of Interfacial Dislocation Network in Surfactant Mediated Growth of Ge on Si(111) Investigated by SPA-LEED. I. In: *Surface Science* 298 (1993), S. 29–42 28, 30, 67, 68, 73, 89
- [130] KAMMLER, M.: *Surfactant-Modifizierte Epitaxie von Germanium auf Silizium(111)*, Universität Hannover, Diss., 2001 28, 30, 53, 54, 57, 89, 123

- [131] ZAHL, P.: *Spannungsmessung bei der Epitaxie*, Universität Hannover, Diss., 2002 28, 30, 52, 57, 71, 72, 73, 89
- [132] ZAHL, P. ; KURY, P. ; HORN-VON HOEGEN, M.: Interplay of surface morphology, strain relief, and surface stress during surfactant mediated epitaxy of Ge on Si. In: *Applied Physics A* A69 (1999), S. 481–488 28, 30, 57, 71, 89
- [133] THORNTON, J. M. C. ; WILLIAMS, A. A. ; MACDONALD, J. E. ; SILFHOUT, R. G. V. ; DER VEEN, J. F. V. ; FINNEY, M. ; NORRIS, C.: The influence of Sb as a surfactant on the strain relaxation of Ge/Si(001). In: *Journal of Vacuum Science and Technology B* 9 (1991), Nr. 4, S. 2146–2149 28, 29
- [134] THORNTON, J. M. C. ; WILLIAMS, A. A. ; MACDONALD, J. E. ; SILFHOUT, R. G. V. ; FINNEY, M. S. ; NORRIS, C.: Strain relaxation during the surfactant modified epitaxial growth of Ge/Si(001). In: *Surface Science* 273 (1992), S. 1–8 28, 29
- [135] OSTEN, H. J. ; KLATT, J.: In situ monitoring of strain relaxation during antimony-mediated growth of Ge and $\text{Ge}_{1-y}\text{C}_y$ layers on Si(001) using reflection high energy electron diffraction. In: *Applied Physics Letters* 65 (1994), Nr. 5, S. 630–2 28, 29
- [136] KRÜGER, D. ; KURPS, R. ; OSTEN, H. J. ; LIPPERT, G. ; ROESER, D.: Characterization of surfactant introduction into germanium-rich $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ molecular beam epitaxy layer growth on silicon by means of secondary-ion mass spectrometry and auger electron spectroscopy. In: *Thin Solid Films* 221 (1992), S. 221 29
- [137] OSTEN, H.J. ; ZEINDL, H.P. ; BUGIEL, E.: Considerations about the critical thickness for pseudomorphic $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ growth on Si(001). In: *Journal of Crystal Growth* 143 (1994), S. 194–199 29
- [138] PORTAVOCE, A. ; BERBEZIER, I. ; RONDA, A.: Sb-surfactant-mediated growth of Si and Ge nanostructures. In: *Physical Review B* 69 (2004), S. 155416(1–8) 30
- [139] LEGOUES, F. K. ; HORN-VON HOEGEN, M. ; COPEL, M. ; TROMP, R. M.: Strain-relief mechanism in surfactant-grown epitaxial germanium films on Si(111). In: *Physical Review B* 44 (1991), Nr. 23, S. 12894–12902 30, 67
- [140] HORN-VON HOEGEN, M. ; LEGOUES, F. K. ; COPEL, M. ; REUTER, M. C. ; TROMP, R. M.: Defect self-annihilation in surfactant-mediated epitaxial growth. In: *Physical Review Letters* 67 (1991), Nr. 9, S. 1130–1133 30, 71
- [141] REINKING, D. ; KAMMLER, M. ; HORN-VON HOEGEN, M. ; HOFMANN, K. R.: Enhanced Sb segregation in surfactant-mediated-heteroepitaxy: High-mobility, low-doped Ge on Si. In: *Applied Physics Letters* 71 (1997), Nr. 7, S. 924–926 31, 57, 106, 117

- [142] REINKING, D. ; KAMMLER, M. ; HOFFMANN, N. ; HOFMANN, K. R. ; HORN-VON HOEGEN, M.: Fabrication of high-mobility Ge p-channel MOSFETs on Si substrates. In: *Electronics Letters* 35 (1999), Nr. 6, S. 503–504 31, 57
- [143] REINKING, D. ; KAMMLER, M. ; HOFFMANN, N. ; HORN-VON HOEGEN, M. ; HOFMANN, K. R.: Ge p-MOSFETs compatible with Si CMOS-technology. In: *Proceeding of the 29th European Solid-State Device Research Conference* Bd. 1, 1999, S. 300–303 31, 57
- [144] BUCA, D. ; WINNERL, S. ; LENK, S. ; MANTL, S. ; BUCHAL, Ch.: Metal-germanium-metal ultrafast infrared detectors. In: *Journal of Applied Physics* 92 (2002), December, Nr. 12, S. 7599–7605 31
- [145] AYERS, J. E.: The measurement of threading dislocation densities in semiconductor crystals by X-ray diffraction. In: *Journal of Crystal Growth* 135 (1994), S. 71–77 35, 36, 78, 82, 133
- [146] TAKAMA, Toshihiko ; SATO, Shin'ichi: Determination of the atomic scattering factors of germanium by means of the Pendellösung-beat measurement using white radiations. In: *Japanese Journal of Applied Physics* 20 (1981), Nr. 7, S. 1183–1189 36
- [147] DEUTSCH, Moshe ; HART, Michael ; CUMMINGS, Stewart: High-accuracy structure-factor measurements in germanium. In: *Phys. Rev. B* 42 (1990), Nr. 2, S. 1248–1253 36
- [148] BRUKER AXS GmbH: *D8 Advance X-ray Diffractometer, User's Manual Vol.III*. July 31 2001 36
- [149] ROOS, Bernd: *Der Einfluß thermischer Spannungen auf die Defektstruktur in heteroepitaktischen Halbleiterfilmen*, Universität Stuttgart, Diss., 1994. – Ge/Si LPE, thermische Spannung, Versetzungen 39, 73
- [150] WILLIAMS, David B. ; CARTER, C. B.: *Transmission Electron Microscopy*. Bd. 1-4. 2nd. 233 Spring Street, New York : Springer Science+Business Media, 2006 39, 41
- [151] HORNBOGEN, E.: *Durchstrahlungs-Mikroskopie fester Stoffe*. Weinheim: Verlag Chemie, 1971 39
- [152] RÜHLE, M. ; WILKENS, M.: Transmission Electron Microscopy. In: CAHN, R.W. (Hrsg.) ; HAASEN, P. (Hrsg.): *Physical Metallurgy* Bd. Part I. 3rd edition. Amsterdam-New York : North-Holland Publishing, 1983, S. 713–792 39
- [153] REIMER, L.: *Transmission Electron Microscopy: Physics of Image Formation and Microanalysis*. 2nd edition. Berlin: Springer, 1989 40

- [154] COCKAYNE, D. J. H. ; RAY, I. L. F. ; WHELAN, M. J.: Investigations of dislocation strain fields using weak beams. In: *Philosophical Magazine* 20 (1969), Nr. 168, S. 1265–1270 40
- [155] COCKAYNE, D. J. H.: The weak-beam method of electron microscopy. In: AMELINCKX, S. (Hrsg.) ; GEVERS, R. (Hrsg.) ; LANDSUYT, J. V. (Hrsg.): *Diffraction and Imaging Techniques in Material Science* Bd. Volume I: Electron Microscopy. 2nd edition. Amsterdam-New York-Oxford : North-Holland Publishing Company, 1978, S. 153–183 40
- [156] HENZLER, Martin ; GÖPEL, Wolfgang: *Oberflächenphysik des Festkörpers*. Stuttgart : B.G. Teubner, 1991 43, 44, 76, 92
- [157] MAHAN, John E. ; GEIB, Kent M. ; ROBINSON, G. Y. ; LONG, Robert G.: A review of the geometrical fundamentals of reflection high-energy electron diffraction with application to silicon surfaces. In: *Journal of Vacuum Science and Technology A* 8 (1990), Nr. 5, S. 3692–3700 43
- [158] HORN-VON HOEGEN, Michael: Growth of semiconductor layers studied by spot profile analysing low energy electron diffraction. In: *Zeitschrift für Kristallographie* 214 (1999), S. 591–629 and 684–721 43, 92
- [159] BINNIG, G. ; QUATE, C. F. ; GERBER, Ch.: Atomic Force Microscope. In: *Physical Review Letters* 56 (1986), March, Nr. 9, S. 930–933 45
- [160] PARK SCIENTIFIC INSTRUMENTS: *User's Guide to Autoprobe M5*. 1171 Borregas Avenue, Sunnyvale, CA, USA: Park Scientific Instruments, January, 2 1996 46, 48
- [161] NT-MDT CO. *Scanning Force Microscopy*. Internet, <http://www.ntmdt.com/spm-principles/view/afm>. May, 23 2009 45
- [162] GOGOL, C. A.: Rate controlling and composition analysis of Si/Al-Si processes by electron impact emission spectroscopy (EIES). In: *Journal of Vacuum Science and Technology* 16 (1979), Nr. 3, S. 884 49
- [163] ADAMSKI, Christian: *Epitaktisches CoSi_2 als Leitbahn- und Kontaktmaterial für großintegrierte Schaltungen*, Universität Hannover, Diss., 1990 49
- [164] SCHÄFFER, Carsten: *MBE-Wachstum, Struktur und elektrische Transporteigenschaften epitaktischer $\text{Si}/\text{CoSi}_2/\text{Si}(100)$ -Heterostrukturen*, Universität Hannover, Diss., 1996 49, 51
- [165] OEHME, Michael: *Methode zur Bestimmung der Adatomkonzentration von Dotierstoffen*, Universität Stuttgart, Diss., 2003 51

- [166] LIPPERT, G. ; OSTEN, H.J.: In situ cleaning of Si surfaces by UV/ozone. In: *Journal of Crystal Growth* 127 (1993), Nr. 1-4, S. 476–478 53
- [167] LIPPERT, Gunther: *Verunreinigung in der Molekularstrahlepitaxie*, Universität der Bundeswehr München, Diss., 1995 53
- [168] DIVERSE ; KASPER, Erich (Hrsg.) ; BEAN, John C. (Hrsg.): *Silicon-molecular beam epitaxy*. Bd. 1. Boca Raton, florida, USA : CRC Press, 1988 53
- [169] TABE, Michiharu: UV ozone cleaning of silicon substrates in silicon molecular beam epitaxy. In: *Applied Physics Letters* 45 (1984), Nr. 10, S. 1073–1075 53
- [170] REINKING, Dirk: *Herstellung von p-Kanal-Ge-MOSFETs auf Si-Substraten mittels Surfactant-modifizierter Epitaxie (SME)*, Universität Hannover, Diss., 2001 54
- [171] TABE, M.: Etching of SiO₂-films by Si in ultrahigh-vacuum. In: *Japanese Journal of Applied Physics Part 1 -Regular Papers, Short Notes & Review Papers* 21 (1982), Nr. 3, S. 534–538 54
- [172] KUGIYAMA, K. ; HIROFUJI, Y. ; MATSUO, N.: Si-beam radiation cleaning in molecular-beam epitaxy. In: *Japanese Journal of Applied Physics Part 1 - Regular Papers, Short Notes & Review Papers* 24 (1985), Nr. 5, S. 564–567 54
- [173] HANSEN, J. L. ; SHIRYAEV, S. Y. ; THOMSEN, E. V.: Improvement of the morphological quality of the Si surface using an optimised in-situ oxide removal procedure prior to MBE growth. In: *Journal of Crystal Growth* 157 (1995), Nr. 1-4, S. 317–322 54
- [174] WIETLER, T. F. ; OTT, A. ; BUGIEL, E. ; HOFMANN, K. R.: Advances in surfactant-mediated growth of germanium on silicon: High-quality p-type Ge films on Si. In: *Materials Science in Semiconductor Processing* 8 (2005), Nr. 1-3, S. 73–77 57, 124
- [175] WIETLER, Tobias F. ; BUGIEL, Eberhard ; HOFMANN, Karl R.: Residual strain in Ge films grown by surfactant-mediated epitaxy on Si(111) and Si(001) substrates. In: *Materials Science in Semiconductor Processing* 9 (2006), Nr. 4-5, S. 659–663 57, 75
- [176] KAMMLER, M. ; REINKING, D. ; HOFMANN, K. R. ; HORN-VON HOEGEN, M.: Surfactant-mediated epitaxy of Ge on Si: Progress in growth and electrical characterization. In: *Thin Solid Films* 336 (1998), S. 29–33 57, 106, 117, 118, 120
- [177] HOFMANN, K. R. ; REINKING, D. ; KAMMLER, M. ; HORN-VON HOEGEN, M.: Surfactant-grown low-doped germanium layers on silicon with high electron mobilities. In: *Thin Solid Films* 321 (1998), S. 125–130 57, 106, 117
- [178] ERNST, F.: Dissociation of misfit dislocation nodes in (111)GeSi/Si interfaces. In: *Philosophical Magazine A* 68 (1993), Nr. 6, S. 1251–1272 60, 61, 62, 67, 68, 69

-
- [179] ERNST, F.: Interface dislocations forming during epitaxial growth of GeSi on (111)Si substrates at high temperatures. In: *Materials Science and Engineering A-Structural Materials Properties Microstructure and Processing* 233 (1997), Nr. 1-2, S. 126–138 60, 61
- [180] BOLLMANN, W.: *Crystal Defects and Crystalline Interfaces*. Berlin Heidelberg : Springer Verlag, 1970 60
- [181] THOMPSON, N.: Dislocation nodes in face-centered cubic lattices. In: *Proceedings of the Physical Society of London Section B* 66 (1953), Nr. 402, S. 481–492 62
- [182] NANDEDKAR, A. S. ; NARAYAN, J.: Atomic structure of dislocations in silicon, germanium and diamond. In: *Philosophical Magazine A* 61 (1990), Nr. 6, S. 873–891 62
- [183] TRINCZEK, U. ; TEICHLER, H.: Line energies of 30°- and 90°-partial dislocations in silicon and germanium. In: *Physica Status Solidi A* 137 (1993), S. 577–589 62
- [184] GOMEZ, A. ; COCKAYNE, D. J. H. ; HIRSCH, P. B. ; VITEK, V.: Dissociation of near-screw dislocations in germanium and silicon. In: *Philosophical Magazine* 31 (1975), Nr. 1, S. 105–113 62
- [185] DENTENEER, P. J. H. ; HAERINGEN, W. V.: Stacking-fault energies in semiconductors from first-principles calculations. In: *Journal of Physics C: Solid State Physics* 20 (1987), S. L883–L887 62
- [186] MEYER, G. ; VOIGTLÄNDER, B. ; AMER, N. M.: Scanning tunneling microscopy of surfactant-mediated epitaxy of Ge on Si(111): Strain relief mechanisms and growth kinetics. In: *Surface Science Letters* 274 (1992), S. L541–L545 67
- [187] FILIMONOV, S. N. ; CHEREPANOV, V. ; PAUL, N. ; ASAOKA, H. ; BRONA, J. ; VOIGTLÄNDER, B.: Dislocation networks in conventional and surfactant-mediated Ge/Si(111) epitaxy. In: *Surface Science* 599 (2005), S. 76–84 67
- [188] HORN-VON HOEGEN, M. ; HENZLER, M.: Lattice matching periodic interfacial dislocation network in surfactant-mediated growth of Ge on Si(111). In: *Physica Status Solidi A* 146 (1994), S. 337–352 67
- [189] CLAUSEN, Torben: *Untersuchung regelmäßiger Versetzungsnetzwerke von Ge auf Si(111) mit hochauflösender Röntgenbeugung unter Einsatz von Synchrotronstrahlung*. Studienarbeit, Universität Bremen. Dezember 2000. – persönliche Mitteilung von Martin Kammler an Torben Clausen 68

- [190] SCHMIDT, Th. ; KROGER, R. ; CLAUSEN, T. ; FALTA, J. ; JANZEN, A. ; KAMMLER, M. ; KURY, P. ; ZAHL, P. ; HORN-VON HOEGEN, M.: Surfactant-mediated epitaxy of Ge on Si(111): Beyond the surface. In: *Applied Physics Letters* 86 (2005), S. 111910–111913 71
- [191] R.C. CAMMARATA, K. S. ; SPAEPEN, F.: Simple model for interface stresses with application to misfit dislocation generation in epitaxial thin films. In: *Journal of Applied Physics* 87 (2000), Nr. 3, S. 1227–1234 71
- [192] ROOS, B. ; ERNST, F.: Thermal-stress-induced dislocations in GeSi/Si heterostructures. In: *Journal of Crystal Growth* 137 (1993), S. 457–471 73
- [193] WIETLER, T. F. ; BUGIEL, E. ; HOFMANN, K. R.: Surfactant-mediated epitaxy of relaxed low-doped Ge films on Si(001) with low defect densities. In: *Applied Physics Letters* 87 (2005), Nr. 18, S. 182102(1–3) 75
- [194] WIETLER, T. F. ; BUGIEL, E. ; HOFMANN, K. R.: Surfactant-mediated epitaxy of high-quality low-doped relaxed germanium films on silicon(001). In: *Thin Solid Films* 508 (2006), Nr. 1-2, S. 6–9 75
- [195] WIETLER, T. F. ; BUGIEL, E. ; HOFMANN, K. R.: Tuning strain relaxation by surface morphology: Surfactant-mediated epitaxy of germanium on silicon. In: *Applied Surface Science* 255 (2008), Nr. 3, S. 778–780 75
- [196] WIETLER, T. F. ; RUGERAMIGABO, E. P. ; BUGIEL, E. ; HOFMANN, K. R.: Influence of Sb induced surface faceting on structural properties of relaxed Ge films on Si(001). In: CALDAS, Marília (Hrsg.) ; STUDART, Nelson (Hrsg.): *Physics of Semiconductors* Bd. 1199, 2009, S. 15–16 75
- [197] LARSEN, Arne N.: Epitaxial growth of Ge and SiGe on Si substrates. In: *Materials Science in Semiconductor Processing* 9 (2006), Nr. 4-5, S. 454–459 82
- [198] ALBRECHT, M. ; STRUNK, H. P. ; HANSSON, P. O. ; BAUSER, E.: Misfit dislocation formation and interaction in Ge(Si) on Si(001). In: *Journal of Crystal Growth* 128 (1993), S. 327–330 85
- [199] LEGOUES, F. K. ; M. COPEL, R. T.: Novel strain-induced defect in thin molecular-beam-epitaxy layers. In: *Physical Review Letters* 63 (1989), Nr. 17, S. 1826–1829 85
- [200] SAKAI, Akira ; TATSUMI, Toru: Defect-mediated island formation in Stranski-Krastanov growth of Ge on Si(001). In: *Physical Review Letters* 71 (1993), Nr. 24, S. 4007–4010 85

- [201] SAKAI, Akira ; TATSUMI, Toru ; AOYAMA, Keiko: Growth of strain-relaxed Ge films on Si(001) surfaces. In: *Applied Physics Letters* 71 (1997), Nr. 24, S. 3510–3512 85
- [202] BOLKHOVITYANOV, Yu.B. ; DERYABIN, A.S. ; GUTAKOVSKII, A.K. ; SOKOLOV, L.V.: Formation of edge misfit dislocations in $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ ($x = 0.4 - 0.5$) films grown on misoriented (001)->(111) Si substrates. In: *Journal of Crystal Growth* 310 (2008), S. 3422–3427 90
- [203] KVAM, E. P. ; MAHER, D. M. ; HUMPHREYS, C.J.: Variation of dislocation morphology with strain in $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ epilayers on (100)Si. In: *Journal of Materials Research* 5 (1990), Nr. 9, S. 1900–1907 90
- [204] FITZGERALD, E. A. ; AST, D. G. ; KIRCHNER, P. D. ; PETTIT, G. D. ; WOODALL, J. M.: Structure and recombination in InGaAs/GaAs heterostructures. In: *Journal of Applied Physics* 63 (1988), Nr. 3, S. 693–703 90
- [205] VDOVIN, V. I.: Nature and origin of pure edge dislocations in low mismatched epitaxial structures. In: *Journal of Crystal Growth* 172 (1997), S. 58–63 90
- [206] STROHM, A ; VOSS, T ; FRANK, W ; LAITINEN, P ; RAISANEN, J: Self-diffusion of Ge-71 and Si-31 in Si-Ge alloys. In: *Zeitschrift für Metallkunde* 93 (2002), Nr. 7, S. 737–744 100, 102
- [207] KURPS, R. *Persönliche Mitteilung*. 2005 106, 121
- [208] HORN-VON HOEGEN, M.: Surfactants: Perfect heteroepitaxy of Ge on Si(111). In: *Applied Physics A* 59 (1994), S. 503–515 108
- [209] METZGER, R. A. ; ALLEN, F. G.: Antimony adsorption on silicon. In: *Surface Science* 137 (1984), Nr. 2-3, S. 397–411 110
- [210] LESSMANN, A. ; DRUBE, W. ; MATERLIK, G.: Backreflection XSW and ARUPS studies of Sb/Ge(001) -2×1 . In: *Surface Science* 323 (1995), S. 109–117 110
- [211] PORTAVOCE, A. ; BASSANI, F. ; RONDA, A. ; BERBEZIER, I.: Auger spectroscopy thermodesorption of Sb on $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ layers grown on Si(100) substrates. In: *Surface Science* 519 (2002), Nr. 3, S. 185–191 110
- [212] CHAN, L.H. ; ALTMAN, E.I.: Effect of surface intermixing on the morphology of Sb-terminated Ge(100) surfaces. In: *Physical Review B* 63 (2001), Nr. 19, S. 195309(1–13) 111
- [213] SCHRODER, Dieter K.: *Semiconductor Material and Device Characterization*. 2nd. John Wiley and Sons, Inc., 1998 113

- [214] SZE, S. M. ; NG, Kwok K.: *Physics of Semiconductor Devices*. 3rd. Hoboken, New Jersey : John Wiley & Sons, Inc., 2007 113
- [215] CONWELL, E. M.: Properties of silicon and germanium: II. In: *Proceedings of the IRE* 46 (1958), Nr. 6, S. 1281–1300 114
- [216] HALL, E. H.: On a new action of the magnet on electric currents. In: *American Journal of Mathematics* 2 (1879), Nr. 3, S. 287–292 114
- [217] MORIN, F. J.: Lattice-scattering mobility in germanium. In: *Physical Review* 93 (1954), Nr. 1, S. 62–63 115
- [218] NEDOLUHA, A. ; KOCH, K. M.: Zum Mechanismus der Widerstandsänderung im Magnetfeld. In: *Zeitschrift für Physik* 132 (1952), S. 608–620 116, 117
- [219] PETRITZ, Richard L.: Theory of an experiment for measuring the mobility and density of carriers in the space-charge region of a semiconductor surface. In: *Physical Review* 110 (1958), Nr. 6, S. 1254–1262 116, 117
- [220] LARRABEE, R.D. ; THURBER, W.R.: Theory and application of a two-layer Hall technique. In: *IEEE Transactions on Electron Devices* 27 (1980), Jan, Nr. 1, S. 32–36 116, 117
- [221] VAN DER PAUW, L. J.: A method of measuring the resistivity and hall coefficient on Lamellae of arbitrary shape. In: *Philips Technical Review* 20 (1958), Nr. 8, S. 220–224 116
- [222] VAN DER PAUW, L. J.: A method of measuring the resistivity and hall coefficient of discs of arbitrary shape. In: *Philips Research Reports* 13 (1958), Nr. 1, S. 1–9 116
- [223] ADACHI, S. ; BLACHNIK, R. ; DEVATY, R. P. ; FUCHS, F. ; HANGLEITER, A. ; KULISCH, W. ; KUMASHIRO, Y. ; MEYER, B. K. ; SAUER, R.: Landolt-Börnstein - Group III Condensed Matter. In: O. MADELUNG, U. R. (Hrsg.) ; SCHULZ, M. (Hrsg.): *Group IV Elements, IV-IV and III-V Compounds. Part b - Electronic, Transport, Optical and Other Properties* Bd. 41A1b. Springer-Verlag, 2002, S. 1–17 117, 121
- [224] ZEMEL, A. ; SHER, Ariel ; EGER, D.: Anomalous Hall effect in p-type $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ liquid-phase-epitaxial layers. In: *Journal of Applied Physics* 62 (1987), Nr. 5, S. 1861–1868 117
- [225] GOLIKOVA, O. A. ; MOIZHES, B. Y. ; STIL'BANS, L. S.: Hole mobility of germanium as a function of concentration and temperature. In: *Soviet Physics-Solid State* 3 (1962), Nr. 10, S. 2259–2265 118, 120, 121, 122, 124, 125

-
- [226] SHOCKLEY, W.: Dislocations and edge states in the diamond crystal structure. In: *Physical Review* 91 (1953), Nr. 1, S. 228–123
- [227] READ, W. T.: Theory of dislocations in germanium. In: *Philosophical Magazine* 45 (1954), Nr. 367, S. 775–796 123
- [228] PALMER, D. R. ; MORRISON, S. R. ; DAUENBAUGH, C. E.: Density and energy of surface states on cleaved surfaces of germanium. In: *Physical Review* 129 (1963), Nr. 2, S. 608–613 123
- [229] OLDHAM, W. G. ; MILNES, A. G.: Interface states in abrupt semiconductor heterojunctions. In: *Solid State Electronics* 7 (1964), S. 153–167 123
- [230] MILNES, A. G. ; FEUCHT, D. L.: *Heterojunctions and Metal-Semiconductor Junctions*. 111 Fifth Avenue, New York, USA : Academic Press Inc., 1972 123
- [231] HOLT, D. B.: Misfit dislocations in semiconductors. In: *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 27 (1966), Nr. 6-7, S. 1053–1067 123
- [232] BROUDY, R. M.: The electrical properties of dislocations in semiconductors. In: *Advances in Physics* 12 (1963), Nr. 46, S. 135–184 123
- [233] SCHRÖTER, W.: Die elektrischen Eigenschaften von Versetzungen in Germanium. In: *Physica Status Solidi* 21 (1967), S. 211–224 123
- [234] RUGERAMIGABO, E. P. *Persönliche Mitteilung*. 2009 123
- [235] TUREWICZ, P.: *Wachstum und Charakterisierung von p-dotiertem SME-Germanium auf Silizium(100)*, Leibniz Universität Hannover, Diplomarbeit, 2009 124
- [236] CAUGHEY, D.M. ; THOMAS, R.E.: Carrier mobilities in silicon empirically related to doping and field. In: *Proceedings of the IEEE* 55 (1967), Dec., Nr. 12, S. 2192–2193 124, 125
- [237] WIETLER, T. F. ; BUGIEL, E. ; HOFMANN, K. R.: Surfactant-mediated epitaxy of germanium on structured silicon substrates: Towards embedded Germanium. In: JANTSCH, W. AND SCHÄFFLER, F. (Hrsg.): *Physics of Semiconductors, Pts A and B* Bd. 893, 2007, S. 67–68 130
- [238] WIETLER, Tobias F. ; BUGIEL, Eberhard ; HOFMANN, Karl R.: Relaxed germanium films on silicon(110). In: *Thin Solid Films* 517 (2008), Nr. 1, S. 272–274 130
- [239] SCHERRER, P.: Bestimmung der Grösse und der inneren Struktur von Kolloidteilchen mittels Röntgenstrahlen. In: *Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-Physikalische Klasse* (1918), S. 98–100 133

Literaturverzeichnis

Bei allen Literaturnachweisen sind jeweils am Ende der Quellenangabe die Seitenzahlen genannt, auf denen sie in dieser Arbeit zitiert werden.

Publikationsverzeichnis

Teile dieser Arbeit wurden bereits in Fachzeitschriften publiziert oder auf internationalen Tagungen vorgestellt.

1. T. F. Wietler, E. P. Rugeramigabo, E. Bugiel, and K. R. Hofmann: Influence of Sb induced surface faceting on misfit dislocation formation in Ge heteroepitaxy on Si(001). *Physics of Semiconductors, AIP Conference Proceedings*, 1199:15-16, 2009.
2. T. F. Wietler, E. Bugiel, and K. R. Hofmann: Tuning strain relaxation by surface morphology: Surfactant-mediated epitaxy of germanium on silicon. *Applied Surface Science*, 255(3):778–780, 2008.
3. T. F. Wietler, E. P. Rugeramigabo, E. Bugiel, and K. R. Hofmann: Influence of Sb induced surface faceting on misfit dislocation formation in Ge heteroepitaxy on Si(001). *29th International Conference on the Physics of Semiconductors*, Rio de Janeiro, Brazil, July 27 - August 1, 2008.
4. T. F. Wietler, E. Bugiel, and K. R. Hofmann: Tuning strain relaxation by surface morphology: Surfactant-mediated epitaxy of germanium on silicon (100) and (111). *11th International Conference on the Formation of Semiconductor Interfaces*, Manaus, Brasil, August 19-24, 2007.
5. T. F. Wietler, E. Bugiel, and K. R. Hofmann: Residual strain in Ge films grown by surfactant-mediated epitaxy on Si(111) and Si(001) substrates. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 9(4-5):659–663, 2006.
6. T. F. Wietler, E. Bugiel, and K. R. Hofmann: Surfactant-mediated epitaxy of high-quality low-doped relaxed germanium films on silicon (001). *Thin Solid Films*, 508(1-2):6–9, 2006.
7. T. F. Wietler, E. Bugiel, and K. R. Hofmann: Residual strain in Ge films grown by surfactant-mediated epitaxy on Si(111) and Si(001) substrates. *E-MRS 2006 Spring Meeting*, Nizza, France, May 29 - June 02, 2006.
8. T. F. Wietler, E. Bugiel, and K. R. Hofmann: Surfactant-mediated epitaxy of relaxed low-doped Ge films on Si(001) with low defect densities. *Applied Physics Letters*, 87(18):182102(1–3), 2005.

9. T. F. Wietler, A. Ott, E. Bugiel, and K. R. Hofmann: Advances in surfactant-mediated growth of germanium on silicon: High-quality p-type Ge films on Si. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 8(1-3):73–77, 2005.
10. T. F. Wietler, E. Bugiel, and K. R. Hofmann: Surfactant mediated epitaxy of high-quality low-doped relaxed germanium films on silicon (001). *4th International Conference on Silicon Epitaxy and Heterostructures*, Awaji Island, Hyogo, Japan, May 23-26, 2005.
11. K. R. Hofmann, T. F. Wietler, E. Bugiel, and R. Kurps: High quality germanium films grown directly on Si(001) by surfactant mediated epitaxy. *45th Electronic Materials Conference*, University of California, Santa Barbara, CA, USA, Juni 22-24, 2005.
12. T. F. Wietler, E. Bugiel, and K. R. Hofmann: Surfactant mediated epitaxy of relaxed germanium films on silicon (001). *Deutscher MBE-Workshop*, Universität Hohenheim, Germany, October 11-12, 2005.
13. T. F. Wietler, A. Ott, E. Bugiel, and K. R. Hofmann: Advances in growth and device processing of germanium films on Si(111). *Second International SiGe Technology and Device Meeting*, Frankfurt/Oder, Germany, May 16-19, 2004.

Über diese Arbeit hinausgehende Aufsätze in Fachzeitschriften:

1. T. F. Wietler, A. Laha, E. Bugiel, M. Czernohorsky, R. Dargis, A. Fissel, and H. J. Osten: Epitaxial growth of Gd_2O_3 on surfactant-mediated grown Ge films on Si(001) substrates. *Solid-State Electronics*, 53(8):633-636, 2009.
2. R. Dargis, A. Fissel, E. Bugiel, D. Schwendt, T. Wietler, A. Laha, and H. J. Osten: Development of multi-step procedure for epitaxial growth of crystalline silicon on rare-earth-metal oxide for SOI-applications. *e-Journal of Surface Science and Nanotechnology*, 7:405–408, 2009.
3. R. Dargis, A. Fissel, E. Bugiel, D. Schwendt, T. Wietler, A. Laha, and H. J. Osten: Epitaxial growth and properties of silicon on crystalline rare-earth-metal oxide for SOI-applications. *Materials Science Medziagotyra*, 15(1):11–15, 2009.
4. T. F. Wietler, E. Bugiel, and K. R. Hofmann: Relaxed germanium films on silicon (110). *Thin Solid Films*, 517(1):272–274, 2008.
5. T. F. Wietler, E. Bugiel, and K. R. Hofmann: Surfactant-mediated epitaxy of germanium on structured silicon substrates: Towards embedded germanium. *Physics of Semiconductors, Pts A and B, AIP Conference Proceedings*, 893:67–68, 2007.

-
6. U. Shymanovich, M. Nicoul, J. Blums, K. Sokolowski-Tinten, A. Tarasevitch, T. Wietler, M. Horn Von Hoegen, and D. Von der Linde: Diffraction of strongly convergent X-rays from picosecond acoustic transients. *Applied Physics A - Materials Science & Processing*, 87(1):7–11, 2007.
 7. K. Sokolowski-Tinten, U. Shymanovich, M. Nicoul, J. Blums, A. Tarasevitch, M. Horn-von Hoegen, D. von der Linde, A. Morak, and T. Wietler: Energy relaxation and anomalies in the thermo-acoustic response of femtosecond laser excited germanium. In: P. Corkum, D. Jonas, R. J. D. Miller, and A. M. Weiner (Editors), *Ultrafast Phenomena XV*, Springer Series in Chemical Physics, 88:597–599, 2007.
 8. C. R. Wang, M. Bierkandt, S. Paprotta, T. Wietler, and K. R. Hofmann: CaF₂/Si/CaF₂ resonant tunneling diodes grown by B surfactant-mediated epitaxy. *Applied Physics Letters*, 86(3):033111(1–3), 2005.
 9. C. R. Wang, M. Bierkandt, B. H. Müller, S. Paprotta, E. Bugiel, T. Wietler, and K. R. Hofmann: Fabrication of resonant-tunneling diodes by B surfactant-enhanced growth of Si quantum well layers on CaF₂/Si. *Proceedings of the 4th IEEE Conference on Nanotechnology*, 376–378, 2004.
 10. C. R. Wang, B. H. Muller, E. Bugiel, T. Wietler, M. Bierkandt, and K. R. Hofmann: Boron surfactant enhanced growth of thin Si films on CaF₂/Si. *Journal of Vacuum Science & Technology A*, 22(6):2246–2250, 2004.
 11. A. Kampmann, A. Abken, G. Leimkühler, J. Rechid, V. Sittinger, T. Wietler, and R. Reineke-Koch: A cadmium-free CuInSe₂ superstrate solar cell fabricated by electrodeposition using a ITO/In₂Se₃/CuInSe₂/Au structure. *Progress in Photovoltaics*, 7(2):129–135, 1999.

Über diese Arbeit hinausgehende Konferenzbeiträge:

1. T. F. Wietler, A. Laha, E. Bugiel, M. Czernohorsky, R. Dargis, A. Fissel, and H. J. Osten: Epitaxial growth of Gd₂O₃ on Ge films grown by surfactant-mediated epitaxy on Si(001) substrates. *4th International SiGe Technology and Device Meeting*, Hsinchu, Taiwan, May 11-14, 2008.
2. R. Dargis, A. Fissel, E. Bugiel, T. Wietler, D. Schwendt, A. Laha, and H. J. Osten: Development of multi-step procedure for epitaxial growth of crystalline silicon on rare-earth-metal oxide for SOI-applications. *14th International Conference on Solid Films and Surfaces*, Dublin, June 29 - July 4, 2008.
3. T. F. Wietler, E. Bugiel, and K. R. Hofmann: Relaxed germanium films on Si(110). *5th International Conference on Silicon Epitaxy and Heterostructures*, Marseille, France, May 20-25, 2007.

4. T. F. Wietler, E. Bugiel, and K. R. Hofmann: Surfactant-mediated epitaxy of germanium on structured silicon substrates: Towards embedded germanium. *28th International Conference on the Physics of Semiconductors*, Wien, Austria, July 24-28, 2006.
5. O. Kerker, T. F. Wietler, and K. R. Hofmann: Characterization of HfO₂ deposited by reactive sputtering as gate dielectric for epitaxial Ge-MOSFETs on Si wafers. *E-MRS 2006 Spring Meeting*, Nice, France, May 29 - June 02, 2006.
6. T. F. Wietler and K. R. Hofmann: XRD analysis of Ge- and Ge_xSi_{1-x}-layers grown by surfactant mediated epitaxy. *Frühjahrstagung der DPG*, Regensburg, Germany, March 08-12, 2004.
7. C. R. Wang, M. Bierkandt, B. H. Müller, S. Paprotta, E. Bugiel, T. F. Wietler, and K. R. Hofmann: Fabrication of resonant-tunneling diodes by B surfactant enhanced growth of Si quantum well layers on CaF₂/Si. *4th IEEE Conference on Nanotechnology*, Munich, Germany, August 17-19, 2004.
8. C. R. Wang, M. Bierkandt, B. H. Müller, S. Paprotta, E. Bugiel, T. F. Wietler, and K. R. Hofmann: Fabrication of resonant-tunneling diodes by B surfactant modified growth of Si films on CaF₂/Si. *Frühjahrstagung der DPG*, Regensburg, Germany, March 08-12, 2004.
9. C. R. Wang, B. H. Müller, M. Bierkandt, E. Bugiel, T. Wietler, and K. R. Hofmann: Boron surfactant-enhanced growth of Si films on CaF₂/Si. *E-MRS Spring Meeting*, Strasbourg, France, May 24-28, 2004.
10. C. R. Wang, B. H. Müller, M. Bierkandt, E. Bugiel, T. Wietler, and K. R. Hofmann: Growth of CaF₂/Si/CaF₂ resonant-tunneling structures by B and Sb surfactant enhanced epitaxy. *E-MRS Spring Meeting*, Strasbourg, France, May 24-28, 2004.
11. C. R. Wang, B. H. Müller, M. Bierkandt, E. Bugiel, T. Wietler, and K. R. Hofmann: Growth of CaF₂/Si/CaF₂ resonant-tunneling structures by B and Sb surfactant enhanced epitaxy. *44th Electronic Materials Conference*, University of Notre Dame, Notre Dame, Indiana, USA, June 23-25, 2004.
12. T. F. Wietler, N. Hoffmann, E. Bugiel, and K. R. Hofmann: Growth and characterisation of Ge- and Ge_xSi_{1-x}-multilayers on virtual GeSi-substrates. *Frühjahrstagung der DPG*, Dresden, Germany, March 24-28, 2003.
13. C. R. Wang, B. H. Müller, T. Wietler, E. Bugiel, and K. R. Hofmann: Surfactant enhanced growth of thin Si films on CaF₂/Si(111). *E-MRS Spring Meeting*, Strasbourg, France, June 10-13, 2003.

-
14. T. F. Wietler, N. Hoffmann, and K. R. Hofmann: Untersuchung dünner $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ Pseudosubstrate auf Silizium. *Frühjahrstagung der DPG*, Regensburg, Germany, March 11-15, 2002.
 15. I. Dumkow, T. F. Wietler, K. R. Hofmann, and M. Horn von Hoegen: Germanium auf relaxierten $\text{Ge}_{0,8}\text{Si}_{0,2}$ Pseudosubstraten: Präparation und Morphologie. *Frühjahrstagung der DPG*, Regensburg, Germany, March 11-15, 2002.
 16. S. Paprotta, F. Beug, T. F. Wietler, R. Ferretti, and K. R. Hofmann: Characterization of gate-stacks with silicon and germanium nano-crystals for memory application. *International Workshop NEOP 7*, Dresden, Germany, October 7-9, 2002.
 17. T. F. Wietler, N. Hoffmann, and K. R. Hofmann: Herstellung von $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ -Schichten auf Si-Substraten mittels Surfactant modifizierter Epitaxie. *Frühjahrstagung der DPG*, Hamburg, Germany, February 2001.
 18. N. Hoffmann, T. F. Wietler, M. Kammler, D. Reinking, K. R. Hofmann, and M. Horn von Hoegen: Surfactant modifizierte Epitaxie: Herstellung und elektrische Charakterisierung eines Ge-p-Kanal-MOSFETs auf Si-Substrat. *Frühjahrstagung der DPG*, Regensburg, Germany, March 27-31, 2000.

Lebenslauf

Name Tobias F. Wietler
geboren am 28.04.1972
in Langenhagen

07/1991 Abitur am Gymnasium Isernhagen
1991 - 1992 Zivildienst
1992 - 1995 Physikstudium an der Universität Hannover
1995 - 1996 ERASMUS-Student an der Universität Granada, Spanien
1996 - 1999 Physikstudium an der Universität Hannover
06/1999 Abschluss als Diplom-Physiker
Diplomarbeit: "Impedanz der CuInSe_2 -Solarzelle mit Berücksichtigung des lateralen Spannungsabfalls in der transparenten, leitfähigen Fensterschicht"
seit 08/1999 wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Materialien und Bauelemente der Elektronik an der Leibniz Universität Hannover

Danksagung

In so eine Arbeit startet man mit einer Frage. Ihre Antwort enthält dann mindestens zwei neue Fragen. Und so weiter. Am Ende stehen einige Antworten, aber auch viele noch offene Fragen. Damit muss man sich abfinden. Antworten findet man selten allein, sondern oft im Zusammenwirken mit anderen. Für ihr Mitwirken an dieser Arbeit möchte ich einigen Menschen besonders danken.

Herrn Prof. Karl Hofmann danke ich für die Betreuung dieser Arbeit, viele fruchtbare Diskussionen und Vorschläge, anregende Fragen und seine fortwährende Unterstützung. Herrn Prof. Herbert Pfnür danke ich für die Übernahme des Koreferates und Herrn Prof. Wolfgang Mathis für den Vorsitz der Prüfungskommission.

Ich danke Herrn Prof. Hans Jörg Osten für zahlreiche konstruktive Diskussionen und seine ständige Förderung. Viele Anregungen verdanke ich Herrn Prof. Andreas Fissel und Herrn Prof. Michael Horn-von Hoegen.

Ein besonderer Dank gilt Herrn Dr. Eberhard Bugiel, der mit Hilfe der Transmissionselektronenmikroskopie, seiner großen Erfahrung, guter Ideen und mit seinem steten Interesse die Mysterien der Surfactant-modifizierte Epitaxie für mich erleuchtet hat.

Meinen Kollegen Dr. Bernd Müller, Dr. Martin Kammler, Dr. Cunrang Wang und Dr. Eddy Patrick Rugeramigabo danke ich für die vielen gemeinsamen Stunden an der VG-MBE. Niels Hoffmann, Andre Ott und Oliver Kerker halfen mir als Technologen in den jeweiligen Ge/Si-Forschungsprojekten die Herausforderung zu verstehen, die es bedeutet neue Materialien in einen Si-CMOS Prozess zu integrieren. Allen Mit-Doktoranden und Post-Docs am Institut für Materialien und Bauelemente der Elektronik möchte ich für die herausragende und vor allem immer kooperative Arbeitsatmosphäre danken.

Ohne die technischen Mitarbeiter des Institutes Ernst Exter, Guido Glowatzki, Tanja Helmbrecht, Bernd Koch, Andrea Lissel, Hartmut Schwarz und Detlef Zech wäre diese Arbeit nicht möglich gewesen - Danke!

Herrn Dr. Rainer Kurps danke ich für die Durchführung der SIMS-Untersuchungen. Bei Herrn Dr. Peter Zaumseil möchte ich mich für seine Ratschläge und stete Diskussionsbereitschaft in allen Fragen der Röntgenbeugung bedanken. Wertvolle Tipps zur Reinigung von Siliziumsubstraten verdanke ich Herrn Dr. Gunther Lippert.

Speziell bedanken möchte ich mich bei Frau Heidrun Ojemann für ihre Sorgfalt und Ausdauer beim Bekämpfen des Fehlerteufels.

Schließlich danke ich meiner Familie, insbesondere meinen Eltern, für ihre außerfachliche Unterstützung.

Und vor allem danke ich meiner Frau Mareike Wietler für ihre unendliche Geduld.