

Kohlenstoff-unterstützte Germaniumepitaxie auf Silizium

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.-Ing. Dominic Tetzlaff

geboren am 18.05.1982 in Hannover

2013

Referent: Prof. Dr. H. J. Osten
Koreferent: Prof. Dr. E. Kasper
Tag der Promotion: 28.08.2013

Kurzfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein neuer Prozess zum Wachstum von relaxierten Germaniumfilmen auf Silizium (001)-Substraten entwickelt, der Tieftemperaturepitaxie mit der Beschichtung mit einer Submonolage Kohlenstoff und einer anschließenden Temperung bis 650 °C kombiniert. Der zunächst sehr komplexe Mehrstufenprozess wurde im Rahmen dieser Arbeit optimiert und dabei der Einfluss verschiedener Prozessparameter analysiert.

Dieser Prozess ist für Wachstumstemperaturen $T_G < 250$ °C geeignet. Interessanterweise erzeugt dieser Prozess glatte relaxierte Germaniumfilme sowohl nach Abscheidung amorpher Materials ($T_G = 40$ °C), nach dem Wachstum eines rauen, teil-amorphen ($T_G = 50$ °C) als auch nach dem Wachstum eines glatten Germaniumfilms ($T_G = 150$ °C).

Eine Erhöhung der Schichtdicke führt zu einer Erhöhung des maximal erreichten Relaxationsgrads. Dabei ist der grundsätzliche Verlauf der Relaxation nicht schichtdickenabhängig sondern charakteristisch für eine bestimmte Wachstumstemperatur. Die für vollständige Relaxation nötige Schichtdicke nimmt mit höherer Wachstumstemperatur zu.

Es konnte gezeigt werden, dass die Submonolage Kohlenstoff nicht nur die Inselbildung beim Tempern verhindert, sondern auch die Defektausbreitung sowohl von Versetzungen als auch von Stapelfehlern beeinflusst. Des Weiteren scheint sie die Interdiffusion bei anschließenden Temperungen oberhalb von 850 °C abzuschwächen.

Im Vergleich zu Surfactant-modifizierter Epitaxie (SME) mit Antimon weisen die Proben in Röntgenuntersuchungen geringere Halbwertsbreiten und somit Defektdichten auf. Es konnten geschlossene Germaniumfilme mit Schichtdicken von unter 15 nm mit Relaxationsgraden von fast 90% mittels Kohlenstoff-unterstützter Epitaxie hergestellt werden, während SME-Filme mit nominell gleicher Dicke nicht glatt sind.

Die Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie bietet somit die Möglichkeit durch gezielte Wahl der Wachstumsparameter glatte relaxierte Germaniumfilme mit beliebigen Schichtdicken direkt auf Si(001) Substraten zu wachsen.

Abstract

In this work, a new approach called carbon-mediated epitaxy for germanium growth on Si(001) substrates is presented. A multi-step process of low-temperature epitaxy followed by the deposition of a submonolayer of carbon and subsequent annealing up to 650 °C was developed. By investigating the influence of several growth parameters the multi-step process was heavily optimized.

Growth temperatures $T_G < 250$ °C can be used with this new approach. After growth, the Ge films are fully amorphous ($T_G = 40$ °C), rough and partially amorphous ($T_G = 50$ °C) or smooth and crystalline ($T_G = 150$ °C). Despite their different initial conditions, all films are smooth and relaxed after annealing.

The degree of relaxation increases with layer thickness. The relaxation progress is characteristic for each growth temperature. The layer thickness needed for achieving full relaxation increases with growth temperature.

Carbon is not only preventing the formation of islands but influencing defect propagation of dislocations and stacking faults. In addition, the interdiffusion of Si into Ge seems to be reduced by the submonolayers of carbon during heat treatment at 850 °C.

The full width at half maximum determined by x-ray diffraction of samples grown by carbon-mediated epitaxy and thus the defect density is lower compared to samples grown by surfactant-mediated epitaxy (SME) with antimony. With this new approach, samples with thicknesses below 15 nm were grown with degrees of relaxation of about 90%, whereas SME-films of the same nominal thickness are very rough.

Carbon-mediated epitaxy can be used to achieve smooth relaxed Ge-films with arbitrary thicknesses directly on Si(001) substrates.

Schlagwörter: Germanium, Kohlenstoff, Tieftemperaturepitaxie

Keywords: germanium, carbon, low-temperature epitaxy

Inhaltsverzeichnis

Symbol- und Abkürzungsverzeichnis	vii
1 Einleitung	1
2 Germaniumepitaxie auf Silizium	6
2.1 Heteroepitaxie	6
2.2 Relaxation	8
2.3 Defekte	10
2.4 Thermische Ausdehnung	13
2.5 Diffusion	14
3 Messmethoden	16
3.1 Elektronenbeugung	16
3.2 Röntgenbeugung	19
3.3 Rasterkraftmikroskopie	27
3.4 Transmissionselektronenmikroskopie	29
3.5 Sekundärionenmassenspektroskopie	31
4 Probenpräparation	34
4.1 MBE-Anlagen	34
4.2 Substrate	37
4.3 Reinigung	38
4.4 Kalibrierungen	40
5 Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie	50
6 Optimierung des Wachstumsprozesses	62
6.1 Einfluss der Wachstumstemperatur	62
6.2 Einfluss der Temperung	65

Inhaltsverzeichnis

6.3 Einfluss der Schichtdicke	91
6.4 Einfluss des Kohlenstoffs	95
6.5 Optimierter Prozessablauf	102
7 Dotierung und Temperaturstabilität	106
8 Zusammenfassung und Ausblick	113
A Anhang	117
Abbildungsverzeichnis	120
Tabellenverzeichnis	123
Literaturverzeichnis	124
Publikationsverzeichnis	148
Danksagung	152
Lebenslauf	153

Symbol- und Abkürzungsverzeichnis

Symbole (römisch)

A	Vorfaktor zur Berechnung der Aktivierungsenergie
A_V	geometrischer Vorfaktor (Versetzungstyp)
a	Gitterkonstante
a^*	reziproke Gittereinheit
a_{\parallel}	Gitterkonstante parallel zur Grenzfläche
a_{\perp}	Gitterkonstante senkrecht zur Grenzfläche
a_{bulk}	Gitterkonstante des Volumenmaterials
a_{Film}	Gitterkonstante der Schicht
$a_{Film,\parallel}$	gemessene in-plane Gitterkonstante der Schicht
a_{Ge}	Gitterkonstante von Germanium (0,5658 nm)
$a_{rel}(y)$	konzentrationsabhängige Gitterkonstante (relaxiert)
a_{Si}	Gitterkonstante von Silizium (0,5431 nm)
a_{Sub}	Gitterkonstante des Substrats
$a_{Sub,\parallel}$	gemessene in-plane Gitterkonstante des Substrats
B	Vorfaktor zur Berechnung der Restverzerrung
\vec{b}	Burgersvektor einer Versetzung
\vec{b}_{stufe}	Stufenkomponente des Burgersvektors
b	Betrag des Burgersvektors

Symbol- und Abkürzungsverzeichnis

C_{ij}	elastische Konstante
D	Diffusionskonstante
D_0	Sprungfrequenz (Diffusion)
d	Abstand der RHEED-Reflexe
d_{Film}	Schichtdicke
d_{hkl}	Netzebenenabstand
d_{Si}	RHEED-Abstände bei Si (Referenz)
E_A	Aktivierungsenergie
f	Gitterfehlpassung
G_{\parallel}	in-plane Komponente des reziproken Gittervektors
G_{\perp}	out-of-plane Komponente des reziproken Gittervektors
\vec{g}	reziproker Gittervektor (TEM)
h_c^{elast}	kritische Schichtdicke für elastische Relaxation
h_c^{plast}	kritische Schichtdicke für plastische Relaxation
h, k, l	Millersche Indizes
\vec{k}	Wellenvektor (gestreut)
k_0	Radius der Ewaldkugel
\vec{k}_0	Wellenvektor (einfallend)
k_B	Boltzmann-Konstante
L	Diffusionslänge
\vec{l}	Richtungsvektor einer Versetzung
m	Masse
$N(z)$	Konzentrationsprofil

Symbol- und Abkürzungsverzeichnis

N_{max}	maximale Konzentration
n_d	Versetzungsdichte (aus XRD)
n_{td}	Dichte der Durchstoßversetzungen (aus TEM)
p	Druck
q	Ladung
R	Relaxationsgrad
R^*	Relaxationsgrad (aus XRD) korrigiert um th. Zugspannung
$R_{T_G}^*$	Relaxationsgrad (aus XRD) nach dem Wachstum bei T_G korrigiert um th. Zugspannung
R_{T_G, T_A}^*	Relaxationsgrad (aus XRD) nach Temperung bis T_A korrigiert um th. Zugspannung
R^R	Relaxationsgrad (aus RHEED)
$R_{T_G}^R$	Relaxationsgrad (aus RHEED) nach dem Wachstum bei T_G
R_{T_G, T_A}^R	Relaxationsgrad (aus RHEED) nach Temperung bis T_A
R^X	Relaxationsgrad (aus XRD)
$R_{T_G}^X$	Relaxationsgrad (aus XRD) nach dem Wachstum bei T_G
R_{T_G, T_A}^X	Relaxationsgrad (aus XRD) nach Temperung bis T_A
\vec{r}	reziproker Gittervektor
r_{RMS}	mittlere quadratische Rauheit
s_g	Anregungsfehler
T	Temperatur
T_G	Wachstumstemperatur
t	Zeit
x, y	Konzentration bei Verbindungen
z	Messtiefe (SIMS-Profil)

Symbole (griechisch)

$\alpha(T)$	linearer thermischer Ausdehnungskoeffizient
β_{dicke}	Halbwertsbreite aufgrund der Schichtdicke
β_{intr}	intrinsische Halbwertsbreite
β_{kipf}	Halbwertsbreite aufgrund von Gitterverkipfung
$\beta_{krümm}$	Halbwertsbreite aufgrund von Probenkrümmung
β_{mess}	gemessene Halbwertsbreite
β_{mono}	Halbwertsbreite des Monochromators
β_{zerr}	Halbwertsbreite aufgrund von Gitterverzerrung
δ	halber Gangunterschied
Δa	Differenz zweier Gitterkonstanten
Δd	Differenz von RHEED Abständen von Ge und Si
δ_{kipf}	Substratverkipfung
ϵ_{mf}	Verzerrung aufgrund der Gitterfehlpassung
ϵ_{rest}	Restverzerrung
ϵ_{th}	thermisch induzierte Gitterverzerrung
ω	Einfallswinkel bei Röntgenmessungen
θ	Einfallswinkel bei Röntgenmessungen
λ	Wellenlänge
μ_n	Elektronenbeweglichkeit
μ_p	Löcherbeweglichkeit
ρ	Spezifischer Widerstand
σ_{Film}	freie Oberflächenenthalpie der Schicht
σ_{GF}	freie Oberflächenenthalpie der Grenzfläche
σ_{Sub}	freie Oberflächenenthalpie des Substrats

Abkürzungen

AFM	Rasterkraftmikroskopie (engl.: atomic force microscopy)
CVD	Chemische Gasphasenabscheidung (engl.: chemical vapor deposition)
HBT	Heterobipolartransistor (engl.: heterojunction bipolar transistor)
IC	Integrierte Schaltung (engl.: integrated circuit)
LTE	Tieftemperaturepitaxie (engl.: low-temperature epitaxy)
MBE	Molekularstrahlepitaxie (engl.: molecular beam epitaxy)
ML	Monolage
MOSFET	Metall-Oxid-Halbleiter-Feldeffekttransistor (engl.: metal-oxide-semiconductor field effect transistor)
MSM	Metall-Halbleiter-Metall
REM	Rasterelektronenmikroskopie (eng.: scanning electron microscopy, SEM)
RHEED	Beugung hochenergetischer Elektronen in Reflexion (engl.: reflection high energy electron diffraction)
RSM	reziproke Gitterkarte (engl.: reciprocal space map)
SIMS	Sekundärionenmassenspektroskopie (engl.: secondary ion mass spectroscopy)
SME	Surfactant-modifizierte Epitaxie (engl.: surfactant-mediated epitaxy)
SPE	Festphasenepitaxie (engl.: solid phase epitaxy)
TEM	Transmissionselektronenmikroskopie (engl.: transmission electron microscopy)
XRD	Röntgenbeugung (engl.: x-ray diffraction)
XRR	Röntgenreflektometrie (eng.: x-ray reflectivity)

1 Einleitung

Als Clemens Winkler 1886 das Germanium entdeckte [1], konnte er noch nicht ahnen, dass dieses Element etwa 60 Jahre später mit der Herstellung des ersten Transistors [2] das Informationszeitalter einleiten würde.[3] Erst einige Jahre später wurden auch Silizium-basierte Transistoren vorgestellt.[4] Obwohl auch die erste integrierte Schaltung [5] (engl.: integrated circuit, IC) auf der Verwendung von Germanium basierte, begann nur wenige Monate später durch ein Patent für Si-ICs [6] der Siegeszug der Siliziumtechnologie aufgrund der hohen Verfügbarkeit, der geringen Kosten aber vor allem aufgrund des als Isolator verwendbaren Siliziumdioxids.[7]

Auch wenn Silizium als Halbleitermaterial für integrierte Bauelemente dominierte, fand Germanium durch die Entwicklung von Heterobipolartransistoren (engl.: heterojunction bipolar transistor, HBT) [8], die überwiegend durch Silizium-Germanium Verbindungen realisiert wurden, erneut breite Anwendung.[9, 10, 11]

Durch stetige Strukturverkleinerungen [12] musste bei Metall-Oxid-Halbleiter-Feldeffekttransistoren (engl.: metal-oxide-semiconductor field effect transistor, MOSFET) eine Umstellung des Isolatormaterials von Siliziumdioxid auf sogenannte High-K Dielektrika erfolgen.[13] Da der Hauptgrund für die Nutzung von Silizium nun hinfällig war, wurde nach neuen Kanalmaterialien gesucht. In der INTERNATIONAL TECHNOLOGY ROADMAP FOR SEMICONDUCTORS (ITRS) wird Germanium als mögliches Kanalmaterial für den Zeitraum ab 2018 in Erwägung gezogen.[14] Aufgrund der deutlich höheren Elektronenbeweglichkeit $\mu_n = 3900 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ [15] und Löcherbeweglichkeit $\mu_p = 1800 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ [16] im Vergleich zu Si, können mit Ge besonders schnelle Transistoren realisiert werden.[17, 18] Durch verschiedene Wachstumsverfahren wie Surfactant-modifizierte Epitaxie [19], Wachstum auf $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ -Puffern [20, 21], Epitaxie von $\text{Ge}_{1-y}\text{C}_y$ Filmen

1 Einleitung

[22, 23], selektives Wachstum [24], sowie der Nutzung von Wasserstofftemperungen [25] konnten bereits hochwertige integrierte Ge-MOSFETs demonstriert werden.

Auch im Bereich der Optoelektronik findet Germanium immer mehr Anwendung. Aufgrund der deutlich besseren Absorptionseigenschaften im nahen Infrarotbereich im Vergleich zu Si oder GaAs [26, 27, 28, 29], eignet sich Germanium besonders für die Herstellung von Photodetektoren. Verschiedene Gruppen konnten bereits schnelle Metall-Halbleiter-Metall-(MSM-)Detektoren [30, 31, 32, 33], pn-Photodioden [34] sowie pin-Detektoren [35, 36, 37, 38, 39] realisieren. Hierbei konnten Bandbreiten um 40 GHz demonstriert werden.[40, 41] Auch besonders empfindliche Ge-Avalanche-Dioden sind möglich.[42] Bereits heute lassen sich durch die Verwendung von Germanium-Photodetektoren monolithisch integrierte Receiver [43, 44] und Transceiver [45] für Telekommunikationsanwendungen herstellen.

Aufgrund der geringen Gitterfehlpassung zu GaAs eignet sich Germanium als Substratmaterial für GaAs-basierte Optoelektronik. Verschiedene Konzepte für das Wachstum dünner virtueller Ge-Substrate auf Silizium konnten bereits demonstriert werden.[46, 47, 48, 49] Dies ermöglicht die Integration der heutzutage meist diskret ausgeführten III-V-Laser in die Siliziumtechnologie. Doch auch im Bereich der Germaniumlichtquellen gibt es deutliche Fortschritte. So konnten nicht nur Ge-basierte integrierte Leuchtdioden [50] realisiert werden, auch das Ziel eines integrierten Germanium-Lasers scheint erreichbar.[51] Des Weiteren bieten sich durch virtuelle Substrate auch neue Möglichkeiten im Bereich der Photovoltaik.[52]

In diesem Zusammenhang sind auch die Forschungen auf dem Gebiet der Germanium-Zinn-Verbindungen zu nennen.[53] Theoretische Berechnungen zeigen, dass durch die Zugabe von Zinn eine Verschiebung zu einem direkten Bandübergang in Germanium stattfindet und sich somit neue optische Möglichkeiten eröffnen.[54] Auch für Photodetektoren finden GeSn-Verbindungen Anwendung [55, 56], da das Ansprechvermögen im Vergleich zu reinem Germanium besser ist.[55] Da gleichzeitig auch die Ladungsträgerbeweglichkeiten erhöht werden [57], sind auch

Hochbeweglichkeits-MOSFETs realisierbar.[58, 59]

Dieser kurze Überblick zeigt, wie sehr Germanium sich für die verschiedensten Anwendungen eignet. Allen gemeinsam ist die Notwendigkeit von qualitativ hochwertigen Germaniumschichten auf Siliziumsubstraten. Im Folgenden soll ein Überblick über die aktuell gängigen Verfahren gegeben werden, mit denen Germaniumfilme auf Silizium erzeugt werden.

Der klassische Ansatz ist die Verwendung von gradierten $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ Pufferschichten.[60, 61] Hierbei wird die Gitterfehlpassung sukzessive durch Erhöhung der Germaniumkonzentration überwunden. Die Grenzflächen zwischen den Pufferschichten verhindern hierbei die Ausbreitung von Durchstoßversetzungen.[62, 21] Nachteilig ist, dass häufig mehrere Mikrometer dicke Puffer gewachsen werden müssen.

Durch die Verwendung von Tieftemperaturepitaxie (engl.: low-temperature epitaxy, LTE) wird die Inselbildung bei Wachstumstemperaturen um $300\text{ }^\circ\text{C}$ weitestgehend unterdrückt. Durch anschließendes zyklisches Tempern kann die zunächst hohe Zahl an Durchstoßversetzungen reduziert werden.[63] Allerdings nimmt mit der Temperatur auch die Interdiffusion von Si ins Ge zu, so dass bereits Temperaturen von $750\text{ }^\circ\text{C}$ ausreichen, um zu einer Vermischung an der Grenzfläche zu führen.[64]

Bei noch tieferen Temperaturen kommt es zur Ausbildung der amorphen Phase. Die kristalline Struktur bildet sich erst in anschließenden Temperprozessen, die zu einer Kristallisation führen. Diese Art des Wachstums wird als Festphasenepitaxie (engl.: solid phase epitaxy, SPE) bezeichnet. Häufig wird bei SPE auf Surfactants (surfactants = surface active agents) zurückgegriffen, um eine Inselbildung bei der Kristallisation zu vermeiden.[65, 66]

In der Surfactant-modifizierten Epitaxie (engl.: surfactant-mediated epitaxy, SME) beeinflussen zusätzlich verwendete Materialien das Wachstum und Unterdrücken die Inselbildung.[67, 68, 69, 70, 71] Durch das Ko-Verdampfen von Germanium und des Surfactants findet beim Wachstum gleichzeitig eine Dotierung des Films statt. Diese Hintergrunddotierung kann im Bereich von 10^{16} cm^{-3} liegen.[72] Eine Hintergrunddotierung führt zu vermehrter Streuung und somit zu einer Verringerung der La-

1 Einleitung

dungsträgerbeweglichkeiten und sollte deshalb vermieden werden. Um intrinsische Germaniumfilme zu erzeugen, müssten die klassischen Surfactants Sb und As durch ein Material ersetzt werden, das Germanium nicht dotiert und gleichzeitig die Bildung von Inseln unterdrückt.

Die Verwendung von Kohlenstoff könnte eine Lösung für dieses Problem sein. Die erste Anforderung, Germanium nicht zu dotieren, erfüllt Kohlenstoff aufgrund seiner isoelektronischen Eigenschaften. Ob Kohlenstoff auch die Inselbildung unterdrückt, ist nicht ganz so eindeutig zu beantworten. Bisher wurde C vermehrt im Bereich der Quantenpunkte verwendet, um die Inseldichte, -größe und -form einzustellen.[73, 74, 75, 76, 77, 78, 79] Der Kohlenstoff reduziert hierbei die kritische Schichtdicke beim Wachstum von Germanium und führt somit schneller zur Inselbildung.[80] Unter geeigneten Wachstumsbedingungen ist durch die Vorbelegung mit Kohlenstoff direktes Volmer-Weber Wachstum möglich.[79, 81] Das Wachstum auf Kohlenstoff-bedeckter Siliziumoberfläche ist somit nicht geeignet, glatte Germaniumfilme zu erzeugen.

Ohne Kohlenstoffvorbelegung konnten jedoch metastabile $\text{Ge}_{1-y}\text{C}_y$ Verbindungen mit Molekularstrahlepitaxie (engl.: molecular beam epitaxy, MBE) [82, 83, 84] und chemischer Gasphasenabscheidung (engl.: chemical vapor deposition, CVD) [22] hergestellt werden. Der eingebaute Kohlenstoff kann hierbei die Versetzungsausbreitung beeinflussen, was in $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ Schichten zu einer Verringerung der Dichte von Durchstoßversetzungen um zwei Größenordnungen im Vergleich zu $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ Schichten führt.[60]

In Si/Ge-Heterobipolartransistoren sorgt Kohlenstoff dafür, dass die Dotierprofile auch bei hohen Temperaturen erhalten bleiben.[85] $\text{Ge}_{1-y}\text{C}_y$ Filme konnten auch bereits in MOSFETs erfolgreich eingesetzt werden.[22, 23]

Die Verwendung von Kohlenstoff beim Germaniumwachstum hat jedoch nicht nur Vorteile. Es konnte gezeigt werden, dass sich mit zunehmender Kohlenstoffkonzentration die optische Bandlücke erhöht.[83, 84] Auch führt bei $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ Schichten eine erhöhte Kohlenstoffkonzentration von etwa 4% zu einer erhöhten Stapelfehlerdichte und ab etwa 11% zum Wechsel von kristallinem Wachstum zu amorpher Beschichtung.[86]

Obwohl es bereits eine Vielzahl von Verfahren gibt, die ein Wachstum von Ge auf Si ermöglichen, leiden sie unter den oben genannten Nachteilen. Im Rahmen dieser Arbeit wurde deshalb ein neues Verfahren zum Wachstum von relaxierten Germaniumfilmen auf Silizium (001)-Substraten entwickelt, das Tieftemperaturepitaxie mit der Beschichtung mit einer Submonolage Kohlenstoff und einer anschließenden Temperung kombiniert. Der Einfluss der Wachstumstemperatur, der Temperung, der Schichtdicke sowie der Kohlenstoffbedeckung wird ausführlich diskutiert. Durch die Verwendung von Kohlenstoff findet keine Hintergrunddotierung statt. Weiterhin wird gezeigt, dass der Kohlenstoff nicht nur die Inselbildung unterdrückt, sondern auch die Defektausbreitung beeinflusst.

Dass Germanium auch über 120 Jahre nach der Entdeckung noch immer Herausforderungen bereithält, ist vielleicht nicht so überraschend, denn allein die „Ausfindigmachung desselben brachte [...] grosse Schwierigkeiten und peinigende Zweifel mit sich“ [1].

2 Germaniumepitaxie auf Silizium

In den folgenden Unterkapiteln wird zunächst kurz auf die Grundlagen der Heteroepitaxie eingegangen, um anschließend Aspekte wie thermische Ausdehnung, Relaxation, Defekte und Diffusion konkret für den Fall von Germanium und Silizium zu erläutern.

2.1 Heteroepitaxie

Als Epitaxie bezeichnet man das geordnete Wachstum eines Materials auf einem kristallinen Substrat. Sind Schicht- und Substratmaterial identisch handelt es sich um Homoepitaxie. Unterscheiden sich die verwendeten Materialien spricht man von Heteroepitaxie. Wie perfekt dieses Wachstum ist, hängt von verschiedenen Faktoren wie der Kristallstruktur oder der Gitterfehlpassung f ab, die durch die unterschiedlichen Gitterkonstanten a_i des Films und des Substrats hervorgerufen wird.

$$f = \frac{a_{Film} - a_{Sub}}{a_{Sub}} \quad (2.1)$$

Beim epitaktischen Wachstum treten eine Vielzahl von Oberflächenprozessen auf, die in Abbildung 2.1 dargestellt sind. Das zu wachsende Material wird zunächst auf der Oberfläche adsorbiert. Die Adsorbate können sich auf der Oberfläche bewegen und dort neue Keime bilden. Weiterhin kommt es zum Einbau an Stufenkanten sowie in bereits vorhandene Inseln. Ein zusätzlicher Effekt ist die Reifung von Inseln, bei der das energetisch ungünstige Verhältnis von Oberfläche zu Volumen von kleinen Inseln zu Materialtransport führt und somit größere Inseln auf Kosten der kleineren wachsen.[88] In Abhängigkeit der Temperatur kann es mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit auch wieder zu einer Desorption der Adsorbate kommen.

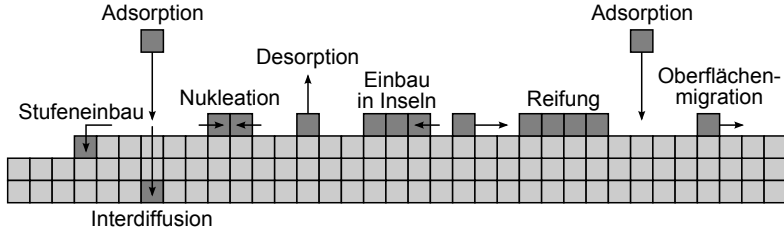


ABB. 2.1: Oberflächenprozesse der Epitaxie nach [87]. Nach der Adsorption kann es zum Einbau an Stufenkanten, in Inseln oder zur Keimbildung kommen. Zusätzliche Effekte wie Reifung von Inseln sowie Interdiffusion können ebenfalls auftreten.

Das fortschreitende Schichtwachstum kann durch verschiedene Wachstumsmodi beschrieben werden, die unter anderem durch die Benetzungseigenschaften hervorgerufen werden. Das Benetzungsverhalten hängt bei unterschiedlichen Materialien von den freien Oberflächenenthalpien des Substrats σ_{Sub} , des aufzuwachsenden Materials σ_{Film} sowie der Grenzfläche σ_{GF} ab. Mithilfe des Bauer-Kriteriums [89]

$$\Delta\sigma = \sigma_{Film} - \sigma_{Sub} + \sigma_{GF} \quad (2.2)$$

lassen sich verschiedene Wachstumsmodi unterscheiden:

Frank-van der Merwe Wachstum (Abbildung 2.2(a))[90, 91]: Wenn $\Delta\sigma < 0$ ist, kann das Filmmaterial das Substrat vollständig benetzen und das Wachstum erfolgt Lage für Lage.

Volmer-Weber Wachstum (Abbildung 2.2(b))[92]: Eine Benetzung des Substrats findet nicht statt, wenn $\Delta\sigma > 0$ ist. Es kommt stattdessen zur Ausbildung von einzelnen Inseln.

Stranski-Krastanov Wachstum (Abbildung 2.2(c))[93]: Zu Beginn des epitaktischen Wachstums ist $\Delta\sigma < 0$, was zunächst wie bei Frank-van der Merwe Wachstum zur vollständigen Benetzung führt. Mit zunehmender Schichtdicke ändern sich die freien Oberflächenenergien, bis nach wenigen Lagen $\Delta\sigma > 0$ wird und es anschließend zur Bildung von Inseln auf der Benetzungsschicht kommt.

2 Germaniumepitaxie auf Silizium

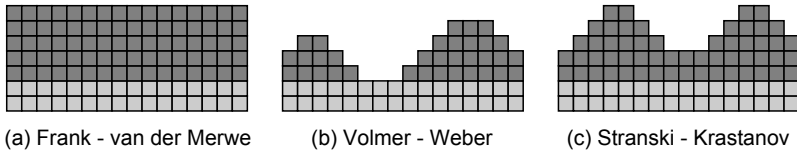


ABB. 2.2: Wachstumsmodi der Epitaxie. (a) Lagenwachstum nach Frank-van der Merwe, (b) Inselbildung nach Volmer-Weber, (c) Wachstum weniger Monolagen mit anschließender Inselbildung nach Stranski-Krastanov.

Bei der Epitaxie von Germanium auf Silizium handelt es sich um Stranski-Krastanov Wachstum. Aufgrund der hohen Gitterfehlpassung von 4,18 % beträgt die kritische Schichtdicke, ab der Inselbildung einsetzt, nur wenige Monolagen.[94, 95, 96]

2.2 Relaxation

Beim heteroepitaktischen Wachstum eines Materials mit größerer Gitterkonstante (z.B. Ge) auf einem Substrat mit geringerer Gitterkonstante (z.B. Si) können verschiedene Spannungszustände auftreten, die idealisiert in Abbildung 2.3 dargestellt sind. Beim gitterangepassten oder pseudomorphen Wachstum (Abbildung 2.3(a)) sind die Gitterkonstanten von Schicht und Substrat in der Ebene (in-plane) identisch. Aufgrund tetragonaler Verzerrung ist die Gitterkonstante senkrecht zur Oberfläche (out-of-plane) deutlich größer als bei Volumenmaterial. Mit zunehmender Schichtdicke nimmt die Gesamtspannung des Systems immer mehr zu, bis die maximale im Film speicherbare Spannung überschritten wird und dadurch Relaxationsprozesse ausgelöst werden. Eine teilrelaxierte Schicht (Abbildung 2.3(b)) im obengenannten Beispiel erfährt in out-of-plane Richtung eine Zugspannung wohingegen in-plane noch immer eine Druckspannung vorliegt. Von vollständiger Relaxation (Abbildung 2.3(c)) spricht man, wenn das Schichtmaterial so weit relaxiert ist, dass es seine Volumengitterkonstante aufweist. Das Maß für die Relaxation einer

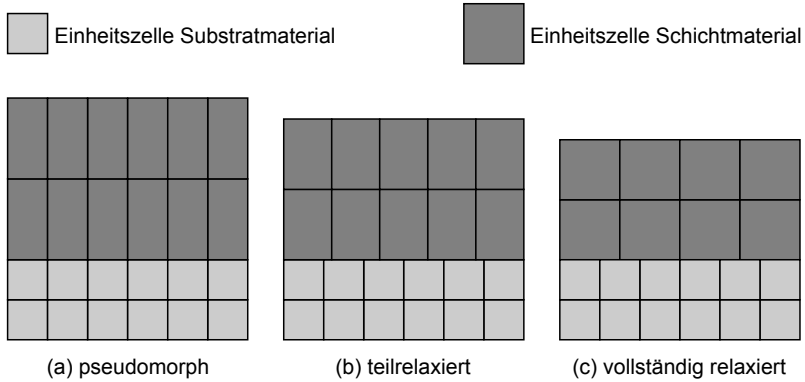


ABB. 2.3: Spannungszustände der Heteroepitaxie nach [97]. (a) Pseudomorphes oder gitterangepasstes Wachstum liegt vor, wenn das Schichtgitter parallel zur Grenzfläche die gleiche Gitterkonstante wie das Substrat annimmt. Es kommt hierbei ebenfalls zu einer Verzerrung des Schichtgitters senkrecht zur Grenzfläche. (c) Vollständige Relaxation bedeutet, dass das Schichtmaterial seine Volumengitterkonstante aufweist. (b) Eine Teilrelaxation liegt vor, wenn sich die Gitterkonstanten des Schichtgitters zwischen diesen beiden Extremen befinden.

Schicht ist der Relaxationsgrad R .

$$R = \frac{a_{Film,\parallel} - a_{Sub,\parallel}}{a_{Sub,\parallel} \cdot f} \quad (2.3)$$

Die Relaxation kann über verschiedene Mechanismen erfolgen. Zunächst kann der Film elastisch relaxieren, in dem die Oberflächenmorphologie verändert wird (z.B. bei Stranski-Krastanov Wachstum). Durch eine Aufrauung nähern sich einige Bindungslängen der oberflächennahen Atome denen des Volumenmaterials auf Kosten einer vergrößerten Oberfläche an.[98] Im Gegensatz hierzu steht die plastische Relaxation, die durch Defekte, vorzugsweise Versetzungen, einen Spannungsabbau herbeiführt. Heteroepitaktische Systeme bei denen Stranski-Krastanov Wachstum auftritt, weisen eine kritische Schichtdicke h_c^{elast} auf, ab der Inselbildung einsetzt. Ausführliche Untersuchungen der kritischen Schichtdicke zei-

2 Germaniumepitaxie auf Silizium

gen, dass h_c^{elast} mit zunehmender Gitterfehlpassung bzw. steigendem Germaniumgehalt in $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ Verbindungen abnimmt.[94, 95, 96, 99] Darüber hinaus gibt es auch für das Einsetzen der plastischen Relaxation über das Ausbilden von Versetzungen eine kritische Schichtdicke h_c^{plast} . Beim Wachstum von reinem Germanium auf Silizium setzt die elastische vor der plastischen Relaxation ein. Durch ein Absenken der Wachstumstemperatur bzw. durch die Unterdrückung der Inselbildung durch z.B. Surfactants ist es jedoch möglich, die Ausbildung von Versetzungen und somit plastische Relaxation vor dem Einsetzen der elastischen Relaxation herbeizuführen.[100]

2.3 Defekte

Ausführliche Beschreibungen kristallographischer Defekte sind in [101, 102, 103, 104, 105] zu finden. Sie können nach ihrer Dimensionalität klassifiziert werden.[103] Ein null-dimensionaler Defekt oder Punktdefekt kann z.B. eine Fehlstelle im Kristall oder ein Zwischengitteratom sein. Während Fehlstellen mit zunehmender Temperatur vermehrt auftreten [103], können Zwischengitteratome durch Tieftemperaturepitaxie erzeugt werden.[106]

Versetzungen bezeichnet man als eindimensionale Defekte oder auch Liniendefekte. Es gibt eine Vielzahl verschiedener Arten (Abbildung 2.4), die über die relative Lage ihres Richtungsvektors \vec{l} sowie des Burgersvektors \vec{b} bestimmt werden können. Der Burgersvektor kann durch einen sogenannten Burgersumlauf ermittelt werden, der den Versetzungskern einschließt und im ungestörten Kristall einen geschlossenen Pfad bildet (Abbildung 2.4(a)).[101] Der offene Burgersumlauf um die Versetzung wird dann durch den Burgersvektor \vec{b} geschlossen. Entspricht dieser einem Gittervektor, spricht man von einer vollständigen Versetzung. Sind \vec{b} und \vec{l} senkrecht zueinander, handelt es sich um eine Stufenversetzung (Abbildung 2.4(a)), deren Burgersvektor z.B. $\vec{b} = \frac{a}{2} [0\bar{1}\bar{1}]$ ist (für den Fall der $(\bar{1}11)$ -Gleitebene auf (001) Substrat).[102] Bei Parallelität von \vec{b} und \vec{l} liegt eine Schraubenversetzung (Abbildung 2.4(b)) mit einem Burgersvektor von $\vec{b} = \frac{a}{2} [01\bar{1}]$ vor.[102] Darüberhinaus sind auch Mischformen

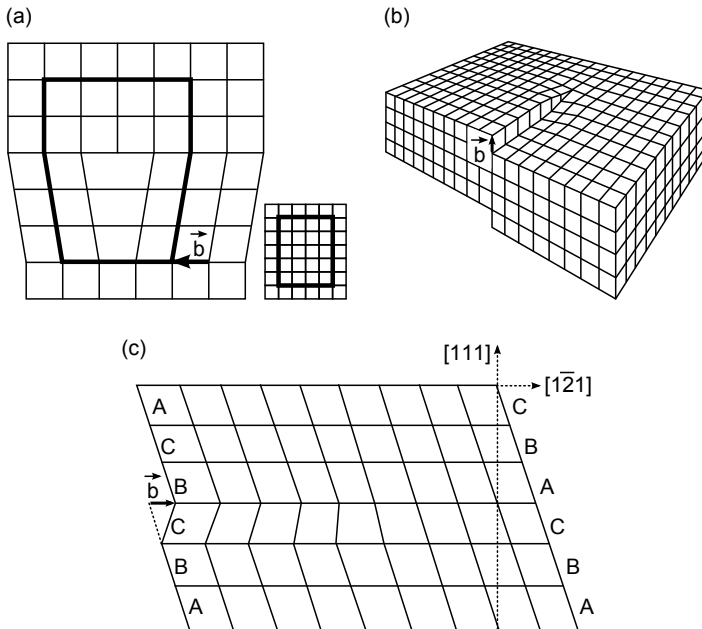


ABB. 2.4: Versetzungsarten nach [101]. (a) Stufenversetzung mit Burgersumlauf. Der Burgersumlauf des ungestörten Kristalls ist klein dargestellt. (b) Schraubenversetzung. (c) Shockley-Partialversetzung, die durch Aufspaltung des Burgersvektors einer vollständigen Versetzung in zwei kürzere Burgersvektoren entsteht und einen Stapelfehler zur Folge hat.

möglich.[107] Eine spezielle Versetzung, die sowohl Schrauben- als auch Stufencharakter aufweist, ist die 60° -Versetzung, deren Burgersvektor $\vec{b} = \frac{a}{2} [101]$ ist.[102]

Eine sogenannte Shockley-Partialversetzung ist in Abbildung 2.4(c) dargestellt. Sie entsteht durch eine Aufspaltung des Burgersvektors einer vollständigen Versetzung (Burgersvektor entspricht einem Gittervektor) in zwei kürzere Burgersvektoren, falls dies energetisch günstiger ist. Mit Shockley-Partialversetzungen gehen grundsätzlich Stapelfehler einher.

Als Stapelfehler bezeichnet man eine Unregelmäßigkeit in der Abfolge von

2 Germaniumepitaxie auf Silizium

Kristallebenen (Beispiel in Abbildung 2.4(c): $ABCABC \rightarrow ABC B CA$, es fehlt eine Kristallebene A). Sie gehören zu den zweidimensionalen Defekten. Ein Sonderfall sind sogenannte Zwillinge, bei denen die Ebenensequenz gespiegelt auftritt ($ABC A CBA$). Aufgrund der begleitenden Versetzungen tragen Stapelfehler zur Relaxation bei. Fehlstapelungen setzen sich beim Wachstum fort und können bis zur Oberfläche reichen. Für Bauelementeanwendungen sind jedoch defektfreie Gebiete nötig (z.B. Kanal beim MOSFET), so dass die Stapelfehlerdichte so gering wie möglich sein sollte.

Versetzungen können sich durch zwei Mechanismen ausbreiten. Ein Gleiten von Versetzungen ist über sogenannte Gleitebenen möglich. Es handelt sich im Diamantgitter bevorzugt um die $\{111\}$ -Ebenen. Liegt der Burgersvektor der Versetzung innerhalb einer Gleitebene (z.B. 60° -Versetzung), kann sie sich durch Gleiten ausbreiten.[102] Liegt der Burgersvektor jedoch nicht in der Gleitebene, kann sich die Versetzung lediglich durch Versetzungsklettern bewegen.[102] Dieser Prozess ist langsamer und erfolgt durch Massentransport.[101]

Idealerweise findet die Relaxation durch ein sofortiges Ausbilden eines auf die Grenzfläche beschränkten Versetzungsnetzwerks, bestehend aus vollständigen Stufenversetzungen, statt. Da ihr Burgersvektor innerhalb der Grenzfläche liegt, trägt sie zu 100 % zur Relaxation bei.[102] Im Gegensatz hierzu würde eine 60° -Versetzung nur zu 50 % zum Spannungsabbau beitragen.[102] Um die Gitterfehlpassung von Ge und Si $f = 4,18\%$ komplett zu kompensieren, müsste jeweils im Abstand von 25 Siliziumnetzebenen eine vollständige Stufenversetzung auftreten. Der Netzebenenabstand in kubischen Systemen beträgt $d_{hkl} = a/|hkl|$. Für $\langle 110 \rangle$ -Richtungen ist $d_{\langle 110 \rangle} = a/\sqrt{2}$, woraus sich der Abstand der vollständigen Stufenversetzungen eines idealen Versetzungsnetzwerks einer vollständig relaxierten Germaniumschicht auf Si(001)-Substrat zu

$$d_{mfd} = 25 \cdot a_{Si}/\sqrt{2} = 24 \cdot a_{Ge}/\sqrt{2} = 9,6 \text{ nm} \quad (2.4)$$

berechnen lässt.

2.4 Thermische Ausdehnung

In Kapitel 2.1 wurde die Gitterfehlpassung f als Relation der Gitterkonstanten von Schicht und Substrat eingeführt. Aufgrund der unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Silizium und Germanium ändert sich die Gitterfehlpassung jedoch mit der Temperatur und erzeugt somit eine zusätzliche thermische Spannung.

Die thermische Abhängigkeit der Gitterkonstante $a(T) = a_0 + \alpha(T)$ lässt sich für Silizium und Germanium im Bereich von 0°C bis 800°C linear annähern.[98]

$$\alpha_{Si}(T) = (2,7 + 0,0026 \cdot T) \cdot 10^{-6} \quad (2.5)$$

$$\alpha_{Ge}(T) = (5,9 + 0,0021 \cdot T) \cdot 10^{-6} \quad (2.6)$$

Die thermisch induzierte Spannung lässt sich nun in Abhängigkeit der Temperaturdifferenz berechnen.

$$\epsilon_{th} = (\alpha_{Ge} - \alpha_{Si}) \cdot \Delta T \quad (2.7)$$

Da die Differenz $(\alpha_{Ge} - \alpha_{Si})$ für Temperaturen unterhalb der Schmelzpunkte von Si und Ge positiv ist, wird beim Abkühlen ($\Delta T < 0$) eine Zugspannung induziert. Die bei Raumtemperatur vorliegende und durch Röntgenmessungen bestimmbare Restverzerrung ϵ_{rest} des Films setzt sich aus der thermischen Spannung ϵ_{th} sowie der noch vorhandenen Druckspannung aufgrund der Gitterfehlpassung ϵ_{mf} zusammen.

$$\epsilon_{rest} = \epsilon_{mf} - \epsilon_{th} \quad (2.8)$$

Unter der Annahme, dass bei der höchsten Prozesstemperatur der höchste Relaxationsgrad und somit die geringste durch die Gitterfehlpassung hervorgerufene Spannung ϵ_{mf} vorliegt, kann die Restverzerrung bei Raumtemperatur sowohl positiv als auch negativ sein und somit Druck- oder Zugspannung vorliegen.

2.5 Diffusion

Durch hohe Temperaturen kann es auch in Festkörpern zu Materialtransport kommen. Für die Heteroepitaxie bedeutet dies, dass durch Diffusionsprozesse eine Durchmischung stattfindet und somit keine ideale scharfe Grenzfläche zwischen Schicht und Substrat vorliegt. Wie ausgeprägt die Diffusion ist, wird durch die Diffusionskonstante beschrieben, die sich gemäß Gleichung 2.9 [88] berechnen lässt.

$$D = D_0 \cdot e^{\left(\frac{-E_A}{k_B T}\right)} \quad (2.9)$$

Die Literaturwerte für die Aktivierungsenergie E_A und des Vorfaktors D_0 für Siliziumdiffusion in Germanium unterscheiden sich sehr stark [108, 109, 110, 111], da jeweils unterschiedliche Ansätze (Implantation, Sputtern etc.) verwendet wurden und somit auch unterschiedliche Spannungs- und Defektzustände vorliegen.[111]

Diffusion ist jedoch nicht nur temperaturabhängig. Ein weiterer Einfluss ist die elastische Verspannung, die zu einer erhöhten Diffusion führt.[112] Im Fall von Germaniumepitaxie auf Silizium trifft dies bis zum Erreichen der kritischen Schichtdicke zu.

Diffusionsprozesse wurden im Rahmen dieser Arbeit mit Sekundärionenmassenspektroskopie untersucht. Der gemessene Konzentrationsverlauf von Germanium wurde durch eine Funktion angenähert, die auf dem zweiten Fick'schen Gesetz basiert.[88]

$$N(z) = \frac{N_{max}}{2} \cdot \left(1 - \operatorname{erf}\left(\frac{z}{2L}\right)\right) \quad (2.10)$$

Hierbei ist L die Diffusionslänge, N_{max} die maximale Konzentration und z die Messtiefe des SIMS-Profiles. Für die Si/Ge-Grenzfläche gilt $z = 0$ und folglich $z < 0$ im Bereich des Germaniums, sowie $z > 0$ im Substrat. Um den Konzentrationsverlauf von Silizium anzunähern, muss lediglich das Vorzeichen vor der Fehlerfunktion in Gleichung 2.10 umgekehrt werden.

Aus der Diffusionslänge L lässt sich mit der Prozesszeit t des jeweiligen Temperaturbereichs anschließend die Diffusionskonstante bestimmen.

$$L = \sqrt{Dt} \tag{2.11}$$

3 Messmethoden

Im Folgenden werden die in dieser Arbeit verwendeten Messverfahren erläutert. Es wird gezielt nur auf die für das Verständnis der Arbeit nötigen Grundlagen eingegangen. Darüber hinausgehende Informationen sind in der angegebenen Literatur zu finden.

3.1 Elektronenbeugung

Durch die Beugung hochenergetischer Elektronen in Reflexion (engl.: reflection high energy electron diffraction, RHEED) können *in situ* Untersuchungen der Oberfläche durchgeführt werden. In der Molekularstrahl-epitaxie wird dieses Verfahren vielfach zur Prozesskontrolle eingesetzt. Ausführliche Beschreibungen dieses Verfahrens sind u.a. in [114, 115, 116] zu finden.

Um Beugungsbilder von den Proben zu erzeugen, werden Elektronen mit Spannungen im Bereich von 10 keV bis 50 keV beschleunigt und treffen unter streifendem Einfall auf die Probe.[117] Es werden hierbei lediglich die obersten Atomlagen in den Beugungsprozess mit einbezogen, so dass es sich um Beugung an einem zweidimensionalen Gitter handelt. Die gebeugten oder reflektierten Elektronen treffen auf einen Fluoreszenzschirm. Das Beugungsbild wird zur Analyse über eine CCD-Kamera auf einen Computer übertragen.

Die Entstehung der Beugungsbilder ist schematisch in Abbildung 3.1 dargestellt. Da es sich um Beugung an einem zweidimensionalen Gitter handelt, entarten die reziproken Gitterpunkte zu reziproken Gitterstangen. Die einfallenden Elektronen werden nun an der Oberfläche reflektiert und gestreut. Das Beugungsmuster entsteht durch Interferenz der gebeugten

3.1 Elektronenbeugung

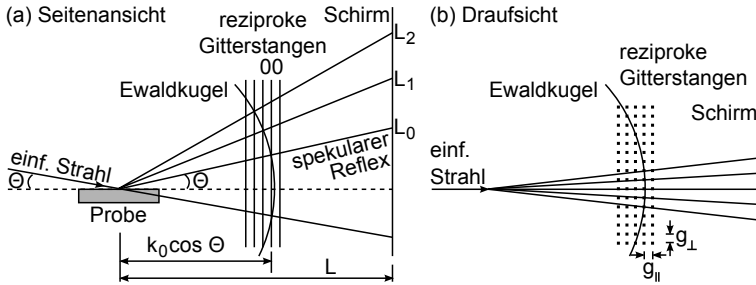


ABB. 3.1: Entstehung der RHEED-Beugungsbilder nach [113] in der (a) Seitenansicht und der (b) Draufsicht durch Interferenz der gebeugten Elektronen. Intensitätsmaxima entstehen durch konstruktive Interferenz an Schnittpunkten der reziproken Gitterstangen mit der Ewaldkugel.

Elektronen, die durch die Laue-Bedingung beschrieben werden kann.[118]

$$\left(\vec{k} - \vec{k}_0\right) \cdot \vec{r} = m2\pi, \quad m \in \mathbb{Z} \quad (3.1)$$

Hierbei entspricht \vec{k}_0 dem Wellenvektor des einfallenden Elektronenstrahls, \vec{k} dem Wellenvektor der gestreuten Elektronen und \vec{r} dem Gittervektor. Mithilfe der Ewaldkugel, die ebenfalls in Abbildung 3.1 dargestellt ist, lässt sich die Laue-Bedingung veranschaulichen. Jeder Schnittpunkt einer reziproken Gitterstange mit der Ewaldkugel mit dem Radius k_0 um den Anfangspunkt des Wellenvektors \vec{k}_0 erfüllt die Laue-Bedingung und führt zu konstruktiver Interferenz. Die entstehenden Intensitätsmaxima liegen auf den sogenannten Laue-Kreisen.

Das erzeugte Beugungsbild ist sehr stark von der Oberflächenmorphologie abhängig (Abbildung 3.2). Eine ideal glatte Oberfläche erzeugt im Beugungsbild ein Punktmuster auf den Lauekreisen (Abbildung 3.2(a)).[117] Bei realen Oberflächen hingegen liegen Defekte und zumeist eine leichte Stufung (zum Beispiel durch Fehlorientierung) vor, die zu einer Streckung des Punktmusters führen und somit eine Verbreiterung der reziproken Gitterstangen hervorrufen.[117] Ist die Oberfläche stark dreidimensional (z.B. Inseln), treten Durchstrahlungseffekte auf, die zu einer Vielzahl von

3 Messmethoden

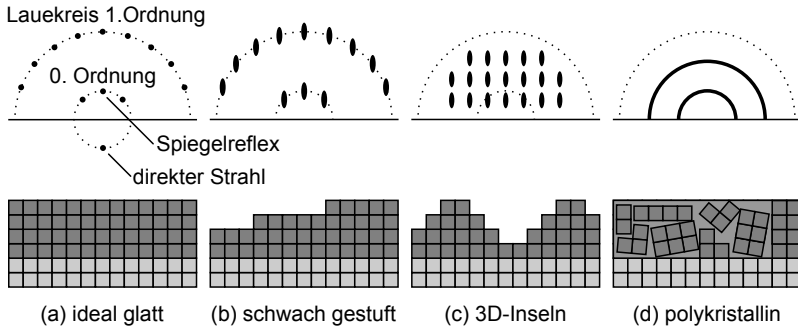


ABB. 3.2: RHEED-Beugungsbilder in Abhängigkeit der Oberflächenmorphologie. (a) Ideal glatte Oberflächen erzeugen ein Punktmuster auf den Lauekreisen. (b) Die schwache Stufung realer Oberflächen führt zu einer Streckung des Punktmusters auf den Lauekreisen. (c) Dreidimensionale Inseln erzeugen zusätzliche Reflexe, die nicht auf den Lauekreisen liegen. (d) Polykristalline Schichten erzeugen Ringe im Beugungsbild.

Beugungsreflexen führen, die nicht auf den Laue-Kreisen liegen. Polykristalline Materialien zeigen ein ringförmiges Beugungsmuster.

Mithilfe von RHEED können auch *in situ* Untersuchungen der Relaxation durchgeführt werden.[119, 120] Hierfür wird ein fester Bereich des in [110]-Richtung aufgenommenen RHEED-Musters analysiert.

In Abbildung 3.3(a) ist das RHEED-Muster eines rauhen bzw. (b) eines glatten 2×1 rekonstruierten Germaniumfilms dargestellt. Die halbtransparenten Rechtecke repräsentieren den analysierten Zeilenbereich (engl.: line scan), der jeweils rechts als Messkurve gezeigt ist. Die Peakpositionen werden durch Gaussfunktionen gefittet, nachdem das Untergrundsignal subtrahiert wurde. Der durchschnittliche Abstand d wird für mehrere Peaks bestimmt und daraus der Mittelwert gebildet.

Um Einflüsse des apparativen Aufbaus zu minimieren, wurde diese Untersuchung zunächst für das saubere 2×1 rekonstruierte Siliziumsubstrat durchgeführt. Betrachtet man nun lediglich die Abstände der RHEED-Reflexe relativ zum Silizium, so erhält man ein direktes Maß der vorlie-

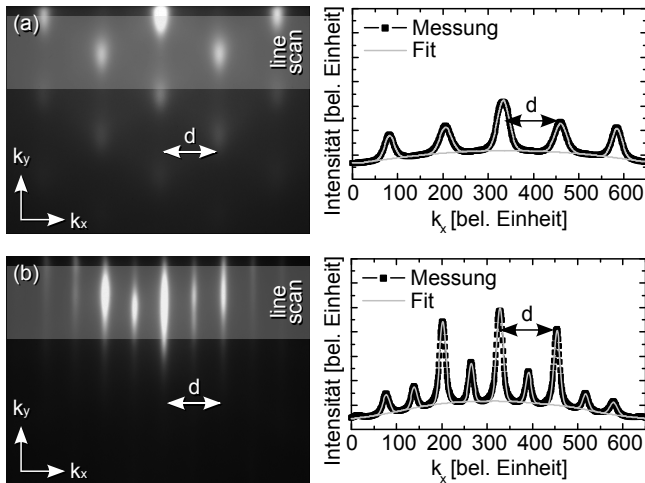


ABB. 3.3: *In situ* Relaxationsuntersuchungen mit RHEED für (a) einen rauhen und (b) einen glatten 2×1 rekonstruierten Germaniumfilm. Ein line scan mit fester Breite und Position wird für alle RHEED-Bilder durchgeführt. Aus den Messkurven (rechts) werden die Peakpositionen durch Gaussfunktionen nach Abzug des Untergrunds ermittelt. Eine Bestimmung relativ zu den Silizium-Reflexabständen liefert ein direktes Maß der in-plane Gitterfehlpassung und somit des Relaxationsgrads.

genden in-plane Gitterfehlpassung $f_{\parallel} = \Delta d/d_{Si}$ und somit des Relaxationsgrads $R = f_{\parallel}/0,0418$.

3.2 Röntgenbeugung

Mithilfe von Röntgenbeugung (engl.: x-ray diffraction, XRD) können strukturelle Eigenschaften von Epitaxieschichten analysiert werden. Ausführliche Informationen zu dieser Messmethode sind z.B. in [97, 121] zu finden.

Eine grundlegende Beschreibung der Röntgenbeugung ist durch die Bragg-Bedingung gegeben, die in Abbildung 3.4 schematisch dargestellt ist. Wenn

3 Messmethoden

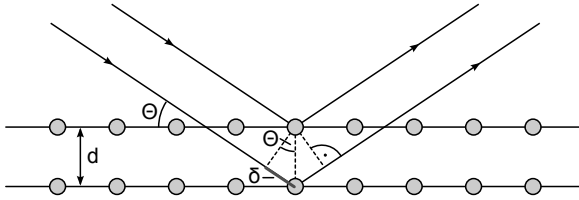


ABB. 3.4: Bragg-Bedingung. Nach Beugung an mehreren Netzebenen kommt es zu konstruktiver Interferenz wenn der Gangunterschied 2δ ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge ist.

einfallende Röntgenstrahlen an unterschiedlichen Netzebenen gebeugt werden, kommt es zu konstruktiver Interferenz, wenn der Gangunterschied 2δ ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge λ ist. Aufgrund der Geometrie der Anordnung ergibt sich mit $2\delta = 2d_{hkl} \sin \theta$ die Bragg'sche Gleichung [122]

$$n\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta. \quad (3.2)$$

Aus einem Röntgendiffraktogramm lässt sich der Netzebenenabstand d bestimmen, der über die Millerschen Indizes der zugehörigen Netzebenschar mit der Gitterkonstante a zu

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (3.3)$$

verknüpft werden kann.

Sämtliche in dieser Arbeit gezeigten Röntgenmessungen wurden mit Hilfe eines D8 DISCOVER mit Euler-Wiege der Firma BRUKER durchgeführt. Der schematische Aufbau ist in Abbildung 3.5 dargestellt. Es wird eine kippbare Röntgenröhre mit Kupferanode und Strichfokus verwendet, so dass auch in-plane Messungen möglich sind. Die Parallelisierung des Röntgenstrahls erfolgt durch einen Göbelspiegel, der gleichzeitig die Strahlungsanteile der k_β -Linie entfernt. Für die Reduzierung auf den $k_{\alpha 1}$ -Anteil stehen ein symmetrischer sowie ein asymmetrischer Monochromator zur Verfügung. Da der vorliegende asymmetrische Monochromator eine Auflösung besitzt, die deutlich besser als in der Spezifikation beschrieben

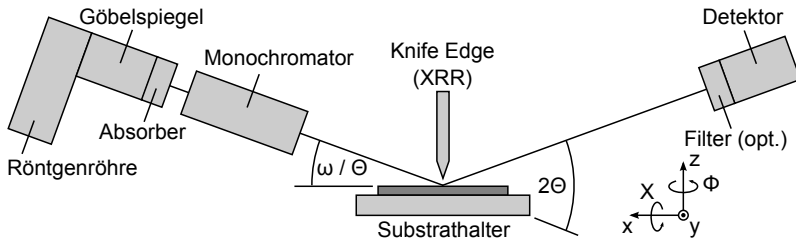


ABB. 3.5: Aufbau des verwendeten Diffraktometers mit Euler-Wiege. Die Röntgenstrahlung wird durch eine Röntgenröhre mit Cu-Anode erzeugt und mit einem Göbelspiegel und einem asymmetrischen Monochromator parallelisiert und auf den $k_{\alpha 1}$ -Anteil reduziert. Der Detektor kann wahlweise mit einer variablen Schlitzblende als auch mit einem zusätzlichen Monochromator betrieben werden. Für Reflektometrie-messungen steht eine Knife Edge zur Verfügung.

ist, sind hier die Unterschiede zwischen den Monochromatoren gering. Aufgrund der deutlich höheren Intensität wurde im Rahmen dieser Arbeit jedoch ausschließlich der asymmetrische Monochromator verwendet. Der Detektor kann wahlweise mit einem variablen Schlitz (Standard) oder auch mit einem zusätzlichen Triple-Bounce-Monochromator verwendet werden. Letzterer erhöht noch einmal die Auflösung bei gleichzeitiger Reduzierung der Zählrate um den Faktor 10 und wurde nur zur Messung von reziproken Gitterkarten verwendet. Für Reflektometrie-messungen steht eine Schneidblende (engl.: knife edge) zur Verfügung.

3.2.1 $\theta/2\theta$ -Messung

Untersuchungen des Relaxationsgrads sowie der kristallinen Struktur von Germaniumfilmen wurden mittels hochaufgelöster $\theta/2\theta$ -Messungen durchgeführt. Abbildung 3.6(a) illustriert die Messrichtung im reziproken Raum, die entlang der G_{\perp} -Achse verläuft. Die kristallographische Ausrichtung der Probe zum Röntgenstrahl erfolgt über ein automatisiertes Skript. Da es sich um Germaniumfilme auf Si(001)-Substraten handelt, wurden jeweils die (004)-Reflexe untersucht. Aus der Winkelposition des Schichtreflexes relativ zum Substratreflex lässt sich aus dieser Messung

3 Messmethoden

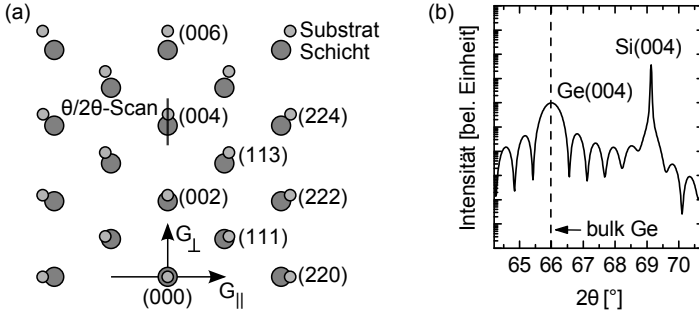


ABB. 3.6: $\theta/2\theta$ -Messung. (a) Messrichtung im reziproken Raum am Beispiel von vollständig relaxiertem Germanium auf Si(001). (b) Simulierte $\theta/2\theta$ -Kurve für 20 nm vollständig relaxiertes Germanium auf Si(001).

(exemplarisch in Abbildung 3.6(b): vollständig relaxiertes Germanium auf Silizium) der Abstand der parallel zur Oberfläche verlaufenden Netzebenen d_{hkl} und somit die out-of-plane Gitterkonstante der Schicht bestimmen. Im Falle tetragonaler Verzerrung lässt sich hieraus die in-plane Gitterkonstante mit Hilfe der elastischen Konstanten von Germanium [123] $C_{11} = 12,853 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$ und $C_{12} = 4,826 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$ berechnen.

$$\frac{\Delta a_{\parallel}}{a_{Si,\parallel}} = \frac{1}{\frac{C_{11}+2C_{12}}{C_{11}} - 1} \left(\frac{C_{11} + 2C_{12}}{C_{11}} \frac{\Delta a_{bulk}}{a_{Si,bulk}} - \frac{\Delta a_{\perp}}{a_{Si,\perp}} \right) \quad (3.4)$$

Unter der Annahme, dass das Substrat unverspannt bleibt, entspricht die in-plane Gitterkonstante $a_{Si,\parallel}$ dem Volumenwert $a_{Si,bulk}$. Der Relaxationsgrad lässt sich anschließend zu

$$R = \frac{1}{0,0418} \cdot \frac{\Delta a_{\parallel}}{a_{Si,\parallel}} \quad (3.5)$$

berechnen.

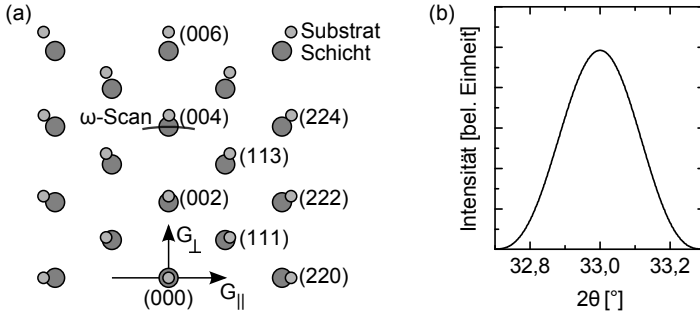


ABB. 3.7: ω -Messung. (a) Messrichtung im reziproken Raum am Beispiel von vollständig relaxiertem Germanium auf Si(001). (b) Simulierte ω -Kurve für 20 nm vollständig relaxiertes Germanium auf Si(001).

3.2.2 ω -Messung

Mithilfe von ω -Messungen (häufig auch Rockingkurven genannt) lässt sich eine Aussage über die strukturelle Perfektion von kristallinen Schichten treffen. Zunächst wird die Probe wie bei $\theta/2\theta$ -Messungen kristallographisch ausgerichtet. Im Gegensatz zur $\theta/2\theta$ -Messung wird dann jedoch lediglich der ω -Winkel variiert, während 2θ durchgehend dem für die zu messende Netzebenenchar bestimmten Braggwinkel entspricht. In Abbildung 3.7(a) ist die Messrichtung im reziproken Raum dargestellt. Aus der resultierenden gaussförmigen Messkurve (beispielhaft in Abbildung 3.7(b)) kann die Halbwertsbreite β_{mess} bestimmt werden.

Um aus der Halbwertsbreite auf die kristalline Perfektion der Schicht schließen zu können, müssen die verschiedenen Einflussfaktoren genauer betrachtet werden, die zu einer Verbreiterung der gemessenen Halbwertsbreite β_{mess} führen.[124]

$$\beta_{mess}^2 = \beta_{intr}^2 + \beta_{mono}^2 + \beta_{kip}^2 + \beta_{zerr}^2 + \beta_{dicke}^2 + \beta_{krümm}^2 \quad (3.6)$$

Da für den intrinsischen Beitrag der Rockingkurve meist $\beta_{intr} \leq 10$ arcsec gilt [124], kann dieser ebenso wie der spezifizierte Beitrag des asymmetrischen Monochromators $\beta_{mono} = 28,8$ arcsec [125] vernachlässigt werden.

3 Messmethoden

Bei den in dieser Arbeit verwendeten Schichtdicken kann zusätzlich die Verkrümmung der Probe zu $\beta_{krümm} \approx 0$ arcsec angenommen werden.

Der schichtdickenabhängige Beitrag kann mithilfe der Scherrer-Gleichung beschrieben werden.[126]

$$\beta_{dicke} = 2 \cdot \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \cdot \frac{\lambda}{d_{film} \cdot \cos \theta} \quad (3.7)$$

Speziell für dünne Schichten, wie sie in dieser Arbeit behandelt werden gilt die Näherung nach [127].

$$\beta_{dicke} = \frac{17090}{d_{film}} \quad (3.8)$$

Zusätzliche Verbreiterungen werden durch die Gitterverkipfung [124]

$$\beta_{kippp}^2 = 2\pi \ln 2 \cdot b^2 n_d \quad (3.9)$$

sowie die Gitterverzerrung [124]

$$\beta_{zerr}^2 = A_v b^2 n_d |\ln(2 \cdot 10^{-7} \text{ cm } \sqrt{n_d})| \tan^2 \theta \quad (3.10)$$

hervorgerufen. Hierbei ist b der Betrag des Burgersvektors und A_v ein vom Versetzungstyp abhängiger Vorfaktor. Für eine Rockingkurve um den (004)-Reflex dominiert der Effekt der Gitterverkipfung.[124] Das Verhältnis von β_{kippp}^2 zu β_{zerr}^2 beträgt für diesen Fall etwa 10:1 [128], so dass der Beitrag aus Gleichung 3.10 vernachlässigt werden kann. Mit diesen Vereinfachungen von Formel 3.6, lässt sich die Versetzungsdichte zu

$$n_d = \frac{\beta_{mess}^2 - \left(\frac{17090}{d_{film}}\right)^2}{2 \cdot 2\pi \cdot \ln 2 \cdot b^2}$$

bestimmen. Da das exakte Verhältnis der vorliegenden Versetzungstypen der Proben nicht zweifelsfrei bestimmt werden konnte, wurden die Versetzungsdichten für die Fälle von ausschließlich 60°-Versetzen bzw. 90° Versetzungen ($b_{60^\circ} = b_{90^\circ}$) berechnet.

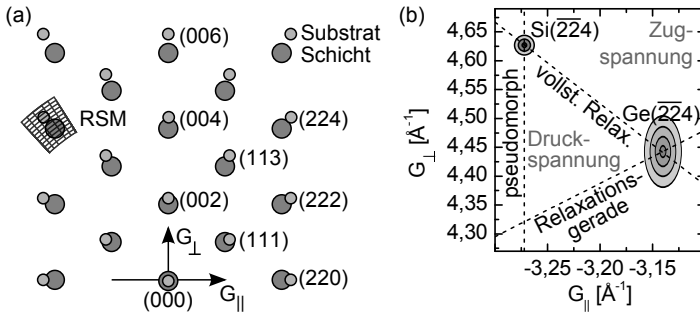


ABB. 3.8: Reziproke Gitterkarte. (a) Messrichtung im reziproken Raum am Beispiel von vollständig relaxiertem Germanium auf Si(001). (b) Schema für eine reziproke Gitterkarte von vollständig relaxiertem Germanium auf Si(001). Der Schichtreflex ist aufgrund der endlichen Schichtdicke verbreitert.

3.2.3 Reziproke Gitterkarten

Reziproke Gitterkarten (engl.: reciprocal space maps, RSM) sind zweidimensionale Diffraktogramme, die im einfachsten Fall durch sequentielle $\omega/2\theta$ -Messungen mit jeweils variiertem ω -Startwert entstehen. Die Messrichtung im reziproken Raum für den asymmetrischen $(\bar{2}\bar{2}4)$ -Reflex ist in Abbildung 3.8(b) dargestellt. Durch Messung um einen solchen asymmetrischen Reflex lassen sich sowohl in out-of-plane als auch in in-plane Richtung die Gitterkonstanten und somit der Relaxationsgrad bestimmen.

In Abbildung 3.8(b) ist schematisch eine reziproke Gitterkarte von vollständig relaxiertem Germanium auf Si(001) dargestellt. Der Germaniumreflex liegt auf dem Schnittpunkt der Ursprungsgeraden für vollständig relaxiertes Material mit der Relaxationsgeraden. Eine Änderung des Relaxationsgrads führt zu einer Änderung der Position des Germaniumreflexes entlang der Relaxationsgeraden, ausgehend von Pseudomorphie bis hin zu thermisch induzierter Zugspannung beim Abkühlen. Die Reflexbreite in G_{\perp} -Richtung ist aufgrund der endlichen Schichtdicke höher als beim Siliziumsubstrat. Des Weiteren können Verbreiterungen durch Inseln und Korngrenzen (G_{\parallel} -Richtung), Verspannungen (radial) sowie durch

3 Messmethoden

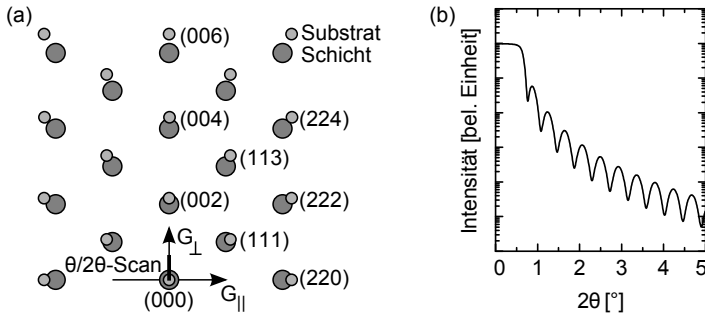


ABB. 3.9: Reflektometrie-Messung. (a) Messrichtung im reziproken Raum am Beispiel von vollständig relaxiertem Germanium auf Si(001). Es handelt sich um eine $\theta/2\theta$ -Messung mit $2\theta \leq 10^\circ$. (b) Simulierte $\theta/2\theta$ -Kurve für 20 nm vollständig relaxiertes Germanium auf Si(001).

Mosaizität und Verzwilligung (azimutal) hervorgerufen werden.[97]

In der Literatur sind die Darstellungen, insbesondere die verwendeten Achsenbeschriftungen für reziproke Gitterkarten nicht einheitlich. Aus diesem Grund soll hier kurz auf die in dieser Arbeit verwendeten Einheiten und Umrechnungen eingegangen werden. Für den Fall einer kubischen Einheitszelle berechnet sich die reziproke Gittereinheit zu $a^* = 2\pi/a$. Die Koordinaten der reziproken Gitterkarten lauten somit

$$G_{\parallel} = \frac{2\pi}{a} \cdot \sqrt{h^2 + k^2} \quad (3.11)$$

bzw.

$$G_{\perp} = \frac{2\pi}{a} \cdot l \quad (3.12)$$

und haben die Einheit $1/\text{\AA}$.

3.2.4 Reflektometrie

Röntgenreflektometrie (engl.: x-ray reflectivity, XRR) ermöglicht die einfache Bestimmung der Dicken von amorphen und kristallinen Filmen. Der flache Einfallswinkel θ (im Rahmen dieser Arbeit variiert von 0° bis

2,5°) führt zur Reflexion der Röntgenstrahlung an der Oberfläche sowie an inneren Grenzflächen. Hierfür ist lediglich ein Unterschied in der Brechzahl nötig, der bereits durch geringe Dichteunterschiede hervorgerufen werden kann.[97] Ausführliche Herleitungen zur Bestimmung der Schichtdicken sind in [129] zu finden. Die Dicke kann jedoch über das Verhältnis der Wellenlänge λ zur Differenz der Winkelpositionen der Oszillationsmaxima mit

$$d_{film} \approx \frac{\lambda}{2\Delta\theta} \quad (3.13)$$

abgeschätzt werden.[121]

Die Auswertung erfolgt über das Programm LEPTOS der Firma BRUKER durch Erzeugung eines Schichtmodells und einer zugehörigen Simulationskurve. Durch verschiedene Optimierungsalgorithmen wird die Simulationskurve der Messkurve angenähert und indirekt Parameter wie Schichtdicke und Rauheit bestimmt.

3.3 Rasterkraftmikroskopie

Rasterkraftmikroskopie (engl.: atomic force microscopy, AFM) ermöglicht die Untersuchung der Oberflächentopographie. Detaillierte Beschreibungen dieses Verfahrens sind in [130, 131, 132, 133, 134] zu finden. Eine Messspitze, die an einer Blattfeder (engl.: cantilever) befestigt ist, wird über die Probe gerastert und in Abhängigkeit der Probenoberfläche ausgelenkt. Ein Laserstrahl wird von der Blattfeder reflektiert und trifft auf einen Detektor (Abbildung 3.10(a)). Aus dem Auftreffpunkt lässt sich die Auslenkung des Cantilevers und somit die Topographie der Oberfläche bestimmen. Die maximale Auflösung wird allein durch die Messspitze bestimmt. Häufig wird in der Literatur eine vertikale Auflösung von 1 Å [132, 135] und eine laterale Auflösung von wenigen Nanometern [135] angegeben.

Im „contact“-Modus ist die Messspitze im direkten Kontakt zur Probenoberfläche. Dies kann sowohl durch eine konstante Höhe („constant height mode“) als auch durch das Konstanthalten der Kraft („constant force mode“) realisiert werden.[130] Es treten in diesem Modus nicht nur

3 Messmethoden

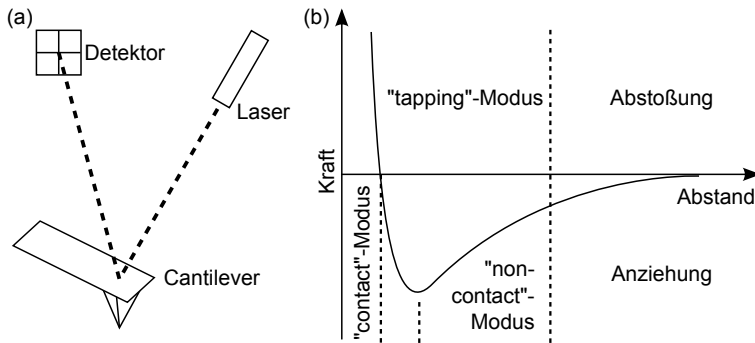


ABB. 3.10: Funktionsweise eines Rasterkraftmikroskops. (a) Schematische Darstellung nach [132]. Laserlicht fällt auf die Messspitze und wird je nach Verbiegung des Cantilevers auf unterschiedliche Positionen auf dem Detektor abgelenkt. (b) Resultierende Kraft auf den Cantilever und zugehörige Messmodi nach [130].

abstoßende van-der-Waals-Kräfte sowie die von der Spitze ausgeübte Kraft auf, sondern häufig auch Kapillarkräfte durch die auf der Probenoberfläche befindliche Feuchtigkeit.[130] Zusätzlich wirken laterale Kräfte, die durch Torsion des Cantilevers die Ablenkung verändern.[133] Dieser Modus bietet eine sehr hohe Auflösung bei gleichzeitig niedriger Messdauer.[132] Allerdings kann der direkte Kontakt sowohl die Oberfläche der Probe als auch der Messspitze verändern und sogar zerstören.[132]

Des Weiteren gibt es noch Betriebsmodi, in denen der Cantilever dynamisch angeregt wird. Im „non-contact“-Modus befindet sich die Messspitze einige Nanometer über der Probenoberfläche. Die anziehenden van-der-Waals-Kräfte beeinflussen während der Messung die Resonanzfrequenz des in Resonanzschwingung versetzten Cantilevers. Im „tapping“-Modus wird der Messabstand vom anziehenden bis in den abstoßenden Kraftbereich durchfahren.[132] Bei der Annäherung an die Oberfläche verringern die abstoßende Kräfte die Amplitude der in Resonanzschwingung versetzten Messspitze.[133] Hieraus kann indirekt auf die Oberflächentopographie geschlossen werden.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ausschließlich der „contact“-Modus

3.4 Transmissionselektronenmikroskopie

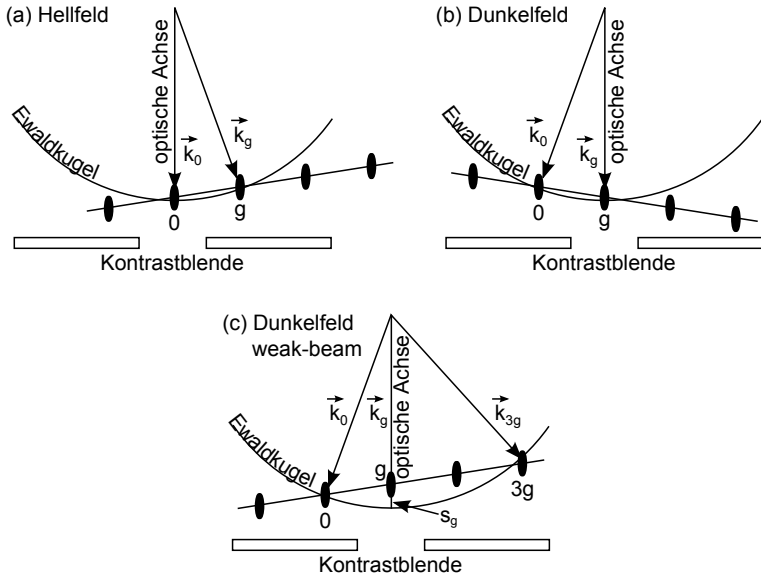


ABB. 3.11: Unterschiedliche TEM-Abbildungsbedingungen für kristalline Präparate nach [136]. (a) Hellfeldabbildungen werden unter Verwendung des ungebeugten Strahls erzeugt. (b) Für Dunkelfeldabbildungen im Zweistrahlfall wird der gebeugte Strahl eines definierten und auf der Ewaldkugel liegenden Reflexes verwendet. (c) Dunkelfeld unter weak-beam Bedingung liegt vor, wenn der zu betrachtende Reflex einen Abstand s_g zur Ewaldkugel aufweist.

verwendet. Die Messungen wurden an einem AUTOPROBE 5 von PARK SCIENTIFIC INSTRUMENTS durchgeführt.

3.4 Transmissionselektronenmikroskopie

Mithilfe der Transmissionselektronenmikroskopie (engl.: transmission electron microscopy, TEM) können strukturelle Untersuchungen, insbesondere die Analyse von Defekten, durchgeführt werden. Ausführliche Beschreibungen dieses Verfahrens sind z.B. in [137, 138, 139] zu finden.

3 Messmethoden

TEM-Untersuchungen können bei unterschiedlichen Abbildungsbedingungen durchgeführt werden, die in Abbildung 3.11 dargestellt sind und im Folgenden erläutert werden. *Hellfeldabbildungen* (Abbildung 3.11(a)) werden unter Verwendung des ungebeugten Strahls erzeugt. Sämtliche Störungen im Kristall führen zu einer Änderung der Beugungsbedingungen und somit zu Beugungscontrast.[136] Für *Dunkelfeldabbildungen* im Zweistrahlfall (Abbildung 3.11(b)) wird der gebeugte Strahl eines definierten Beugungsvektors \vec{g} verwendet, der exakt auf der Ewaldkugel liegen kann. Alle weiteren Reflexe liefern ebenso wie der ungebeugte Strahl keinen Beitrag zum resultierenden Beugungsbild.[136] Bei Dunkelfeldabbildungen unter *weak-beam* Bedingungen (Abbildung 3.11(c)) wird die Bragg-Bedingung erst für einen entfernten reziproken Gittervektor (hier: $3\vec{g}$) erfüllt.[136] Der für die Abbildung verwendete Beugungsvektor \vec{g} endet somit nicht direkt auf der Ewaldkugel, sondern weist einen Abstand s_g auf, der als Anregungsfehler bezeichnet wird, woraus eine geringere Anregung resultiert.[138] Diese Abbildungsbedingung ist besonders geeignet um Defekte wie Versetzungen mit hoher lateraler Auflösung zu untersuchen.[136]

Um Defekte analysieren zu können, müssen diese einen Beitrag zum Gesamtkontrast liefern. Dieser Beitrag ist jedoch von der Art des Defekts sowie den Abbildungsbedingungen abhängig. Das Unsichtbarkeitskriterium [137]

$$\vec{g} \cdot \vec{b} = 0 \quad (3.14)$$

besagt, dass Versetzungen nicht sichtbar sind, wenn ihr Burgersvektor senkrecht zum Beugungsvektor liegt. Allerdings kann weiterhin ein Kontrast auftreten, wenn die Bedingungen

$$\vec{g} \cdot \vec{b}_{stufe} = 0 \quad (3.15)$$

$$\vec{g} \cdot \vec{b} \times \vec{l} = 0 \quad (3.16)$$

nicht erfüllt sind.[138] Hierbei ist \vec{b}_{stufe} die Stufenkomponente des Burgersvektors und \vec{l} der Linienvektor der Versetzung. Vollständige Auslöschung kann somit nur für die Fälle von reinen Schrauben- bzw. Stufenversetzungen

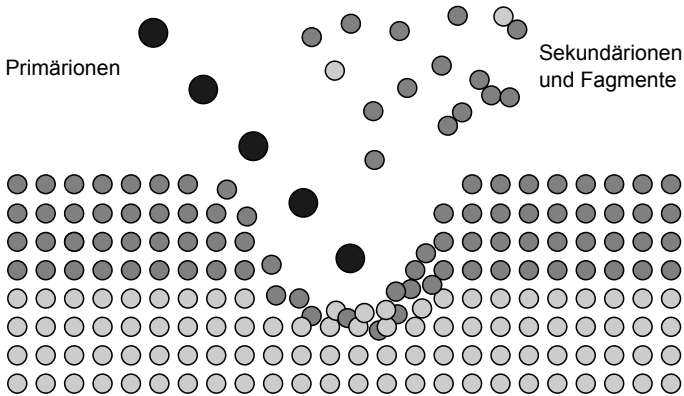


ABB. 3.12: Schema der Sekundärionenmassenspektroskopie. Durch Beschuss mit schweren Ionen werden ionisierte und ungeladene Teilchen und Fragmente aus der Probe ausgeschlagen und detektiert. Die Analyse erfolgt über die Auswertung des Masse-Ladungs-Verhältnisses.

gen auftreten, da nur hier die Erfüllung aller drei Kriterien möglich ist. Bei Schraubenversetzungen besitzt der Burgersvektor keine Stufenkomponente, so dass $\vec{b}_{stufe} = 0$ ist.[138] Weiterhin sind der Burgersvektor und der Linienvektor der Versetzung parallel, so dass $\vec{b} \times \vec{l} = 0$ gilt.[138] Das Vorhandensein von Kontrast ist somit nur von $\vec{g} \cdot \vec{b}$ abhängig. Für reine Stufenversetzungen gilt $\vec{b} = \vec{b}_{stufe}$, so dass Formel 3.14 und 3.15 identisch sind. Das Vorhandensein von Kontrast ist somit von $\vec{g} \cdot \vec{b}$ und $\vec{g} \cdot \vec{b} \times \vec{l}$ abhängig.[138]

Sämtliche TEM-Untersuchungen der in dieser Arbeit dargestellten Proben wurden von Dr. Eberhard Bugiel an den Mikroskopen JEOL JEM 2100, JEOL JEM 2010 sowie FEI TECNAI F20 (alle bei 200 keV betrieben) durchgeführt.

3.5 Sekundärionenmassenspektroskopie

Sekundärionenmassenspektroskopie (engl.: secondary ion mass spectroscopy, SIMS) ist eine besonders empfindliche Messmethode, mit der sämt-

3 Messmethoden

liche Elemente detektiert werden können. Dabei können Nachweisgrenzen von bis zu 10^{14} cm^{-3} bei einer Tiefenauflösung von 5 nm bis 10 nm erreicht werden.[134] Die bestmögliche Ortsauflösung beträgt etwa 50 nm.[140] Ausführliche Informationen zu diesem Verfahren sind in [130, 134, 140] zu finden.

Die Sekundärionen werden durch Beschuss der Probenoberfläche mit Primärionen (typischerweise Cs^+ , O_2^+ , O^- , Ar^+ [134]) erzeugt (Abbildung 3.12). Dabei kommt es nicht nur zur einfachen Ionisierung der Atome, sondern auch zur Erzeugung von mehrfach ionisierten Atomen und Clustern.[130] Die Analyse erfolgt über die Detektierung der Masse m sowie der Ladung q der generierten Sekundärionen (ungeladene Teilchen werden nicht detektiert). Hier liegt auch der große Nachteil dieser Methode, da das Masse-Ladungs-Verhältnis nicht immer eindeutig ist.[134] Des Weiteren kommt es beim Beschuss mit schweren Primärionen auch zu einer Materialanlagerung an den Kraterwänden sowie einer Verdrängung von Schichtmaterial in tiefere Regionen.

Alle in dieser Arbeit gezeigten SIMS-Untersuchungen wurden vom CTS FORSCHUNGSINSTITUT FÜR MIKROSENSORIK UND PHOTOVOLTAIK GMBH durchgeführt. Es handelt sich hierbei ausschließlich um dynamische SIMS-Untersuchungen, bei denen die entsprechenden Massen als Funktion der Zeit detektiert werden, so dass ein Tiefenprofil entsteht.[134] Da die Messausbeute eines Elements durch die chemische Zusammensetzung der Umgebung abhängt (Matrix-Effekt), kann die Zeitachse nicht linear in eine Tiefenachse skaliert werden.

Durch Umschaltzeiten bei der gleichzeitigen Messung verschiedener Elemente, sinkt für jedes einzelne Element die Auflösung. Aus diesem Grund wurden mehrere Messungen pro Probe durchgeführt.

Für undotierte Proben wurde zunächst eine Analyse der Silizium- und Germaniumverteilung durchgeführt. Anschließend wurde Kohlenstoff in einer weiteren Messung einzeln untersucht, um die nötige Auflösung zur Abbildung der Kohlenstoffdeltas zu erreichen. In beiden Fällen wurden Cäsiumprimärionen verwendet und die entstehenden negativen Sekundärionen detektiert.

3.5 Sekundärionenmassenspektroskopie

Dotierte Proben wurden durch drei SIMS-Profile analysiert:

1. Silizium, Germanium und Bor (Sauerstoffprimärionen, Detektierung von positiven Sekundärionen)
2. Kohlenstoff und Bor (Sauerstoffprimärionen, Detektierung von negativen Sekundärionen)
3. Kohlenstoff (Cäsiumprimärionen, Detektierung von negativen Sekundärionen)

Durch Zusammenführung dieser drei Messungen erhält man für alle Elemente eine Tiefenverteilung mit hoher Auflösung.

4 Probenpräparation

Dieses Kapitel soll zur Übersicht der Probenpräparation vor den eigentlichen Wachstumsexperimenten dienen. Hierfür werden die verwendeten MBE-Anlagen beschrieben, sowie auf die Reinigung und Ratenkalibrierung eingegangen.

4.1 MBE-Anlagen

Die Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie wurde in einer MBE-Anlage S1000 der Firma DCA INSTRUMENTS entwickelt (siehe Abbildung 4.1). Es handelt sich um ein UHV-Mehrkammersystem mit einer Wachstumskammer, einer Metallisierungskammer, einer Präparationskammer, einer Analyse-kammer sowie einer Schleusen-kammer, die alle über einen Zentralhandler verbunden sind. Die maximale Größe der zu prozessierenden Wafer beträgt 200 mm.

Das Pumpensystem der Wachstumskammer SGC1000 besteht aus einer Turbomolekularpumpe sowie einer Ionengetterpumpe. Die Kammerwände können zusätzlich durch flüssigen Stickstoff gekühlt werden, so dass ein Basisdruck von $p \approx 1 \cdot 10^{-10}$ mbar erreicht wird. Die Wachstumstemperatur kann über einen Strahlungsheizer auf über 900 °C eingestellt werden. Die Regelung erfolgt über die Kopplung mit einem Thermoelement. Als Materialquellen stehen eine Vielzahl von Verdampfern zur Verfügung. Im Folgenden wird nur auf die im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Materialien eingegangen. Silizium und Germanium stehen in Elektronenstrahlverdampfern der Firma TEMESCAL zur Verfügung. Bor wird über eine Hochtemperaturzelle der Firma DCA INSTRUMENTS verdampft, während Kohlenstoff über eine Sublimationsquelle SUKO-65 der Firma MBE KOMPONENTEN bereitgestellt wird. Mittels RHEED kann *in situ* das

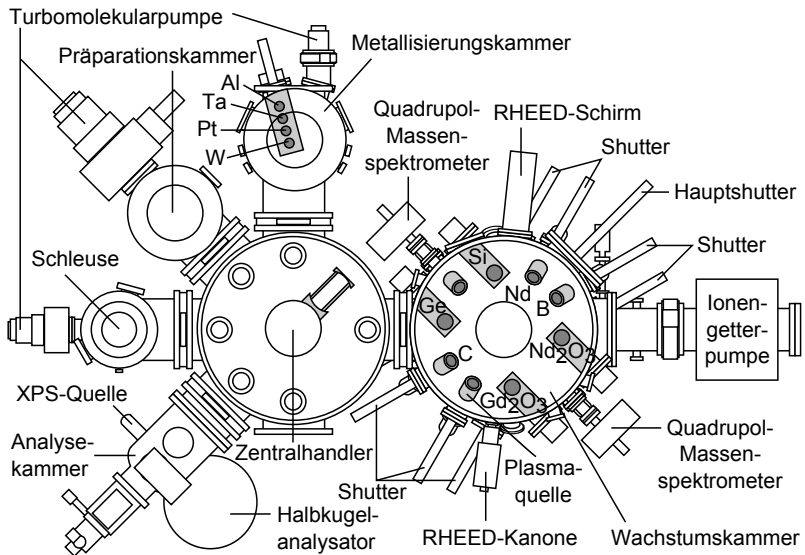


ABB. 4.1: Aufbau der DCA S1000. Es handelt sich um ein Mehrkammersystem für Substrate bis 200 mm

Wachstum kontrolliert werden. Es wird hierfür ein RHEED 35 System der Firma STAIB INSTRUMENTE verwendet.

Für weitere Analysen stehen Röntgenphotoelektronenspektroskopie sowie Ultraviolettphotoelektronenspektroskopie in der Analyse-kammer zur Verfügung. Die Präparationskammer eignet sich für Temperversuche bis über 900 °C, bei denen verschiedene Gasflüsse möglich sind. Im Rahmen dieser Arbeit wurden keine Metallisierungen durchgeführt, so dass hier auf einer Beschreibung der Metallisierungskammer verzichtet wird.

In der DCA S1000 hergestellte Proben werden in dieser Arbeit durch Buchstaben bezeichnet. Zusätzlich angefügte Zahlen zeigen die Zugehörigkeit zu einer bestimmten Probenserie, in der nur ein Parameter variiert wurde. Ein Übersicht aller Proben ist in Anhang A zu finden.

Alle mittels Surfactant-modifizierter Epitaxie gewachsenen Proben wurden in der VG 80 S MBE-Anlage hergestellt (siehe Abbildung 4.2). Es handelt

4 Probenpräparation

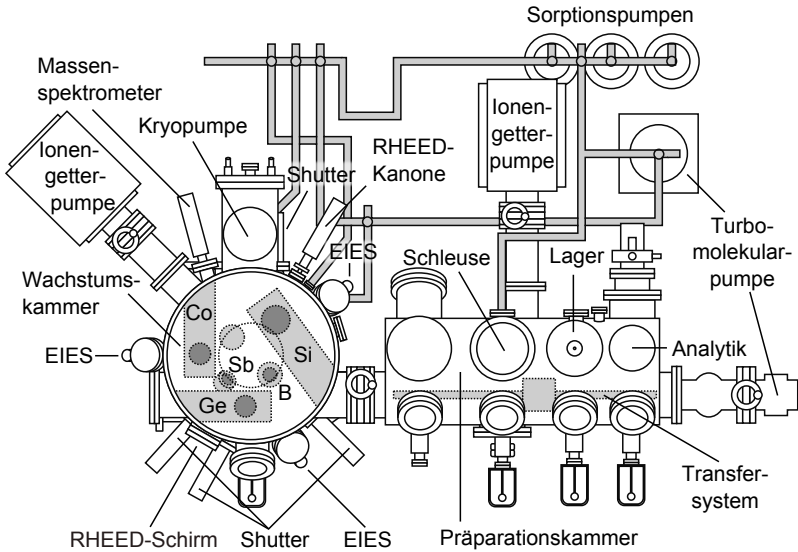


ABB. 4.2: Aufbau der VG 80 S. Es handelt sich um ein Mehrkammersystem für Substrate bis 150 mm

sich hierbei ebenfalls um ein Mehrkammersystem, bestehend aus Wachstums-kammer, Präparationskammer und Schleusen-kammer. Die maximale Größe der zu prozessierenden Wafer beträgt 150 mm. Das Pumpensystem besteht aus einer Kombination von Kryopumpe, Turbomolekular-pumpen, Ionengetterpumpen und Titansublimationspumpen. Durch eine zusätzliche Kühlung der Wachstums-kammerwände mit flüssigem Stickstoff, wird ein Basisdruck der Wachstums-kammer von $p < 10^{-10}$ mbar erreicht. Ein Strahlungs-heizer ermöglicht eine Wachstumstemperatur bis etwa 900 °C. Die Regelung erfolgt über die Kopplung mit einem PtRh/Pt-Thermoelement. Zusätzlich steht auch ein Infrarot-Pyrometer zur Temperaturbestimmung bereit. Als Materialquellen stehen Elektronenstrahlverdampfer der Firma TEMESCAL für Silizium und Germanium zur Verfügung. Diese werden über einen SENTINEL III von LEYBOLD INFI-CON geregelt, der mittels Elektronenstoß-Emissionsspektroskopie (EIES) die Menge abgeschiedenen Materials detektiert. Antimon wird in einer

Knudsenzelle der Firma VG SEMICON und Bor in einer Hochtemperaturzelle der Firma MBE KOMPONENTEN verdampft. Das Wachstum kann wiederum durch ein RHEED System der Firma STAIB INSTRUMENTE kontrolliert werden. In der Präparationskammer lassen sich auch weitere Charakterisierungen mittels Beugung niederenergetischer Elektronen an Oberflächen (LEED) durchführen.

In der VG 80 S hergestellte Proben werden mit SME# bezeichnet, wobei # der Schichtdicke in nm entspricht. Einige der in dieser Arbeit diskutierten SME-Proben wurden von M. Möllers im Rahmen seiner Studienarbeit[141] hergestellt.

4.2 Substrate

In dieser Arbeit wurden, mit Ausnahme von Kalibrierungen, ausschließlich (001)-orientierte 100 mm Siliziumsubstrate verwendet. Alle vorgestellten Untersuchungen des Wachstumsprozesses wurden auf Bor-dotierten Substraten mit einem spezifischen Widerstand von $\rho = 0,01 \Omega\text{cm}$ bis $\rho = 0,03 \Omega\text{cm}$ durchgeführt. Dies entspricht einer Ladungsträgerkonzentration von $2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ bis $8 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Untersuchungen zur Dotierung wurden auf Phosphor-dotierten Substraten mit einem spezifischen Widerstand von $\rho > 1000 \Omega\text{cm}$ durchgeführt. Dies entspricht einer Ladungsträgerkonzentration von $< 4 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$.

Die Verkippung δ_{kipp} wurde mittels Röntgendiffraktometriemessungen, wie sie in [142] ausführlich beschrieben sind, bestimmt. Durch insgesamt acht ω -Messungen entlang der zwei Hauptachsen (parallel und senkrecht zum Flat) durch Rotation des Probentellers sowie durch Drehung der Probe um 180° relativ zum Probenteller, lassen sich unter anderem Auflagefehler der Probe und Justagefehler des Halters ausschließen.

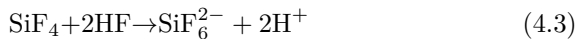
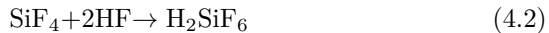
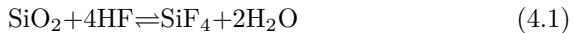
Alle in dieser Arbeit verwendeten Substrate haben eine gemessene maximale Verkippung von $\delta_{kipp} < 0,2^\circ$.

4.3 Reinigung

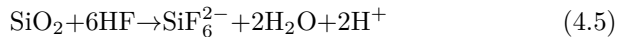
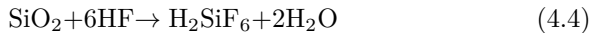
Sämtliche in dieser Arbeit prozessierten Wafer wurden zunächst chemisch gereinigt, bevor sie in die MBE-Anlagen eingeschleust wurden. Am Institut für Materialien und Bauelemente der Elektronik hat sich eine HF-Ozon-Reinigung mit abschließender Flusssäurebehandlung als Standard etabliert.[128] Anschließend wurde im Ultrahochvakuum bei hohen Temperaturen eine *in situ* Reinigung durchgeführt. Im Folgenden werden die einzelnen Reinigungsschritte näher erläutert.

4.3.1 HF-Ozon Reinigung

Der erste Reinigungsschritt umfasste die Behandlung der Substrate mit 0,175-prozentiger Flusssäure, um das natürliche Oxid von der Oberfläche zu entfernen. Dabei kommt es zunächst zur Bildung von Siliziumtetrafluorid (Formel 4.1) [143] und anschließend zur Bildung von Hexafluorokieselsäure (Formel 4.2) [143] bzw. Siliziumhexafluorid (Formel 4.3) [144], welches in HF gelöst wird [145].



Die Gesamtreaktion kann mit Formel 4.4 [146] bzw. Formel 4.5 [144] beschrieben werden.



Nach Entfernung des Oxids bilden sich SiH_2 und SiH Verbindungen an der Oberfläche und passivieren diese.[147]

Die Entfernung von Kohlenstoffverunreinigungen spielt eine sehr bedeutende Rolle, da sonst durch die Behandlung mit Flusssäure Si-CH_x Ver-

bindungen entstehen können, die im Ultrahochvakuum bei Temperaturen von 230 °C bis 430 °C durch Dehydrierung zur Bildung von SiC [148] führen können. Aus diesem Grund wurde im Anschluss eine zehnminütige UV-Ozon-Behandlung durchgeführt. Durch Bestrahlung mit UV-Licht in Sauerstoffatmosphäre können Silizium-Kohlenstoffverbindungen aufgebrochen und auch die Anzahl an Fluorverbindungen verringert werden.[149] Zusätzlich kommt es zur Entfernung der Wasserstoffterminierung durch Bildung von Wasser und gleichzeitiger Oxidation der frei werdenden Siliziumoberfläche.[150]

Dieses Oxid wird wiederum durch eine Behandlung mit 0,175-prozentiger Flusssäure entfernt. Trotz der hierbei entstehenden Wasserstoffterminierung kann nach einer Stunde die Oxidation der Oberfläche an Luft durch Bildung von $\text{SiH}_2(\text{O}_2)$ und $\text{SiH}(\text{O}_3)$ mittels Infrarotspektroskopie [147] nachgewiesen werden. Weitere Untersuchungen bestätigen, dass die Wasserstoffterminierung der Oberfläche an Luft zumindest 10 Minuten stabil ist.[151] Dennoch sollte die Zeit zwischen der HF-Behandlung und dem Einschleusen in die UHV Kammer möglichst gering sein. Nach Entfernung von Flusssäureresten durch Spülen mit deionisiertem Wasser (DI-Wasser, Reinstwasser) wurden die Proben im Rahmen dieser Arbeit typischerweise innerhalb von 30 bis 45 Sekunden in die Schleusenkommer eingeladen. Da die Reinigung der Proben, die in der VG 80 S prozessiert wurden, nicht unmittelbar neben der MBE-Anlage durchgeführt werden konnte, wurden die gereinigten Substrate in einem DI-Wasserbad transportiert und umgehend in die Schleusenkommer eingeladen.

4.3.2 *In situ* Reinigung

Nach dem Einschleusen wurde zunächst eine *in situ* Reinigung durchgeführt. Reinigungskonzepte, die mit einer Oxid-terminierten Oberfläche enden, benötigen eine Temperatur um 800 °C zur Desorption des Siliziumoxids.[152] SiH Verbindungen einer Wasserstoff-terminierten Oberfläche können bereits bei Temperaturen um 600 °C aufgebrochen werden.[148] Im Rahmen dieser Arbeit wurden die Substrate in der DCA S1000 für 10 Minuten bei 700 °C thermisch gereinigt, so dass ein Großteil des Was-

4 Probenpräparation

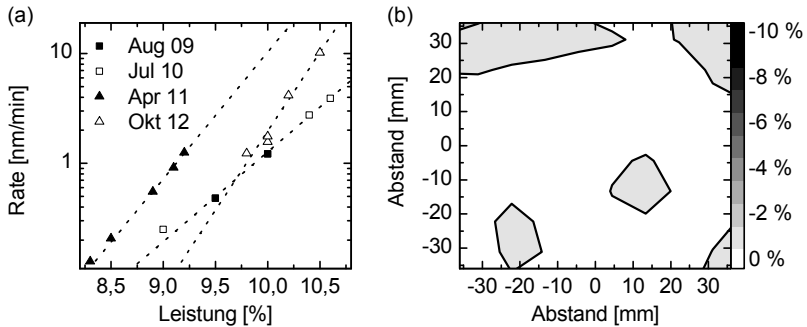


ABB. 4.3: (a) Ratenkalibrierung der Germaniumquelle. Die Raten wurden durch Röntgenreflektometriemessungen sowie spektrale Ellipsometrie bestimmt. (b) Homogenität der Germaniumrate. Durch Bestimmung der Schichtdicke mittels spektraler Ellipsometrie wurde die Homogenität der Germaniumrate über den Wafer bestimmt. Im Rahmen des Fehlers ist keine Abweichung der Rate über den Wafer zu erkennen.

serstoffs desorbiert. Im Anschluss wurde bei gleicher Temperatur für 10 Minuten Silizium mit einer Rate von 0,5 nm/min verdampft, um noch vorhandenen Sauerstoff durch die Bildung von flüchtigem SiO von der Oberfläche zu entfernen.[153] Hierbei wurde mit RHEED die Ausbildung der 7×7 Oberflächenrekonstruktion für Si(111) Wafer bzw. die 2×1 Oberflächenrekonstruktion für Si(001) Wafer kontrolliert.

Die *in situ* Reinigung in der VG 80 S unterscheidet sich in einigen Parametern [128]: Zunächst wurde das Substrat in mehreren Schritten auf 680 °C erhitzt. Anschließend wurde für 2 Minuten bei 680 °C Silizium mit einer Rate von 0,6 nm/min verdampft, bevor mit dem eigentlichen Wachstum begonnen wurde.

4.4 Kalibrierungen

Die für einen reproduzierbaren Wachstumsprozess nötigen Kalibrierungen der Verdampferraten werden im Folgenden vorgestellt.

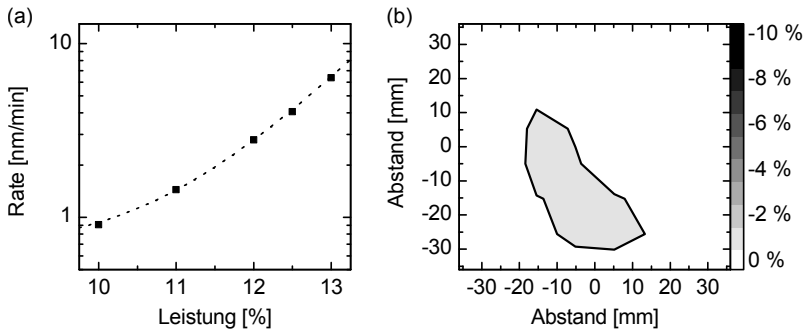


ABB. 4.4: (a) Ratenkalibrierung der Siliziumquelle. Die Raten wurden sowohl durch Röntgenreflektometriemessungen bestimmt als auch durch die Herstellung und Charakterisierung von $\text{Si}_{1-y}\text{C}_y$ -Schichten verifiziert. (b) Homogenität der Siliziumrate. Durch die Herstellung und Charakterisierung von $\text{Si}_{1-y}\text{C}_y$ -Schichten wurde die Homogenität der Siliziumrate über den Wafer bestimmt. Im Rahmen des Fehlers ist keine Abweichung der Rate über den Wafer zu erkennen.

4.4.1 Germaniumquelle

Die Germaniumrate wurde durch das Abscheiden einer amorphen Schicht auf Siliziumsubstraten bei Raumtemperatur und anschließender Dickenmessung durch Röntgenreflektometrie (Schichtdicken < 120 nm) bzw. spektraler Ellipsometrie (Schichtdicken > 120 nm) durchgeführt. Der Fehler, der durch die unterschiedlichen Dichten von amorphem und kristallinem Germanium hervorgerufen wird, beträgt hierbei etwa 3 % bis 7 %.[154]

Die ermittelten Germaniumraten sind in Abbildung 4.3 (a) dargestellt. Mittels spektraler Ellipsometrie wurde auch die Schichtdicken- und somit auch die Ratenhomogenität über den Wafer bestimmt. Wie in Abbildung 4.3 (b) zu sehen, ist im Rahmen des Messfehlers keine Abweichung der Germaniumrate zu erkennen.

4 Probenpräparation

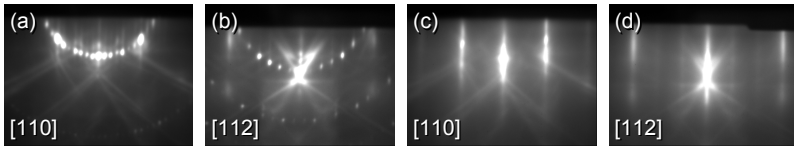


ABB. 4.5: Transformation der Oberflächenrekonstruktion durch Kohlenstoff. Die 7×7 Oberflächenrekonstruktion der gereinigten und präparierten Si(111) Oberfläche (a) in [110]-Richtung (b) und [112]-Richtung wird durch den Einbau einer Drittelmonolage Kohlenstoff in eine $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$ Oberflächenrekonstruktion umgewandelt. Bei dieser Umwandlung (c) verschwinden in [110]-Richtung die RHEED-Zwischenreflexe, (d) während in [112]-Richtung zusätzliche Reflexe erscheinen.

4.4.2 Siliziumquelle

Die Siliziumrate wurde durch das Abscheiden einer amorphen Siliziumschicht auf einer amorphen Germaniumschicht kalibriert und die resultierende Schichtdicke mittels Röntgenreflektometrie bestimmt. Die gemessene Siliziumrate ist in Abbildung 4.4(a) dargestellt. Zusätzlich wurde durch eine Vielzahl von Röntgendiffraktometriemessungen von $\text{Si}_{1-y}\text{C}_y$ -Schichten (siehe Kapitel 4.4.3) die Uniformität über den Wafer bestimmt. Die prozentuale Abweichung in Bezug auf die höchste ermittelte Rate ist in Abbildung 4.4 (b) dargestellt. Es ist zu erkennen, dass im Rahmen des Fehlers keine Abweichung der Schichtdicke und somit der Rate über den Wafer vorliegt.

4.4.3 Kohlenstoffquelle

Die Kalibrierung der Kohlenstoffraten kann auf verschiedene Arten durchgeführt werden. Die Menge des abgeschiedenen Kohlenstoffs kann durch eine Änderung der Oberflächenrekonstruktion von 7×7 zu $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$ eines Si(111) Wafers bestimmt werden. Für die vollständige Ausbildung einer $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$ Oberflächenrekonstruktion ist nominell eine Drittelmonolage Kohlenstoff nötig.[155] Es gibt jedoch auch Hinweise, dass die Oberflächenrekonstruktion erst nach einer Monolage vollständig ausgebil-

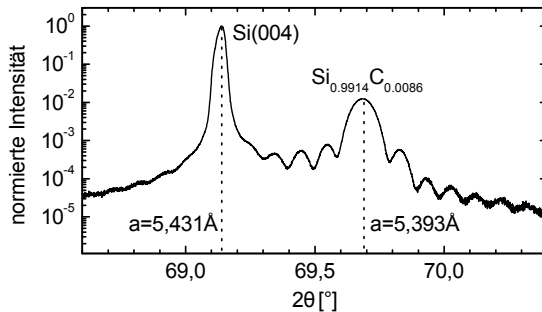


ABB. 4.6: Kohlenstoffeinbau in Silizium. Aus den Abständen der Schichtdickenszillationen um den Schichtreflex der durch Ko-Verdampfen erzeugten Si_{1-y}C_y-Schicht, wurde die Schichtdicke und somit die Siliziumrate bestimmt. Zusätzlich wurde aus der Position des Substratreflexes zunächst die Gitterkonstante und anschließend der Kohlenstoffgehalt bestimmt, um die Kohlenstoffrate zu ermitteln.

det ist.[156] Die in dieser Arbeit durchgeführten Kalibrierungen sind unter der Annahme entstanden, dass erst nach einer Monolage die $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$ Oberflächenrekonstruktion vollständig ausgebildet ist.

Zunächst wurde ein Si(111) Wafer wie in Kapitel 4.3 beschrieben gereinigt und präpariert. Die daraus resultierende 7×7 Oberflächenrekonstruktion in den Richtungen [110] und [112] ist in Abbildung 4.5 (a) und (b) dargestellt. Bei 550 °C Substrattemperatur wurde nun Kohlenstoff bei konstantem Filamentstrom verdampft, bis eine Umwandlung der Oberflächenrekonstruktion von 7×7 zu $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$ auftrat. Bei dieser Umwandlung verschwinden in [110]-Richtung die RHEED-Zwischenreflexe (Abbildung 4.5 (c)), während in [112]-Richtung zusätzliche Reflexe erscheinen (Abbildung 4.5 (d)). Die daraus resultierenden Kohlenstoffraten sind in Abbildung 4.7 dargestellt.

Eine andere Möglichkeit ist das gleichzeitige Verdampfen von Kohlenstoff und Silizium. Durch das Wachstum einer Si_{1-y}C_y-Schicht, kann die Menge des eingebauten Kohlenstoffs bestimmt werden. Durch Verwendung einer Si-Rate >3 nm/min bei einer Temperatur von 400 °C wird der Kohlenstoff zu etwa 80 % substitutionell eingebaut.[157] Der eingebaute Kohlenstoff

4 Probenpräparation

	y	$C_{11}(y)$ [dyn/cm ²]	$C_{12}(y)$ [dyn/cm ²]	$\frac{C_{12}}{C_{11}}$
Si	0	$1,66 \cdot 10^{12}$ [160]	$6,39 \cdot 10^{11}$ [160]	0,385
β -SiC	0,5	$3,52 \cdot 10^{12}$ [161]	$1,40 \cdot 10^{12}$ [161]	0,398
C (Diam.)	1	$10,79 \cdot 10^{12}$ [162]	$1,24 \cdot 10^{12}$ [162]	0,115

TAB. 4.1: Übersicht der elastischen Konstanten für reines Si, β -SiC und reinen C (Diamant)

wirkt sich direkt auf die Gitterkonstante der $\text{Si}_{1-y}\text{C}_y$ -Schicht aus, die mittels Röntgendiffraktometrie bestimmt werden kann.[158]

$$a_{\perp} = [a_{rel}(y) - a_{\parallel}] \cdot \left(1 + 2 \frac{C_{12}(y)}{C_{11}(y)}\right) + a_{\parallel} \quad (4.6)$$

Unter der Annahme, dass die Schicht bei Kohlenstoffkonzentrationen um bzw. unter 1 % pseudomorph bleibt, lässt sich diese Formel mit $a_{\parallel} = a_{Si}$ vereinfachen. Um den Kohlenstoffgehalt zu bestimmen, wird zusätzlich eine Funktion zur Beschreibung der konzentrationsabhängigen Gitterkonstante benötigt. Eine sehr gute Näherung ist

$$a_{rel}(y) = a_{Si} - 2,4239y + 0,5705y^2, \quad (4.7)$$

die auch die Abweichungen zur Vegard'schen Regel berücksichtigt.[159] Aus der daraus folgenden Gesamtgleichung kann die Kohlenstoffkonzentration bestimmt werden.

$$y = \frac{2,4239 - \sqrt{(2,4239)^2 + 4 \cdot 0,5705 \cdot \frac{a_{\perp} - a_{Si}}{1 + 2 \frac{C_{12}(y)}{C_{11}(y)}}}}{2 \cdot 0,5705} \quad (4.8)$$

Die zur Berechnung der Konzentration benötigten elastischen Konstanten sind selbst von der Konzentration abhängig. Für den Fall $y = 0$ ergeben sich die elastischen Konstanten von Silizium und für $y = 1$ gelten die elastischen Konstanten von Kohlenstoff (Diamant). Aufgrund der bereits erwähnten Abweichungen zur Vegard'schen Regel werden die

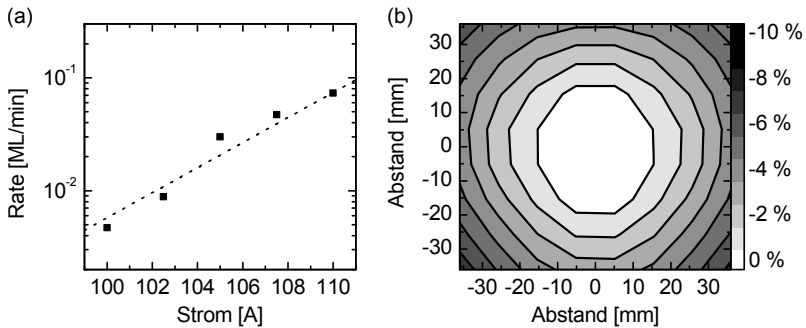


ABB. 4.7: (a) Ratenkalibrierung der Kohlenstoffquelle. Die Raten wurden sowohl aus der Änderung der Oberflächenrekonstruktion bestimmt, als auch durch die Herstellung und Charakterisierung von $\text{Si}_{1-y}\text{C}_y$ -Schichten verifiziert. (b) Homogenität der Kohlenstoffrate. Durch die Herstellung und Charakterisierung von $\text{Si}_{1-y}\text{C}_y$ -Schichten wurde die Homogenität der Kohlenstoffrate über den Wafer bestimmt. Die maximale Abweichung von Mitte zum Rand beträgt weniger als 10 %.

konzentrationsabhängigen elastischen Konstanten zwischen Si und β -SiC berechnet.

Die Literaturwerte sind in Tabelle 4.1 zusammengefasst. Für $y = 0,01$ lassen sich die elastischen Konstanten zu $C_{11}(0,01) = 1,70 \cdot 10^{12} \text{ dyn/cm}^2$ und $C_{12}(0,01) = 6,54 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$ berechnen, woraus $\frac{C_{12}}{C_{11}} = 0,385$ folgt. Der Unterschied der elastischen Konstanten im Bereich von $0 < y < 0,01$ ist somit vernachlässigbar, so dass auch ohne die exakte Kenntnis die Kohlenstoffkonzentration sehr genau bestimmt werden kann.

Eine hochauflösende XRD-Messung ist in Abbildung 4.6 dargestellt. Es ist deutlich ein Reflex der $\text{Si}_{1-y}\text{C}_y$ -Schicht zu erkennen. Aus der Position lässt sich die Gitterkonstante a_{\perp} und somit die Kohlenstoffkonzentration bestimmen. Aus den Schichtdickenoszillationen lässt sich zusätzlich mit der Prozesszeit die Siliziumrate ermitteln.

Die Kohlenstoffraten aus der Umwandlung der Oberflächenrekonstruktion konnten durch die Herstellung und Charakterisierung von $\text{Si}_{1-y}\text{C}_y$ -Schichten verifiziert werden. Diese Methode wurde auch verwendet, um die

4 Probenpräparation

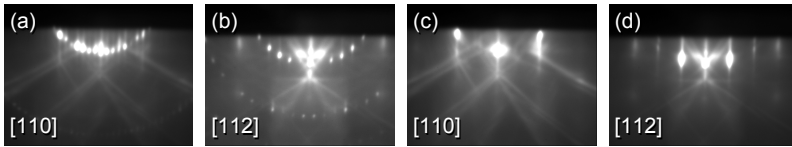


ABB. 4.8: Transformation der Oberflächenrekonstruktion durch Bor. Die 7×7 Oberflächenrekonstruktion der gereinigten und präparierten Si(111) Oberfläche (a) in [110] Richtung (b) und [112] Richtung wird durch den Einbau einer Drittelmonolage Bor in eine $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$ Oberflächenrekonstruktion umgewandelt. Bei dieser Umwandlung (c) verschwinden in [110]-Richtung die RHEED-Zwischenreflexe, (d) während in [112]-Richtung zusätzliche Reflexe erscheinen.

Homogenität der Rate über den Wafer zu analysieren. Hierfür wurde eine Vielzahl von hochaufgelösten Röntgendiffraktometrie-messungen, wie in Abbildung 4.6 dargestellt, für die gesamte Waferoberfläche durchgeführt.

Die prozentuale Abweichung in Bezug auf die höchste ermittelte Rate ist in Abbildung 4.7 (b) dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die maximale Abweichung von Mitte (höchste Rate) zum Rand (niedrigste Rate) weniger als 10 % beträgt. Aufgrund der uniformen Siliziumrate (vgl. Abbildung 4.4 (b)), ist diese geringe Schwankung allein auf die Kohlenstoffrate zurückzuführen. Da die Kohlenstoffrate bei konstantem Filamentstrom lediglich durch eine Änderung des Filamentquerschnitts beeinflusst wird, blieb die Kohlenstoffrate über Monate stabil.

4.4.4 Borquelle

Die Borrategie wurde zunächst ebenfalls über eine Umwandlung der Oberflächenrekonstruktion (vgl. Kapitel 4.4.3) bestimmt. Die Transformation der 7×7 Oberflächenrekonstruktion zur $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$ Oberflächenrekonstruktion ist in Abbildung 4.8 dargestellt. Zusätzlich wurden durch Ko-Verdampfen von Silizium und Bor dotierte Siliziumschichten mit einer Dicke von 300 nm hergestellt. Durch eine Vierspitzenmessung konnte die Dotierung bestimmt werden. Unter der Annahme, dass bei einer Wachstumstemperatur oberhalb von 500°C der substitutionell eingebau-

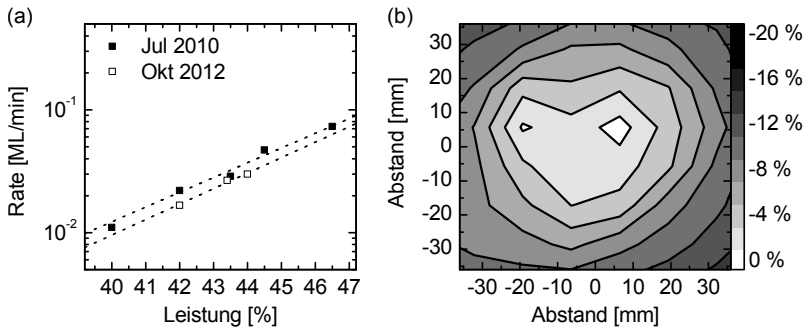


ABB. 4.9: (a) Ratenkalibrierung der Borquelle. Die Raten wurden sowohl aus der Änderung der Oberflächenrekonstruktion bestimmt als auch durch Vierspitzenmessungen dotierter Siliziumschichten mit bekannter Schichtdicke. (b) Homogenität der Borräte. Durch die Charakterisierung von Bor-dotierten Siliziumschichten durch Vierspitzenmessungen wurde die Homogenität der Borräte über den Wafer bestimmt. Die maximale Abweichung von Mitte zum Rand beträgt etwa 15 %.

te Bor-Anteil nahe 100 % ist, ließ sich hieraus die Borräte bestimmen. Die kalibrierten Borräten sind in Abbildung 4.9(a) dargestellt. Die Homogenität der Rate über den Wafer wurde ebenfalls durch Vierspitzenmessungen untersucht. Die sich hieraus ergebende Ratenverteilung ist in Abbildung 4.9(b) dargestellt. Die maximale Ratendifferenz von der Mitte (höchste Rate) zum Rand (niedrigste Rate) beträgt etwa 15 %.

4.4.5 Antimonquelle

Antimon steht nur an der VG 80 S zur Verfügung und wurde im Rahmen dieser Arbeit nur für Proben verwendet, die mittels Surfactant-modifizierter Epitaxie gewachsen wurden. Die Kalibrierung wurde ebenfalls über die Oberflächenrekonstruktion durchgeführt. Für die Umwandlung einer 7×7 -rekonstruierten in eine $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$ -rekonstruierte Si(111)-Oberfläche wird etwa eine Monolage Antimon benötigt.[163] Die Antimonrate wird über die Quelltemperatur gesteuert und ist in Abbildung 4.10 dargestellt. Für die Surfactant-modifizierte Epitaxie sollte eine Antimon-

4 Probenpräparation

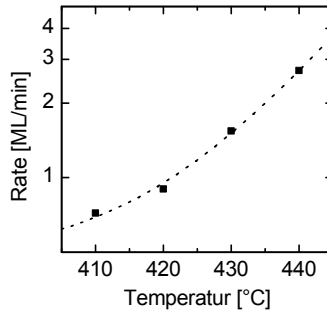


ABB. 4.10: Ratenkalibrierung der Antimonquelle. Die Raten wurden aus der Umwandlung einer 7×7 -rekonstruierten in eine $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30^\circ$ -rekonstruierte Si(111)-Oberfläche bestimmt.

rate verwendet werden, die eine möglichst vollständige Antimonbedeckung während des gesamten Wachstums gewährleistet, um glatte relaxierte Schichten herstellen zu können.[128]

4.4.6 Temperatur

Im Rahmen dieser Arbeit konnte keine Temperaturkalibration an der DCA S1000 durchgeführt werden, so dass auf eine bereits vorhandene Temperaturkalibration zurückgegriffen werden musste, die in Abbildung 4.11 dargestellt ist.

Durch Extrapolation der durch ein Pyrometer oberhalb von 500 °C bestimmten Substrattemperaturen lassen sich auch tiefere Temperaturen abschätzen. Allerdings ist aus der Literatur bekannt, dass in solchen Fällen Temperaturunterschiede von etwa ± 50 °C angenommen werden müssen.[164]

Zeitgleich zur Entstehung dieser Arbeit, wurde an der VG 80 S eine sehr genaue Temperaturkalibration des am Substratmanipulator befindlichen PtRh/Pt-Thermoelements mithilfe eines Pyrometers und eines auf einem Wafer befindlichen NiCr/Ni-Thermoelements durchgeführt, so dass der Temperaturfehler bei mittels Surfactant-modifizierter Epitaxie gewachsener Proben etwa ± 30 °C beträgt.

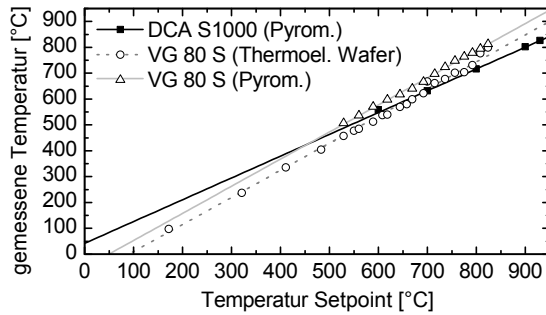


ABB. 4.11: Temperaturkalibrierungen der MBE-Anlagen. Zur DCA S1000 liegt nur eine Pyrometer-basierte Kalibration vor, die für tiefe Temperaturen extrapoliert wurde. Die VG 80 S wurde zusätzlich mit einem Thermoelement auf der Waferoberfläche kalibriert.

5 Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie

Im Folgenden wird der Wachstumsprozess dargestellt, der als Ausgangspunkt für weitere Optimierungen der Kohlenstoff-unterstützten Epitaxie (siehe Kapitel 6) dient. Einige Ergebnisse dieses Kapitels wurden parallel zur Entstehung dieser Dissertation in [165, 166] veröffentlicht.

Es handelt sich bei der Kohlenstoff-unterstützten Epitaxie zunächst um ein Mehrschrittverfahren, in dem Tieftemperaturepitaxie von Germanium mit anschließender Kohlenstoffbedeckung und Temperung kombiniert wird. Dieser Ablauf ist schematisch in Abbildung 5.1 dargestellt. Auf eine saubere (vgl. Kapitel 4.3) 2×1 rekonstruierte Si(001) Oberfläche wird zunächst eine 13 nm dicke Germaniumschicht mit einer Rate von 0,9 nm/min bei 50 °C gewachsen^a. Dieser Film wird mit 0,3 Monolagen

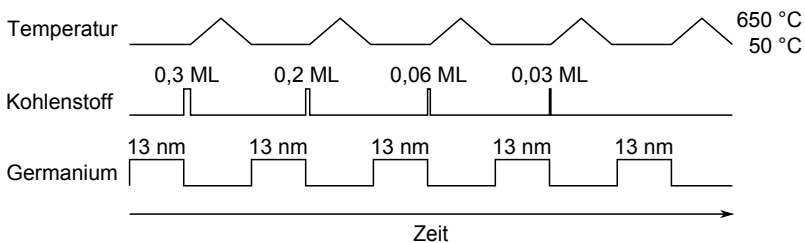


ABB. 5.1: Übersicht über den Wachstumsprozess. Die Wachstumssequenz besteht aus dem Wachstum von 13 nm Germanium bei 50 °C mit einer Rate von 0,9 nm/min, gefolgt von einer Kohlenstoffbeschichtung im Submonolagenbereich und anschließender Temperung bis 650 °C mit einer Rampe von 25 K/min. Nach dem Abkühlen auf 50 °C wird dieser Wachstumszyklus mehrfach wiederholt, jeweils mit reduzierter bzw. im letzten Zyklus ohne Kohlenstoffbedeckung.

^aWie spätere Ergebnisse in Kapitel 6 zeigen, liegen mit zunehmender Schichtdicke sowohl kristalline als auch amorphe Anteile vor

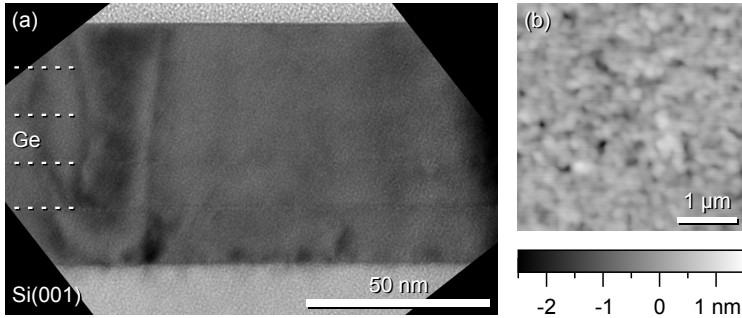


ABB. 5.2: (a) TEM-Aufnahme der Probe A1 im Querschnitt. Die Germaniumschicht ist einkristallin und besitzt eine glatte Oberfläche sowie eine scharfe Si/Ge-Grenzfläche. Es sind Kontraste erkennbar, die parallel zum Substrat verlaufen und dem Kohlenstoff zugeordnet werden können. Diese sind zur besseren Erkennung durch gestrichelte Linien gekennzeichnet. (b) Rasterkraftmikroskopieaufnahme. Die mittlere quadratische Rauheit der Oberfläche beträgt $r_{RMS} = 0,3 \text{ nm}$.

(ML) Kohlenstoff bei gleicher Temperatur beschichtet, bevor die Probe mit einer Rampe von 25 K/min auf 650 °C erhitzt wird. Nach dem erneuten Abkühlen auf 50 °C wird dieser Wachstumszyklus dreimal mit jeweils reduzierter Kohlenstoffbedeckung (0,2 ML, 0,06 ML, 0,03 ML) wiederholt. Im letzten Wachstumszyklus wird auf eine Kohlenstoffbeschichtung vollständig verzichtet.

Die Transmissionselektronenmikroskopieaufnahme in Abbildung 5.2(a) zeigt die Probe A1 im Querschnitt, die nach dem oben genannten Verfahren hergestellt wurde. Die Germaniumschicht ist einkristallin und besitzt eine glatte Oberfläche sowie eine scharfe Si/Ge-Grenzfläche. Es sind Kontraste erkennbar, die parallel zum Substrat verlaufen und dem Kohlenstoff zugeordnet werden können. Diese sind zur Veranschaulichung durch gestrichelte Linien gekennzeichnet. Dies belegt, dass der Kohlenstoff hauptsächlich lokalisiert vorliegt und nicht gleichmäßig in die Schicht eingebaut wurde. Die mittlere quadratische Rauheit der Oberfläche ist mit Hilfe von Rasterkraftmikroskopie (Abbildung 5.2(b)) zu $r_{RMS} = 0,3 \text{ nm}$ bestimmt worden.

5 Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie

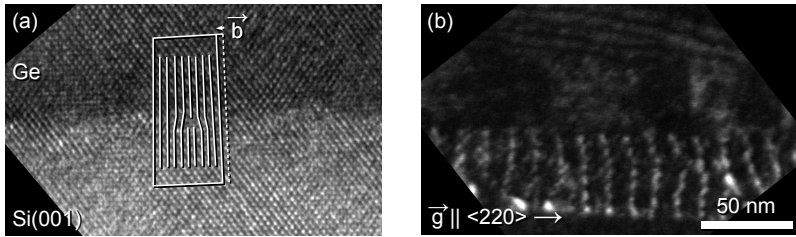


ABB. 5.3: TEM Aufnahmen der Si/Ge-Grenzfläche der Probe A1. (a) In Hochauflösung lassen sich vorliegende Versetzungen lokalisieren und durch ihren Burgersvektor identifizieren. Zur Veranschaulichung sind um eine Versetzung die Netzebenen sowie der Burgersumlauf und -vektor eingezeichnet. Es handelt sich hierbei um eine vollständige Stufenversetzung. (b) Abbildung des Versetzungsnetzwerks durch Kippung der Probe im Dunkelfeld unter weak-beam Bedingungen um 25° um die im Bild horizontale $[110]$ -Achse. Der Abstand der vollständigen Stufenversetzungen entspricht mit ca. 10 nm dem Wert für vollständige Relaxation über vollständige Stufenversetzungen.

Versetzungen können in hochauflösenden TEM-Aufnahmen im (110) -Pol der Si/Ge-Grenzfläche lokalisiert und durch ihren Burgersvektor identifiziert werden, wie es beispielhaft in Abbildung 5.3(a) gezeigt ist. Zur Veranschaulichung sind die Netzebenen sowie der Burgersumlauf um eine solche Versetzung eingezeichnet. Der resultierende Burgersvektor beträgt $\vec{b} = \frac{a}{2} \langle 110 \rangle$. Es handelt sich hierbei um eine vollständige Stufenversetzung. Dies ist gleichzeitig der dominierende Versetzungstyp.

Abbildung 5.3(b) zeigt eine Projektion der Si/Ge-Grenzfläche im Dunkelfeld, die durch Kippung der Probe um 25° um die im Bild horizontale $[110]$ -Achse erzeugt wird. Weak-beam Bedingungen ermöglichen das Abbilden von parallelen Versetzungen entlang der $[\bar{1}10]$ -Richtung. Auch in der senkrecht dazu verlaufenden $[110]$ -Richtung liegen solche Versetzungen vor.

Aufgrund des Unsichtbarkeitskriteriums (vgl. Kapitel 3.4) lässt sich jeweils nur eine Reihe von Versetzungen abbilden. Der Abstand zwischen diesen Versetzungen beträgt ca. 10 nm. Dies entspricht im Rahmen der Messgenauigkeit dem für vollständige Relaxation über vollständige Stufenversetzungen.

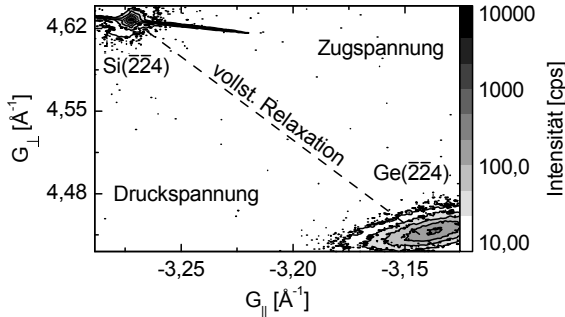


ABB. 5.4: Reziproke Gitterkarte der $(\bar{2}24)$ -Reflexe von Silizium und Germanium der Probe A1. Die Schicht ist aufgrund der thermischen Ausdehnung unter Zugspannung. Die Gitterkonstanten lassen sich zu $a_{\parallel} = 5,668 \text{ \AA}$ und $a_{\perp} = 5,651 \text{ \AA}$ bestimmen, woraus sich eine Restverzerrung von $\epsilon_{\parallel} = (-1,8 \pm 0,1) \cdot 10^{-3}$ ergibt, die in guter Näherung dem Wert für eine Temperaturdifferenz von 625 K entspricht.

fenversetzungen zu erwartenden theoretischen Wert von 9,6 nm (vgl. Kapitel 2.3).

Um die Defektdichte zu bestimmen wurden ω -Scans durchgeführt. Die gemessene Halbwertsbreite beträgt $\beta_{mess} = 914 \text{ arcsec}$, woraus sich eine Defektdichte, wie in Kapitel 3.2.2 beschrieben, von $n_D = (4 \pm 2) \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ berechnen lässt. Durch TEM-Untersuchungen der Probe A1 in der Draufsicht lässt sich die Anzahl der Durchstoßversetzungen an der Oberfläche abschätzen. Die Anzahl liegt mit $n_{TD} = 1 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ deutlich über der mit Röntgendiffraktometrie bestimmten Defektdichte.

Der Relaxationsgrad des gesamten Schichtstapels ist mit Hilfe von Röntgenbeugung bestimmt worden. Hierfür wurde eine reziproke Gitterkarte der $(\bar{2}24)$ -Reflexe von Silizium und Germanium aufgenommen und analysiert (Abbildung 5.4). Es ist zu erkennen, dass sich die Schicht unter Zugspannung befindet. Dies lässt sich durch die unterschiedliche thermische Ausdehnung von Si und Ge erklären. Die in-plane Gitterkonstante beträgt $a_{\parallel} = 5,668 \text{ \AA}$ und die out-of-plane Gitterkonstante $a_{\perp} = 5,651 \text{ \AA}$. Dies entspricht einem Relaxationsgrad von $R^X = 104\% \pm 1\%$. Die daraus resultierende Restverzerrung von $\epsilon_{\parallel} = (-1,8 \pm 0,1) \cdot 10^{-3}$ entspricht in

5 Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie

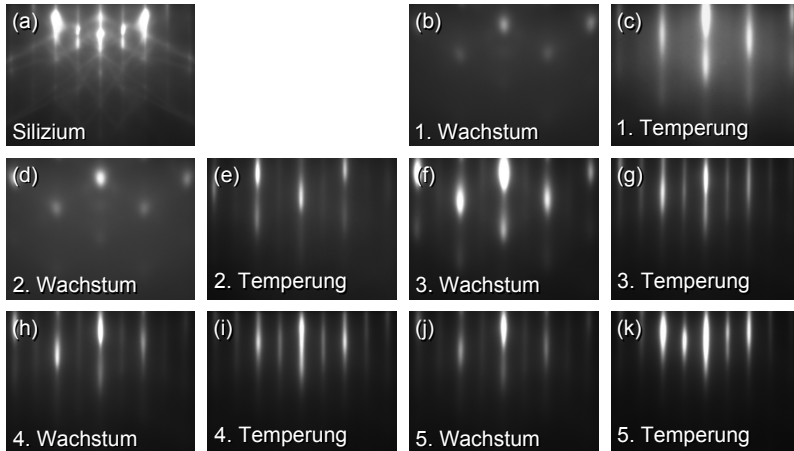


ABB. 5.5: RHEED-Analyse der Relaxation der Probe A1 in $[110]$ -Richtung. (a) Saubere 2×1 rekonstruierte Si(001)-Oberfläche, die als Referenz für die Auswertung der RHEED-Abstände dient. (b) Umwandlung der dreidimensionalen Oberfläche nach dem ersten Ge-Wachstum in (c) eine eher zweidimensionale Oberfläche nach der Temperung. (d),(e) Wiederholung dieser Prozesse im zweiten Wachstumszyklus. (f) Überlagerung von Punkt- und Strichmuster nach dem dritten Wachstum bestätigt die Existenz glatter Bereiche. (g) Nach der Temperung liegt bereits eine ausgeprägte 2×1 rekonstruierte Oberfläche vor. Diese Rekonstruktion wird mit dem vierten (h),(i) und fünften (j),(k) Wachstumszyklus immer perfekter.

guter Näherung dem theoretischen Wert für eine Temperaturdifferenz von 625 K (siehe Kapitel 3.2.3), so dass sich ein von der thermischen Ausdehnung korrigierter Relaxationsgrad bei der höchsten Prozesstemperatur von $R^* = 100\% \pm 1\%$ ergibt und somit vollständige Relaxation vorliegt. Da dieses Ergebnis mit den aus einer $\theta/2\theta$ -Messung bestimmten und nach Kapitel 3.2.1 berechneten Werten übereinstimmt, wurde im Folgenden aufgrund des deutlich höheren Messaufwands, bis auf wenige Ausnahmen, auf reziproke Gitterkarten verzichtet.

Eine genauere Analyse des Relaxationsvorgangs wurde mit Hilfe von RHEED-Untersuchungen (Filamentstrom 1,6 A, Beschleunigungsspan-

nung 18,5 eV) durchgeführt. Der Einfallswinkel beträgt etwa 4° . Das angewendete Verfahren zur Auswertung der RHEED-Bilder ist in Kapitel 3.1 beschrieben. Abbildung 5.5 zeigt die Entwicklung des RHEED-Musters in $[110]$ -Richtung im Verlauf des Mehrschrittverfahrens der Probe A1. Sämtliche Bilder sind bei 50°C aufgenommen worden, um einen Einfluss des Substratheizers ausschließen zu können. Abbildung 5.5(a) zeigt die saubere 2×1 rekonstruierte Siliziumoberfläche, die als Referenz für die Auswertung der RHEED-Abstände dient. Nach dem ersten Wachstum von Ge (Abbildung 5.5(b)) deutet das Punktmuster auf eine dreidimensionale Germaniumoberfläche hin. Es handelt sich hierbei um Rauheiten und nicht um separate Inseln (vgl. Kapitel 6.2.2). Dieses Muster bleibt auch nach der Beschichtung mit Kohlenstoff unverändert. Nach der Temperung bis 650°C (Abbildung 5.5(c)) ist aus dem RHEED-Muster auf eine geglättete Oberfläche zu schließen. Das Entstehen einer rauen Germaniumoberfläche beim Wachstum und die Glättung bei anschließender Temperung wiederholt sich auch im zweiten Wachstumszyklus (Abbildung 5.5(d) und (e)). Nach dem dritten Wachstumszyklus (Abbildung 5.5(f)) bestätigt die Überlagerung eines Punkt- und Strichmusters die Existenz glatter Bereiche. Nach der Temperung (Abbildung 5.5(g)) liegt bereits eine ausgeprägte 2×1 rekonstruierte Oberfläche vor. Diese Rekonstruktion wird mit dem vierten (Abbildung 5.5(h) und (i)) und fünften Wachstumszyklus (Abbildung 5.5(j) und (k)) immer perfekter.

Die aus diesen Bildern bestimmten relativen Abstände und folglich die in-plane Gitterfehlpassung ist in Abbildung 5.6 für die Proben A1 und A2 dargestellt. Letztere wurde zunächst wie oben beschrieben hergestellt. Auf diesen Schichtstapel wurde zusätzlich bei 250°C weiter Ge gewachsen, so dass sich eine Gesamtschichtdicke von 155 nm ergibt. Da nach dem ersten Wachstumszyklus der relative Abstand der RHEED-Reflexe bereits etwa 3% beträgt, wobei die Hälfte allein durch das Ge-Wachstum der Schicht hervorgerufen wird, wurde der Einfluss der zunehmenden Schichtdicke in Kapitel 6.3 sowie der Einfluss der Temperung in Kapitel 6.2 genauer untersucht. Mit zunehmender Anzahl von Wachstumsschritten erhöht sich der relative Unterschied der RHEED-Reflexabstände und entspricht nach 3 bis 4 Prozesszyklen der vollständigen Relaxation von Germanium

5 Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie

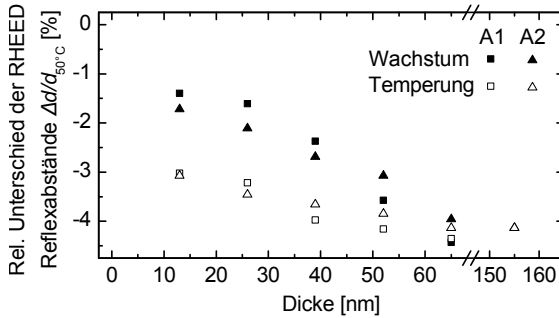


ABB. 5.6: Relative Unterschiede der RHEED-Reflexabstände im Mehrschrittverfahren der Proben A1 und A2. Mit zunehmender Anzahl von Wachstumsschritten erhöht sich der relative Unterschied der RHEED-Reflexabstände und entspricht nach 3 bis 4 Prozesszyklen der vollständigen Relaxation von Germanium auf Silizium. Die Messwerte nach dem Germaniumwachstum und nach der Temperung nähern sich erst mit zunehmender Zyklenzahl an. Nach dem zweiten Wachstum ist der relative Unterschied der RHEED-Reflexabstände zum Silizium zunächst wieder geringer, was einer zunehmenden Verspannung entspricht.

auf Silizium. Die Messwerte nach dem Germaniumwachstum und nach der Temperung nähern sich erst mit zunehmender Zyklenzahl an. Besonders auffällig ist, dass nach dem Wachstum der relative Unterschied der RHEED-Reflexabstände zum Silizium zunächst wieder geringer ist, als nach der vorhergehenden Temperung, was einer Annäherung der in-plane Gitterkonstante des Germaniums an die des Siliziums und somit zunehmender Verspannung entspricht. Dieser Effekt geht mit der Aufräumung der Oberfläche (vgl. Abbildung 5.5(d)) einher und ist abhängig von der deponierten Kohlenstoffmenge vor dem Wachstum. Dies ist in Kapitel 6.4 genauer betrachtet worden.

Weder die TEM- noch die Röntgenuntersuchungen geben einen Hinweis auf Interdiffusion von Silizium ins Germanium. Für eine Abschätzung der Diffusionslänge wurden die Temper- und Abkühlphasen des Prozesses durch ein Stufenprofil der Temperatur mit Stufenhöhen von 25 K und Dau-

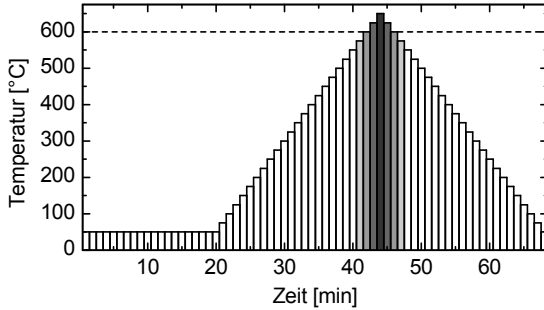


ABB. 5.7: Abschätzung der Diffusionslänge. Es wurden die Temper- und Abkühlphasen des Prozesses durch ein Stufenprofil der Temperatur mit Stufenhöhen von 25 K und Dauern von je 60 s abgebildet. Dies entspricht in guter Näherung der verwendeten Temperaturrampe. Aufgrund des exponentiellen Anstiegs der Diffusionskonstante mit der Temperatur, kann Diffusion unterhalb von 600 °C vernachlässigt werden.

ern von je 60 s angenähert, da dies die Temperaturkurve beim Tempern ausreichend genau abbildet. Die Abkühlphase wurde linear angenähert, was mit sinkender Temperatur jedoch nicht mehr der Fall ist. Allerdings kann aufgrund des exponentiellen Anstiegs der Diffusionskonstante mit der Temperatur die Diffusion bereits unterhalb von 600 °C vernachlässigt werden, so dass hier eine ausreichende Näherung vorliegt. Unter Verwendung von Literaturwerten des Vorfaktors^b $D_0 = 56600 \text{ cm}^2/\text{s}$ [111] und der Aktivierungsenergie^c $E_A = 4,0 \text{ eV}$ [111] lässt sich die Diffusionskonstante D berechnen. Mit $L = \sqrt{D \cdot t}$ ergibt sich hier eine Abschätzung der Diffusionslänge von $L = 0,6 \text{ nm}$.

Um dies zu überprüfen wurden Untersuchungen mit Sekundärionenmassenspektroskopie durchgeführt. Abbildung 5.8(a) zeigt die Silizium- bzw.

^bDer Vorfaktor D_0 ist nicht direkt in [111] angegeben, sondern wurde mit der Diffusionskonstante D und der Aktivierungsenergie E_A nach Formel 2.10 berechnet.

^cDie Aktivierungsenergie ist spannungsabhängig. Da sich allein durch die unterschiedlichen Schichtdicken die Spannungsverteilungen innerhalb der Proben dieser Arbeit von Proben in [111] unterscheiden, ist hier mit einem zusätzlichen Fehler zu rechnen.

5 Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie

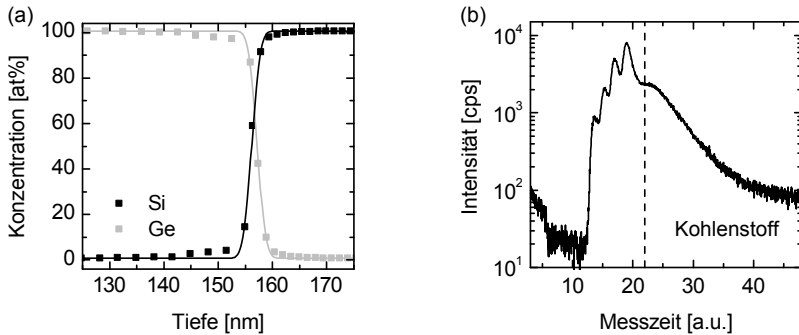


ABB. 5.8: SIMS-Untersuchungen der Vergleichsprobe A2. (a) Untersuchung der Interdiffusion von Silizium ins Germanium. Zusätzlich zu den Messwerten sind Simulationskurven des Verlaufs eingezeichnet. Die daraus bestimmte Diffusionskonstante von $D = 8,2 \cdot 10^{-18} \text{ cm}^2/\text{s}$ ist vergleichbar mit mittels Surfactant-modifizierter Epitaxie gewachsener Proben. (b) Untersuchung der Kohlenstoffsegregation. Vier äquidistante Maxima bestätigen, dass der Kohlenstoff nicht homogen verteilt, sondern lokalisiert an den Grenzflächen der Ge-Schichten vorliegt.

Germaniumkonzentration in Abhängigkeit von der Abtragtiefe der Probe A2. Der steile Übergang vom Germanium zum Silizium zeigt, dass wie erwartet keine starke Interdiffusion aufgetreten ist. Aus der Simulation des Kurvenverlaufs (vgl. Kapitel 2.5) lässt sich die Diffusionslänge für Silizium in Germanium zu $L = 0,86 \text{ nm}$ ermitteln. Je größer der verwendete Temperaturbereich ΔT und damit auch die Zeit t ist, desto kleiner wird die Diffusionskonstante. Für den dominierenden Temperaturbereich von $625 \text{ °C} \leq T \leq 650 \text{ °C}$ mit der Zeit $t = 900 \text{ s}$ lässt sich eine gemittelte Diffusionskonstante von $D = 8,2 \cdot 10^{-18} \text{ cm}^2/\text{s}$ bestimmen, die vergleichbar zu den Diffusionskonstanten von mittels Surfactant-modifizierter Epitaxie gewachsener Proben ist.[128]

Die Lokalisierung des Kohlenstoffs wurde ebenfalls mit Hilfe der Sekundärionenmassenspektroskopie analysiert (Abbildung 5.8(b)). Aufgrund eines fehlenden Standards für Kohlenstoff in Germanium, ist in diesem Fall die Intensität als reine Zählrate über dem Schichtabtrag dargestellt.

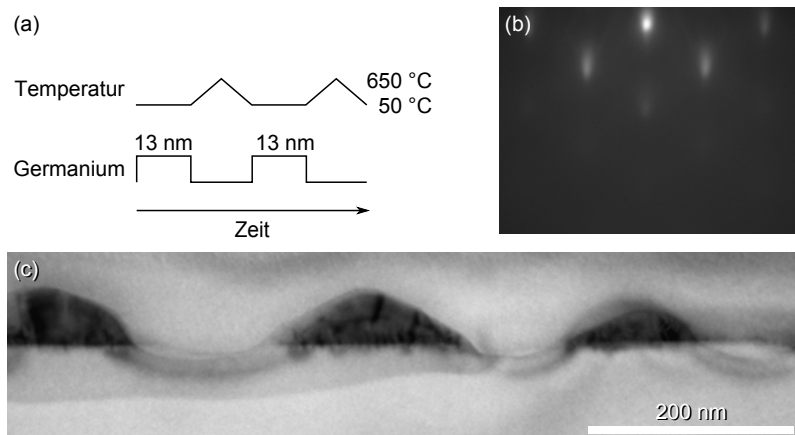


ABB. 5.9: Untersuchung des zyklischen Wachstums ohne Kohlenstoff (Probe B). (a) Schema des Wachstumsprozesses. (b) Bereits nach dem zweiten Wachstumszyklus ist im RHEED ein sehr stark ausgeprägtes Punktmuster zu erkennen. (c) Die TEM-Aufnahme im Querschnitt zeigt eine nicht geschlossene Schicht mit einer stark facettierten Oberfläche. Zwischen den Inseln bilden sich Vertiefungen durch Eindiffusion von Silizium ins Germanium.

Durch die große Schichtdicke kann das durch Oberflächenkontaminationen hervorgerufene Kohlenstoffsignal deutlich vom in der Schicht befindlichen Kohlenstoff separiert werden. Es existieren vier äquidistante Maxima, deren Intensitätsverhältnisse den Verhältnissen der verdampften Kohlenstoffmengen entsprechen. Dies bestätigt das aus den TEM Untersuchungen gewonnene Ergebnis der Lokalisierung des Kohlenstoffs zwischen den Germaniumschichten.

Um zu überprüfen, ob nur ein einzelner Parameter, wie die Schichtdicke oder das zyklische Wachstum, entscheidend für die resultierenden glatten und vollständig relaxierten Germaniumschichten ist, wurden verschiedene Vergleichsexperimente durchgeführt. Zunächst wurden bei Probe B (Abbildung 5.9(a)) mehrere Wachstumszyklen vollständig ohne Kohlenstoff durchgeführt. Bereits nach dem zweiten Wachstumszyklus ist im RHEED

5 Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie

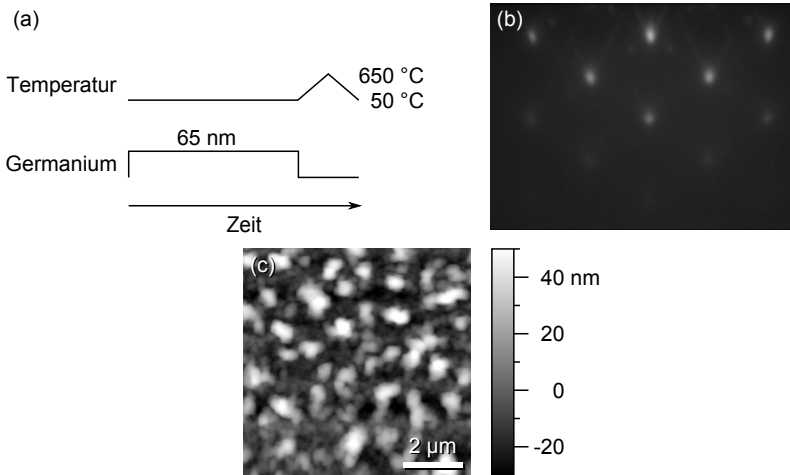


ABB. 5.10: Untersuchung des Wachstums einer dickeren Schicht ohne Kohlenstoff (Probe C). (a) Schema des Wachstumsprozesses. (b) Bereits beim Wachstum ist im RHEED ein sehr stark ausgeprägtes Punktmuster zu erkennen, was auf eine dreidimensionale Schicht hinweist. (c) AFM-Untersuchungen belegen, dass die Temperung zu keiner Glättung sondern zu ausgeprägter Inselbildung führt.

ein sehr stark ausgeprägtes Punktmuster (Abbildung 5.9(b)) zu erkennen, dass auf eine dreidimensionale Schicht hinweist. TEM Untersuchungen (Abbildung 5.9(c)) bestätigen, dass es sich um eine nicht geschlossene Schicht handelt. Der Bedeckungsgrad wurde aus TEM-Untersuchungen in der Aufsicht bestimmt und beträgt etwa 60 %. Die Oberfläche ist stark facettiert und in den Inseln liegt an der Grenzfläche ein Versetzungsnetzwerk vor. Zusätzlich kommt es zu starker Eindiffusion von Silizium von der Oberfläche in die Germaniuminseln, so dass sich zwischen ihnen Vertiefungen bilden.[167]

Gleiches gilt für Probe C, die das Wachstum von 65 nm Ge in nur einem Wachstumsschritt ohne Kohlenstoff umfasste (siehe Abbildung 5.10(a)). Bereits beim Wachstum ist im RHEED ein sehr stark ausgeprägtes Punktmuster zu erkennen, was auf eine dreidimensionale Schicht hinweist (Ab-

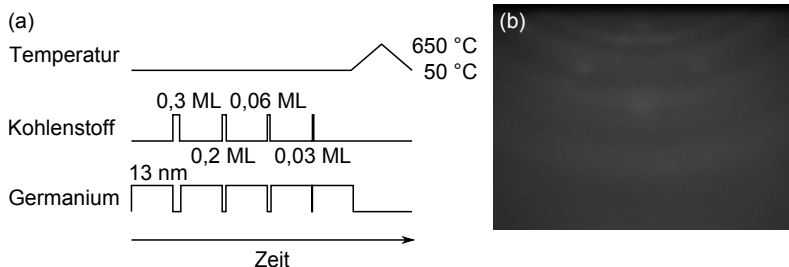


ABB. 5.11: Untersuchung des zyklischen Wachstums mit einer einzelnen Temperatur (Probe D). (a) Schema des Wachstumsprozesses. (b) Wachstum schlägt beim zweiten Zyklus in amorphe Beschichtung um. Beim Tempern verhindert die Kohlenstoffzwischen-schichten eine durchgehende Kristallisation, so dass eine polykristalline Schicht entsteht.

bildung 5.10(b)). Die Temperung führt zu keiner Glättung sondern zu ausgeprägter Inselbildung. Rasterkraftmikroskopieuntersuchungen zeigen, dass es sich um Inseln mit einer Höhe von bis zu 100 nm und einem Durchmesser von bis zu 200 nm bei einer Dichte von $1 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$ handelt (Abbildung 5.10(c)).

Probe D umfasste den selben Wechsel von Germaniumwachstum und Kohlenstoffbeschichtung wie die Ausgangsprobe A1, allerdings wurde erst zum Schluss ein einzelner Tempersschritt durchgeführt (Abbildung 5.11(a)). Bereits während des zweiten Prozesszyklus wuchs das Germanium nicht mehr kristallin sondern blieb amorph. Bei der Temperung kommt es zur Kristallisierung des Germaniums, wobei aufgrund der Kohlenstoffzwischen-schichten kein einkristalliner, sondern ein polykristalliner Germaniumfilm entsteht, was durch die Ringstruktur im RHEED zu erkennen ist.

6 Optimierung des Wachstumsprozesses

Der in Kapitel 5 vorgestellte mehrstufige Wachstumsprozess bietet eine Reihe von Optimierungsmöglichkeiten. Die Hauptparameter, die in dieser Arbeit detaillierter untersucht wurden, sind die Wachstumstemperatur, der Temperschnitt, die Schichtdicke sowie die Kohlenstoffbedeckung. Obwohl einige Effekte direkt miteinander verbunden sind, wird der Einfluss der einzelnen Parameter der Übersicht halber separat diskutiert.

Sollten zu den in diesem Kapitel vorgestellten Proben keine weiteren Angaben gemacht werden, wurden diese mit nur einem einzelnen Wachstumszyklus (Ge-Wachstum, Kohlenstoffbedeckung, Temperung) hergestellt.

6.1 Einfluss der Wachstumstemperatur

Es ist bekannt, dass die Wachstumstemperatur einen starken Einfluss auf die maximal mögliche epitaktische Schichtdicke hat.[168] Oberhalb dieser Schichtdicke kommt es aufgrund zunehmender Oberflächenrauheit zur Beschichtung mit amorphem Material.[168] Zusätzlich hat die Wachstumstemperatur einen direkten Einfluss auf die kritische Schichtdicke und das Einsetzen von Inselbildung (siehe Kapitel 2.2). Im Folgenden soll der geeignete Temperaturbereich der Kohlenstoff-unterstützten Epitaxie untersucht werden. Hierfür wurde eine Serie von Proben bei unterschiedlichen Wachstumstemperaturen hergestellt.

In Abbildung 6.1 sind die RHEED-Bilder der Germaniumfilme mit Schichtdicken von $20\text{nm} \pm 4\text{nm}$ für Wachstumstemperaturen von $40\text{ }^\circ\text{C}$ bis $400\text{ }^\circ\text{C}$ dargestellt. Es handelt sich hierbei um Aufnahmen in $[110]$ -Richtung direkt nach dem Germaniumwachstum. Eine Wachstumstemperatur von $40\text{ }^\circ\text{C}$ (Abbildung 6.1(a)) führt bereits nach weniger als zwei Monolagen zu einer Beschichtung mit amorphem Material, so dass sämtliche RHEED-Reflexe

6.1 Einfluss der Wachstumstemperatur

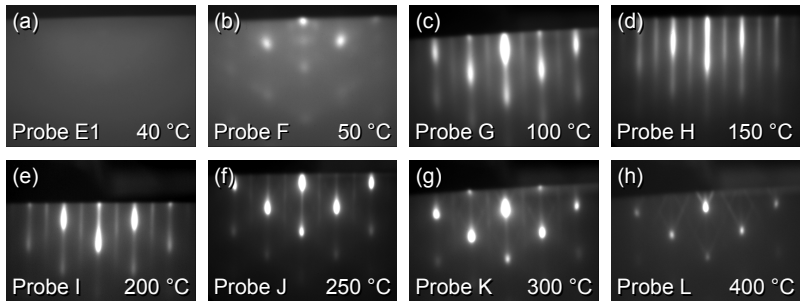


ABB. 6.1: RHEED-Untersuchung nach Germaniumwachstum ($20 \text{ nm} \pm 4 \text{ nm}$) bei unterschiedlichen Temperaturen. (a) Bei $40 \text{ }^\circ\text{C}$ verschwinden bereits nach wenigen Monolagen sämtliche RHEED-Reflexe, so dass hier amorphes Material vorliegt. (b) Ein Wachstum bei $50 \text{ }^\circ\text{C}$ hat eine Aufrauung der Oberfläche zur Folge. (c) Eine weitere Erhöhung der Wachstumstemperatur auf $100 \text{ }^\circ\text{C}$ verhindert die Aufrauung weitestgehend, was durch eine Überlagerung eines Punkt- und Strichmusters sichtbar wird. (d) Ab $150 \text{ }^\circ\text{C}$ Wachstumstemperatur bis (e) $200 \text{ }^\circ\text{C}$ bleibt die wachsende Schicht auch mit zunehmender Schichtdicke glatt. (f)-(h) Ab $250 \text{ }^\circ\text{C}$ schlägt das Wachstum sehr schnell in Inselbildung um.

verschwinden. Ein Wachstum bei $50 \text{ }^\circ\text{C}$ (Abbildung 6.1(b)) hat eine Aufrauung zur Folge. Das Verhältnis der Reflexintensitäten zur diffusen Hintergrundstreuung ist gering, was auf einen Anteil amorphen Materials an der Oberfläche deutet. Eine Erhöhung der Wachstumstemperatur auf $100 \text{ }^\circ\text{C}$ verhindert die Aufrauung während des Wachstums weitestgehend, was im RHEED durch eine überlagerte 2×1 Rekonstruktion sichtbar wird. Diese Oberflächenrekonstruktion ist auch für Wachstumstemperaturen von $150 \text{ }^\circ\text{C}$ bis $200 \text{ }^\circ\text{C}$ in unterschiedlich starker Ausprägung vorhanden. Erst ab $250 \text{ }^\circ\text{C}$ tritt zusätzlich zur noch sichtbaren 2×1 Rekonstruktion ein Punktmuster auf, das auf eine Aufrauung der Oberfläche schließen lässt, die ab Wachstumstemperaturen von $300 \text{ }^\circ\text{C}$ zu einer facettierten Oberfläche durch Inselbildung führt. Diese Inselbildung nimmt mit steigender Temperatur zu, was im Beugungsbild der bei $400 \text{ }^\circ\text{C}$ gewachsenen Probe durch das stark ausgeprägte Punktmuster verdeutlicht wird.

6 Optimierung des Wachstumsprozesses

Bei einer Wachstumstemperatur von 40 °C ist zu erwarten, dass bereits nach wenigen Monolagen kein kristallines Wachstum von Germanium auf Silizium mehr stattfindet. Eine Extrapolation der in [168] dargestellten Arrhenius-Beziehung prognostiziert mit 2 Å kristallinen Materials einen Wert, der in guter Näherung mit dem durchgeführten Experiment übereinstimmt.

Für eine höhere Wachstumstemperatur von 50 °C und einer Wachstumsrate von 1,2 nm/min beträgt die maximale epitaktische Schichtdicke 4 Å bei 50 °C.[168]^a Aus den RHEED Untersuchungen folgt, dass in dieser Arbeit Schichtdicken von etwa 35 nm bei 50 °C gewachsen werden konnten, die noch kristalline Oberflächenbereiche aufweisen. Mit steigender Schichtdicke kommt es zu elastischer Relaxation. Die zunehmende Aufrauung führt zur Ausbildung der amorphen Phase [169], was zu einer Erhöhung der diffusen Hintergrundstreuung führt. Das weiterhin sichtbare Punktmuster zeigt, dass nahe der Oberfläche jedoch auch noch kristalline Bereiche vorliegen. Die maximale epitaktische Schichtdicke ist somit schwer zu bestimmen, sie liegt jedoch deutlich über 4 Å. Diese Unterschiede im Vergleich zur Literatur sind unter anderem durch Temperaturfehler (± 30 °C in [168], ± 50 °C in dieser Arbeit, vgl. Kapitel 4.4.6) sowie die unterschiedlichen verwendeten Raten zu erklären.

Bei Temperaturen von etwa 150 °C ändert sich das Beugungsbild während des Wachstums des etwa 20 nm dicken Germaniumfilms nicht, so dass hier durchgängig zweidimensionales Wachstum vorliegt. Ähnliches wird auch in [168] für Temperaturen um 200 °C berichtet. Darüber nimmt mit steigender Temperatur die Rauheit zu (200 °C bis 250 °C) und schlägt ab 300 °C in Inselbildung um, die irreversibel ist, wie im folgenden Kapitel 6.2 gezeigt wird. Für die Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie kommen somit nur Temperaturen unterhalb von 300 °C in Frage.

^aDie angegebenen Werte beziehen sich explizit auf Abbildung 2a auf Seite 2277 der genannten Quelle. Der in [168] angegebene Zahlenwert für 50 °C entspricht mit 30 Å nicht den in Abbildung 2a dargestellten Messwerten und der daraus resultierenden Arrhenius-Beziehung.

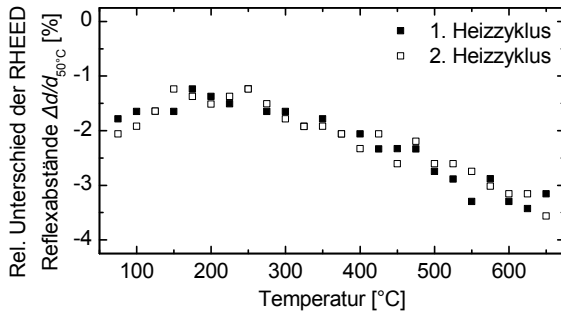


ABB. 6.2: Einfluss der Temperung auf RHEED-Abstände. Die Änderungen der RHEED-Abstände beim Tempern eines Si-Puffers sind für mehrere aufeinanderfolgende Heizzyklen bestimmt worden. Exemplarisch sind hier die ersten beiden Zyklen dargestellt, da die Häufigkeit des Heizprozesses keinen Einfluss auf den Verlauf hat.

6.2 Einfluss der Temperung

Um eine Untersuchung der Relaxation während der Temperung mit RHEED durchführen zu können, musste im Vorfeld der Einfluss des Heizvorgangs auf die Messergebnisse bestimmt werden. Hierfür wurde zunächst auf ein sauberes Si(001)-Substrat ein 10 nm dicker Si-Puffer gewachsen, um eine möglichst perfekte 2×1 rekonstruierte Oberfläche zu erhalten. Im Anschluss wurde mehrfach der Heizprozess von 50 °C auf 650 °C mit einer Rampe von 25 K/min durchfahren. Aus den RHEED-Bildern wurden wiederum wie in Kapitel 3.1 die Änderungen der Reflexabstände analysiert. In Abbildung 6.2 sind exemplarisch der erste und zweite Heizvorgang dargestellt, da die Häufigkeit des Heizprozesses keinen Einfluss auf das Ergebnis hat. Es ist zu erkennen, dass der Heizvorgang die Reflexabstände massiv verändert und bereits das Einschalten des Heizers eine Verringerung um etwa 2 % bewirkt. Sämtliche im Folgenden vorgestellten Ergebnisse wurden mit dieser Korrekturkurve vom Einfluss des Heizvorgangs bereinigt.

In Abbildung 6.3 sind die RHEED-Bilder der Germaniumfilme mit Dicken von $20 \text{ nm} \pm 4 \text{ nm}$, die mit 0,3 ML Kohlenstoff beschichtet und anschlie-

6 Optimierung des Wachstumsprozesses

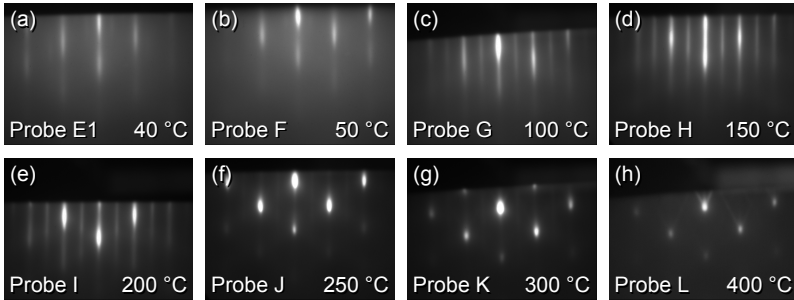


ABB. 6.3: RHEED-Untersuchung nach der Temperung der bei unterschiedlichen Temperaturen gewachsenen Proben. (a) Die bei 40 °C erzeugte amorphe Germaniumschicht kristallisiert bei der Temperung, ohne dass es zur Inselbildung kommt. (b) Die raue Oberfläche der bei 50 °C gewachsenen Schicht glättet sich während der Temperung. Die 2×1 rekonstruierte Oberfläche der bei (c) 100 °C, (d) 150 °C und (e) 200 °C gewachsenen Schichten wird mit der Temperung immer perfekter. Die bei Wachstumstemperaturen ab 250 °C (f)-(h) auftretende Inselbildung wird durch die Temperung noch ausgeprägter.

ßend bis 650 °C getempert und bis zur Wachstumstemperatur abgekühlt wurden, dargestellt (vgl. Abbildung 6.1 für RHEED-Bilder nach dem Ge-Wachstum). Die bei 40 °C erzeugte amorphe Germaniumschicht kristallisiert bei der Temperung, ohne dass es zur Inselbildung kommt (Abbildung 6.3(a)). Die raue Oberfläche der bei 50 °C gewachsenen Probe glättet sich während der Temperung (Abbildung 6.3(b)). Die bereits nach dem Wachstum 2×1 rekonstruierte Oberfläche der bei 100 °C, 150 °C und 200 °C gewachsenen Schichten wird mit der Temperung immer perfekter (Abbildung 6.3(c)-(e)). Die bei Wachstumstemperaturen ab 250 °C auftretenden Rauheiten werden durch die Temperung noch ausgeprägter (Abbildung 6.3(f)-(h)), so dass mit zunehmender Wachstumstemperatur keine geschlossenen Germaniumfilme mehr entstehen. Somit muss der in Kapitel 6.1 genannte Temperaturbereich auf Temperaturen unterhalb von 250 °C korrigiert werden.

Die Oberflächenmorphologie wurde zusätzlich mit Rasterkraftmikroskopie untersucht. Abbildung 6.4 zeigt die AFM-Aufnahmen der bei unterschied-

6.2 Einfluss der Temperung

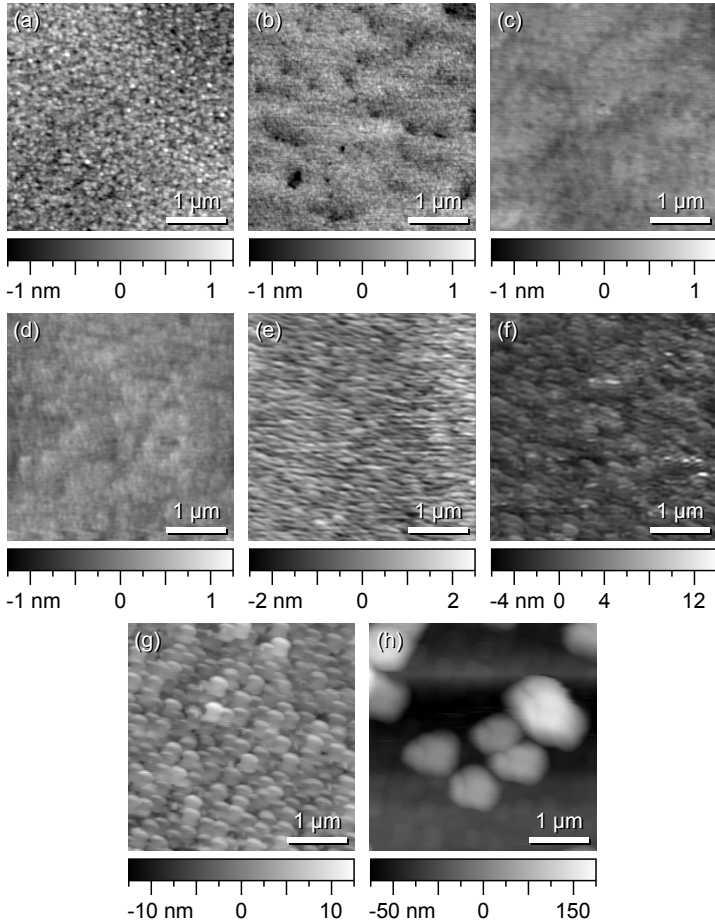


ABB. 6.4: AFM-Untersuchung nach der Temperung der bei unterschiedlichen Temperaturen gewachsenen Proben. Die mittlere quadratische Rauheit der Oberfläche für Temperaturen von 40 °C bis 150 °C (a)-(d) beträgt $t_{RMS} < 0,5$ nm. Bei höheren Wachstumstemperaturen nimmt die Rauheit zu. Ab 300 °C (g) liegen Inseln vor.

lichen Temperaturen gewachsenen Proben. Die mittlere quadratische Rauheit der Oberfläche sinkt von $r_{RMS} = 0,4$ nm bei 40 °C (Abbildung 6.4(a)) über $r_{RMS} = 0,3$ nm bei 50 °C (Abbildung 6.4(b)) auf $r_{RMS} = 0,2$ nm bei 100 °C und 150 °C (Abbildung 6.4(c)-(d)). Bei höheren Wachstumstemperaturen nimmt die Rauheit wieder zu und steigt bei 200 °C auf $r_{RMS} = 0,6$ nm bzw. $r_{RMS} = 1,6$ nm bei 250 °C (Abbildung 6.4(e)-(f)). Bei 300 °C und 400 °C liegen Inseln vor, deren Größe auf Kosten der Inseldichte mit zunehmender Wachstumstemperatur steigt (Abbildung 6.4(g)-(h)).

Dies zeigt, dass es mit den gewählten Parametern drei mögliche Wege gibt, um geschlossene Germaniumschichten mit Kohlenstoff-unterstützter Epitaxie auf Si(001) zu erzeugen:

- Beschichtung bei 40 °C mit anschließender Temperung: Kristallisierung einer amorphen Ge-Schicht (Festphasenepitaxie) durch die Temperung
- Wachstum bei 50 °C mit anschließender Temperung: Glättung einer rauen aber überwiegend kristallinen Germaniumschicht durch die Temperung
- Wachstum bei 100 °C bis 200 °C mit anschließender Temperung: Glatte Germaniumschicht beim Wachstum und bei der Temperung. Aus den RHEED- und AFM-Untersuchungen geht hervor, dass 150 °C sich hierbei am besten eignet.

Diese unterschiedlichen Varianten der Kohlenstoff-unterstützten Epitaxie werden in den folgenden Abschnitten genauer analysiert.

6.2.1 Temperung nach Wachstum bei 40 °C

Wie in Kapitel 3.1 beschrieben, wurden während des Tempervorgangs die relativen Unterschiede der RHEED-Reflexabstände bestimmt und für eine 16 nm dicke Germaniumschicht (Probe E1, erster Wachstumszyklus) in Abbildung 6.5 dargestellt. Da bei einer Wachstumstemperatur von 40 °C bereits nach wenigen Monolagen eine amorphe Schicht erzeugt wird und dementsprechend keine RHEED-Reflexe erkennbar sind, kann

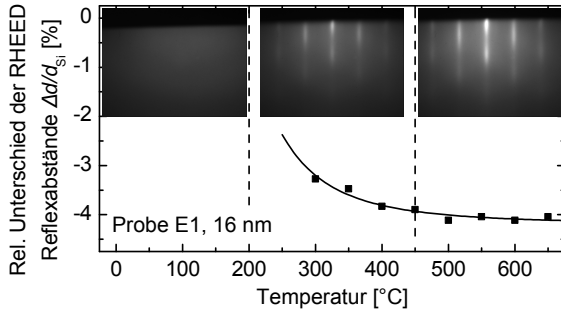


ABB. 6.5: Relative Unterschiede der RHEED-Reflexabstände im ersten Temperenschritt und zugehörige RHEED-Bilder bei einer Wachstumstemperatur von 40 °C (Probe E1). Oberhalb von 200 °C treten die ersten schwachen Reflexe im RHEED auf. Bis zu einer Temperatur von 450 °C tritt der Großteil der Relaxation auf. Oberhalb liegt vollständige Relaxation vor. Die Oberfläche bleibt während des gesamten Prozesses glatt.

bei Temperaturen bis 200 °C keine Analyse der Relaxation durchgeführt werden. Oberhalb von 200 °C treten die ersten RHEED-Reflexe auf, die ab 300 °C ausgewertet werden können. Ein Großteil der Relaxation findet bei Temperaturen bis 450 °C statt. Die Oberfläche bleibt bei dieser Kristallisation durchgehend glatt. Ein ähnliches Verhalten ist bereits von Surfactant-modifizierter Festphasenepitaxie bekannt, wobei der auf dem Film vorhandene Surfactant (in diesem Fall Arsen) die Oberflächendiffusion verringert und somit Inselbildung unterdrückt.[66]

Im Rahmen des Fehlers wird bereits bei Temperaturen oberhalb von 450 °C vollständige Relaxation erreicht. Der aus RHEED bei 650 °C bestimmte Relaxationsgrad beträgt $R_{40^{\circ}\text{C},650^{\circ}\text{C}}^R = 99\% \pm 12\%$. Aufgrund der Temperaturabhängigkeit der Versetzungsbildung und -ausbreitung [170] konnten durch eine Arrhenius-Beziehung der Restverzerrung mit

$$\varepsilon_{\parallel} = A \cdot e^{\frac{-E_A}{k_B \cdot T}}$$

unter der Verwendung der Boltzmann-Konstante k_B , der Temperatur

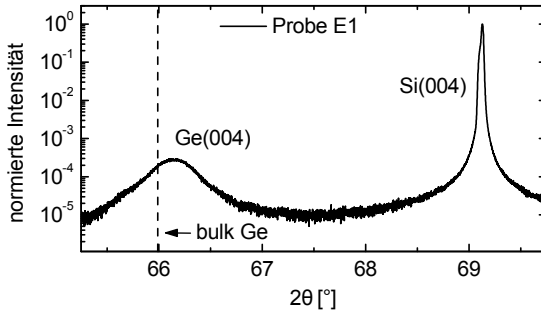


ABB. 6.6: Normierte hochauflösende $\theta/2\theta$ -Messung der (004)-Reflexe von Silizium und Germanium der Probe E1 nach der Temperung bis 650 °C. Der bei Raumtemperatur gemessene Relaxationsgrad beträgt $R_{40^\circ\text{C},650^\circ\text{C}}^X = 107\%$.

T [K], einer Konstanten A sowie der Beziehung $\varepsilon_{\parallel} = f - \Delta d/d_{Si}$ die Messwerte mit

$$-\frac{\Delta d}{d_{Si}} = A \cdot e^{\frac{-E_A}{k_B \cdot T}} - 0,0418 \quad (6.1)$$

angenähert werden. Die daraus ermittelte Aktivierungsenergie beträgt $E_A = 0,3$ eV. Dieser Wert scheint sehr niedrig, da in [168] bereits eine Aktivierungsenergie von $E_A = 0,5$ eV für die Erzeugung kristalliner Germaniumfilme ermittelt wurde. Dies wird in Kapitel 6.2.4 unter Berücksichtigung der Ergebnisse der anderen Wachstumstemperaturen ausführlicher diskutiert.

Eine hochauflösende $\theta/2\theta$ -Messung der (004)-Reflexe von Silizium und Germanium der Probe E1 nach zwei Wachstumszyklen mit je 16 nm und Temperung bis 650 °C zeigt einen symmetrischen Ge(004)-Reflex, der zu höheren Winkeln im Vergleich zu Germaniumvolumenmaterial verschoben ist. Während der Temperung wurde somit in Übereinstimmung mit den RHEED-Ergebnissen vollständige Relaxation erreicht und zusätzlich beim Abkühlen Zugspannung induziert. Dies erklärt jedoch nicht den bei Raumtemperatur gemessenen Relaxationsgrad von $R_{40^\circ\text{C},650^\circ\text{C}}^X = 107\% \pm 1\%$: Korrigiert man die Messung um die unterschiedlichen thermischen Aus-

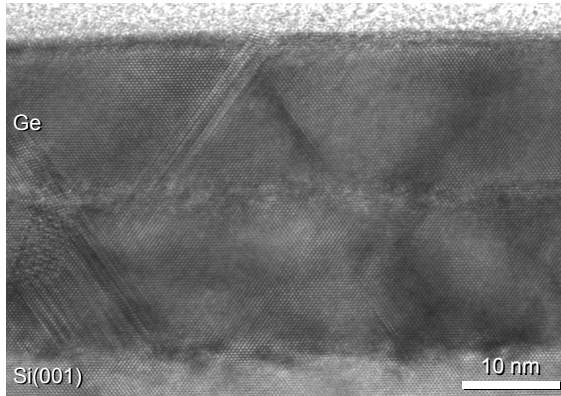


ABB. 6.7: Hochauflösende TEM-Aufnahme der Probe E1 im Querschnitt. Die Oberfläche des Germaniumfilms ist glatt. Der Kohlenstoff scheint lokal am Ort der Beschichtung vorzuliegen. Es sind Stapelfehler in der Schicht vorhanden, deren Anzahl mit zunehmender Schichtdicke tendenziell abnimmt.

dehnungskoeffizienten, erhält man mit $R_{40^{\circ}\text{C},650^{\circ}\text{C}}^* = 103\% \pm 1\%$ einen Relaxationsgrad, der auf bereits vorhandene Zugspannung bei 650°C hinweist. Dieser Effekt lässt sich nicht durch Temperaturschwankungen oder höhere Temperaturen während des Prozesses erklären, da hierfür $\Delta T \approx 1000\text{ K}$ betragen müsste.

Um die Defektdichte zu bestimmen wurden ω -Scans durchgeführt. Die gemessene Halbwertsbreite beträgt $\beta_{\text{mess}} = 1238\text{ arcsec}$, woraus sich eine Versetzungsdichte von $n_D = (6 \pm 3) \cdot 10^9\text{ cm}^{-2}$ berechnen lässt (vgl. Kapitel 3.2.2). Die Defektdichte liegt somit in der selben Größenordnung, wie beim in Kapitel 5 vorgestellten Ausgangsprozess.

Um die Art der vorliegenden Defekte zu analysieren, wurden TEM-Untersuchungen durchgeführt. Die hochauflösende Querschnittsaufnahme in Abbildung 6.7 zeigt, dass der Germaniumfilm glatt ist und der Kohlenstoff lokal am Ort der Beschichtung vorzuliegen scheint. Weiterhin ist deutlich das Vorhandensein von verschiedenen Fehlstapelungen zu erkennen. Diese können mit zunehmender Schichtdicke aufeinander zuwachsen

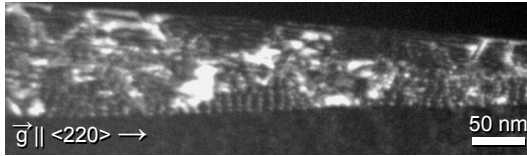


ABB. 6.8: Abbildung des Versetzungsnetzwerks in $[\bar{1}10]$ -Richtung durch Kippung der Probe E1 im Dunkelfeld unter weak-beam Bedingungen um 25° um die im Bild horizontale $[110]$ -Achse. Das Versetzungsnetzwerk ist sehr regelmäßig und besteht aus vollständigen Stufenversetzungen. Der Abstand entspricht mit ca. 10 nm dem Wert für vollständige Relaxation. Zusätzlich treten weitere Kontraste auf, die auf zusätzliche Defekte hindeuten.

und sich gegenseitig auslöschen[171], so dass ihre Dichte grundsätzlich nach oben abnimmt. Zusätzlich hat auch der Kohlenstoff einen Einfluss auf die Verringerung der Stapelfehler- und Zwillingslamellendichte. Dies wird in Kapitel 6.4 genauer betrachtet.

Das Versetzungsgeschehen an der Grenzfläche wurde wiederum durch Kippung der Probe im Dunkelfeld unter weak-beam Bedingungen um 25° um die im Bild horizontale $[110]$ -Achse untersucht. Dabei konnte ein sehr regelmäßiges Versetzungsnetzwerk (Abbildung 6.8) von vollständigen Stufenversetzungen entlang der $[\bar{1}10]$ - und $[110]$ -Richtung identifiziert werden, wie es bereits in Kapitel 5 beschrieben wurde. Der Abstand entspricht im Rahmen des Fehlers dem Abstand für vollständige Relaxation. Allerdings treten zusätzliche Kontraste auf, die auf zusätzliche Defekte nahe der Grenzfläche hindeuten.

Um zu überprüfen, ob der amorphe Ausgangszustand zu einer erhöhten Siliziumdiffusion ins Germanium führt, wurden Untersuchungen mit Sekundärionenmassenspektroskopie an einer Vergleichsprobe E2 durchgeführt. Diese Probe wurde ebenfalls mit zwei Zyklen mit je 20 nm Germanium und Kohlenstoffbedeckungen von 0,3 ML bzw. 0,2 ML hergestellt. Auf diesen Schichtstapel wurde bei 150°C weiter Ge gewachsen, so dass sich eine Gesamtschichtdicke von 110 nm ergibt. Abbildung 6.9(a) zeigt die Silizium- bzw. Germaniumkonzentration in Abhängigkeit der Abtragtiefe der Pro-

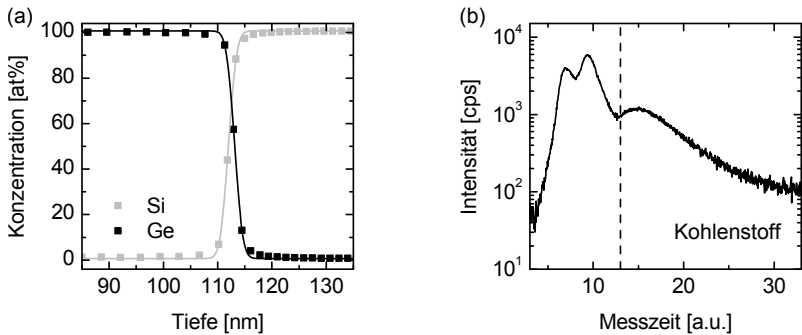


ABB. 6.9: SIMS-Untersuchungen der Vergleichsprobe E2. (a) Untersuchung der Interdiffusion von Silizium ins Germanium. Zusätzlich zu den Messwerten sind Simulationskurven des Verlaufs eingezeichnet. Die daraus bestimmte Diffusionskonstante von $D = 2,0 \cdot 10^{-17} \text{ cm}^2/\text{s}$ ist vergleichbar mit mittels Surfactant-modifizierter Epitaxie gewachsener Proben bei geringer Sb-Bedeckung. (b) Untersuchung der Kohlenstoffsegregation. Zwei ausgeprägte Maxima bestätigen, dass der Kohlenstoff nicht homogen verteilt, sondern lokalisiert an den Grenzflächen der Ge-Schichten vorliegt.

be E2. Der steile Übergang vom Germanium zum Silizium zeigt, dass auch hier keine starke Interdiffusion aufgetreten ist. Aus der Simulation des Kurvenverlaufs (vgl. Kapitel 2.5) lässt sich Diffusionslänge für Silizium in Germanium zu $L = 0,85 \text{ nm}$ ermitteln. Hieraus lässt sich für den relevanten Temperaturbereich von $625 \text{ }^\circ\text{C}$ bis $650 \text{ }^\circ\text{C}$ mit der Zeit $T = 360 \text{ s}$ eine Diffusionskonstante von $D = 2,0 \cdot 10^{-17} \text{ cm}^2/\text{s}$ bestimmen, die vergleichbar mit der Diffusionskonstante von mittels Surfactant-modifizierter Epitaxie gewachsener Proben bei geringer Sb-Bedeckung ist.[128] Es tritt somit stärkere Diffusion auf, als beim Wachstum bei $50 \text{ }^\circ\text{C}$.

Der Einfluss des amorphen Ausgangszustands auf die Lokalisierung des Kohlenstoffs wurde ebenfalls analysiert (Abbildung 6.9(b)). Es existieren zwei äquidistante Maxima, deren Intensitätsverhältnisse den Verhältnissen der verdampften Kohlenstoffmengen entsprechen. Somit liegt auch hier der Kohlenstoff lokal vor und ist nicht homogen in den Germaniumschichten verteilt.

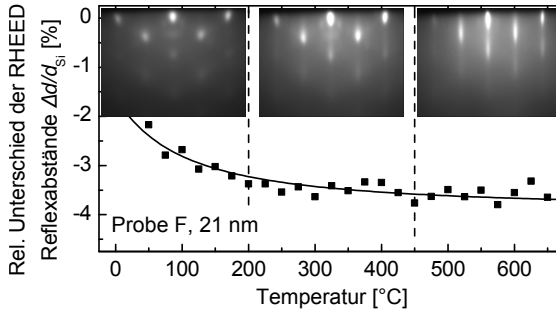


ABB. 6.10: Relative Unterschiede der RHEED-Reflexabstände im Temperaturschritt und zugehörige RHEED-Bilder bei einer Wachstumstemperatur von 50 °C (Probe F). Der Relaxationsprozess kann in 3 Bereiche unterteilt werden. Ein Großteil der Relaxation findet bei Temperaturen bis 200 °C statt, während die Oberfläche rau bleibt. Bis 450 °C kann keine weitere Relaxation festgestellt werden. Der Relaxationsgrad bei 650 °C beträgt $R_{50^{\circ}\text{C},650^{\circ}\text{C}}^R = 86\% \pm 12\%$. Ab 450 °C findet eine Umwandlung der rauhen in eine glatte Oberfläche statt.

6.2.2 Temperung nach Wachstum bei 50 °C

Im Folgenden wird der Relaxationsprozess nach dem Wachstum bei 50 °C betrachtet. Einige Ergebnisse dieses Kapitels wurden parallel zur Entstehung dieser Dissertation in [166] veröffentlicht.

Zunächst wurden wieder die relativen Unterschiede der RHEED-Reflexabstände bestimmt. Diese sind in Abbildung 6.10 für eine 21 nm dicke Germaniumschicht (Probe F) dargestellt. Aus den Ergebnissen der RHEED-Untersuchung lässt sich darauf schließen, dass der Relaxationsprozess in mehreren Stufen abläuft. Bereits beim Wachstum findet Relaxation durch eine Aufrauung der Oberfläche statt. Eine Erhöhung der Temperatur bis 200 °C ist ausreichend, um zusätzliche Relaxation auszulösen, während die Oberfläche weiterhin rau bleibt. Zwischen 200 °C und 650 °C kann nur geringe Relaxation festgestellt werden. Der aus RHEED bestimmte Relaxationsgrad bei 650 °C beträgt $R_{50^{\circ}\text{C},650^{\circ}\text{C}}^R = 86\% \pm 12\%$. Eine Umwandlung der rauhen in eine glatte Oberfläche findet erst bei Temperaturen

oberhalb von 450 °C statt. Die Messwerte wurden durch eine Arrhenius-Funktion nach Formel 6.1 gefittet und hieraus die Aktivierungsenergie zu $E_A = 0,05\text{eV}$ bestimmt. Dieser Wert ist erwartungsgemäß niedriger als für Wachstumstemperaturen von 40 °C, da hier nach dem Wachstum bereits (teil-)kristallines Material vorliegt und es nicht zunächst zu einer Kristallisation vor der Bildung von Versetzungen kommen muss. Allerdings scheint auch hier der absolute Wert zu niedrig. Dies wird in Kapitel 6.2.4 unter Berücksichtigung der Ergebnisse aller Wachstumstemperaturen ausführlicher diskutiert.

Um diese Ergebnisse zu präzisieren, wurde eine mit 26 nm vergleichbar dicke Germaniumschicht bei 50 °C mit anschließender Kohlenstoffbeschichtung hergestellt. Der Wafer wurde außerhalb des Ultrahochvakuums geviertelt, wovon ein Stück (Probe M1) im Ausgangszustand belassen wurde, während drei Stücke wieder in die MBE-Anlage eingeschleust und getempert wurden (Proben M2 bis M4). Hierfür musste ein anderer Probenhalter verwendet werden, so dass aus geometrischen Gründen für diese Probenserie keine RHEED-Auswertung möglich war. Des Weiteren kann sich auch die Proben temperatur bei der Temperung von vorherigen Versuchen unterscheiden. Trotz dieser Nachteile, ermöglicht dieser Ansatz, identische Proben auf Relaxation bei unterschiedlichen Temperaturen zu untersuchen.

Abbildung 6.11 zeigt die normierten hochauflösenden $\theta/2\theta$ -Messungen der (004)-Reflexe von Silizium und Germanium für unterschiedliche Temperaturen. Der Ge(004) Reflex ist nach dem Wachstum (Probe M1) durch eine inhomogene Spannungsverteilung und der resultierenden Vielzahl unterschiedlicher Gitterkonstanten stark asymmetrisch. Die größere Gitterkonstante als für Volumenmaterial deutet auf eine noch vorhandene Druckspannung ($R_{50^\circ\text{C}}^X = 65\% \pm 1\%$) in guter Übereinstimmung mit den RHEED-Ergebnissen der Probe F. Nach einer Temperung bis 150 °C (Probe M2) ist der Schichtpeak weiter asymmetrisch, jedoch nahe an die Winkelposition für Volumenmaterial verschoben, was einer deutlichen Erhöhung des Relaxationsgrads entspricht ($R_{50^\circ\text{C},150^\circ\text{C}}^X = 92\% \pm 1\%$). Vollständige Relaxation ($R_{50^\circ\text{C},450^\circ\text{C}}^X = 99\% \pm 1\%$) wird nach einer Temperung bis 450 °C (Probe M3) erreicht. Zusätzlich treten bei 650 °C Ansätze

6 Optimierung des Wachstumsprozesses

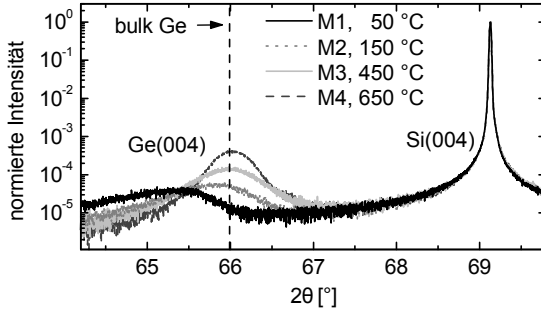


ABB. 6.11: Normierte hochauflösende $\theta/2\theta$ -Messung der (004)-Reflexe von Silizium und Germanium der Proben M1 bis M4 nach unterschiedlichen Temperaturen. Die Reflexe werden mit zunehmender Temperatur symmetrischer und ihre Winkelpositionen nähern sich der für Volumenmaterial an. Dabei erhöht sich der Relaxationsgrad von $R_{50^\circ\text{C}}^X = 65\% \pm 1\%$ auf $R_{50^\circ\text{C},650^\circ\text{C}}^X = 102\% \pm 1\%$. Ein Wert von über 100% tritt aufgrund der unterschiedlichen thermischen Ausdehnung auf, die beim Abkühlen eine Zugspannung induziert.

von Schichtdickenoszillationen auf, die auf eine scharfe Si/Ge-Grenzfläche und eine glatte Oberfläche schließen lassen. Der Relaxationsgrad liegt über 100 % ($R_{50^\circ\text{C},650^\circ\text{C}}^X = 102\% \pm 1\%$) aufgrund der unterschiedlichen thermischen Ausdehnung von Germanium und Silizium, die beim Abkühlen eine Zugspannung induziert. Korrigiert man die Messung um diesen Effekt, erhält man einen Relaxationsgrad von $R_{50^\circ\text{C},650^\circ\text{C}}^* = 98\% \pm 1\%$ (Probe F: $R_{50^\circ\text{C},650^\circ\text{C}}^* = 99\% \pm 1\%$) bei der höchsten Prozesstemperatur.

Aufgrund der asymmetrischen Ge(004)-Reflexe mit geringer Intensität bei Temperaturen bis 150 °C sind in diesem Bereich keine Auswertungen von ω -Scans möglich. Für eine Temperatur bis 450 °C ergibt sich mit einer Halbwertsbreite von $\beta_{mess} = 1462$ arcsec eine Versetzungsdichte von $n_D = (9 \pm 4) \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$. Mit der gemessenen Halbwertsbreite von $\beta_{mess} = 1180$ arcsec lässt sich für die Temperatur bis 650 °C eine Versetzungsdichte von $n_D = (5 \pm 2) \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ berechnen. Für die Probe F ergibt sich mit $\beta_{mess} = 1180$ arcsec und $n_D = (5 \pm 2) \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ein ähnliches Bild. Die Versetzungsdichte nimmt somit deutlich durch die Temperung ab.

Die Anzahl der die Oberfläche durchstoßenden Versetzungen wurde für Probe M4 aus TEM-Untersuchungen in der Draufsicht zu etwa $n_{TD} = 3 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ bestimmt. Sie ist somit um zwei Größenordnungen geringer als im Ausgangsexperiment (vgl. Kapitel 5).

Um die vorliegenden Defekte in Abhängigkeit von der Temperung näher zu analysieren wurden weitere TEM-Untersuchungen durchgeführt. In Abbildung 6.12 sind TEM-Querschnittsaufnahmen der unterschiedlichen Temperstadien abgebildet. Nach dem Wachstum konnten Bereiche mit amorphem Germanium nahe der Oberfläche identifiziert werden. Allerdings gibt es auch kristalline Bereiche, die bis zur Oberfläche reichen. Bereits nach einer Temperung bis 150 °C ist nahezu kein amorphes Material mehr nachweisbar. Es ist eine Vielzahl von Fehlstapelungen nach dem Wachstum zu erkennen, die auch zur Relaxation beitragen. Die Anzahl der vorhandenen Stapelfehler sinkt jedoch mit zunehmender Temperatur, so dass von einer höheren kristallinen Perfektion gesprochen werden kann. Eine Glättung der Oberfläche bei Temperungen bis 450 °C kann mit diesen TEM-Untersuchungen nicht bestätigt werden. Nach Temperung bis 650 °C liegen jedoch größere glatte Bereiche vor.

Die Oberflächenmorphologie wurde zusätzlich mit Rasterkraftmikroskopie untersucht (Abbildung 6.13). Es konnten keine signifikanten Unterschiede der Oberflächenmorphologie festgestellt werden. Allerdings treten bei Temperaturen oberhalb von 450 °C Mikrorauheiten auf (Abbildung 6.13(d)), die möglicherweise auf die Bildung von Kohlenstoffclustern zurückzuführen sind. Diese beeinflussen die mittlere quadratische Rauheit der Oberfläche jedoch nicht wesentlich, so dass für alle Proben $r_{RMS} = 0,2 \text{ nm}$ beträgt.

Im Folgenden diskutiere ich den scheinbaren Widerspruch zwischen den Ergebnissen der RHEED- sowie TEM- und AFM-Untersuchungen. Die im RHEED auftretende Umwandlung des Punktmusters in eine 2×1 Oberflächenrekonstruktion ist zum einen auf die nach dem Wachstum vorhandene Grenzfläche zwischen kristallinem und amorphem Material zurückzuführen. Die Ausbildung der amorphen Phase wird durch die zunehmende Aufrauung der Oberfläche beim Wachstum bedingt.[169] Die Grenze zwischen amorphem und kristallinem Material ist somit sehr rau, was im RHEED zur Ausbildung eines Punktmusters führt. In einzelnen

6 Optimierung des Wachstumsprozesses

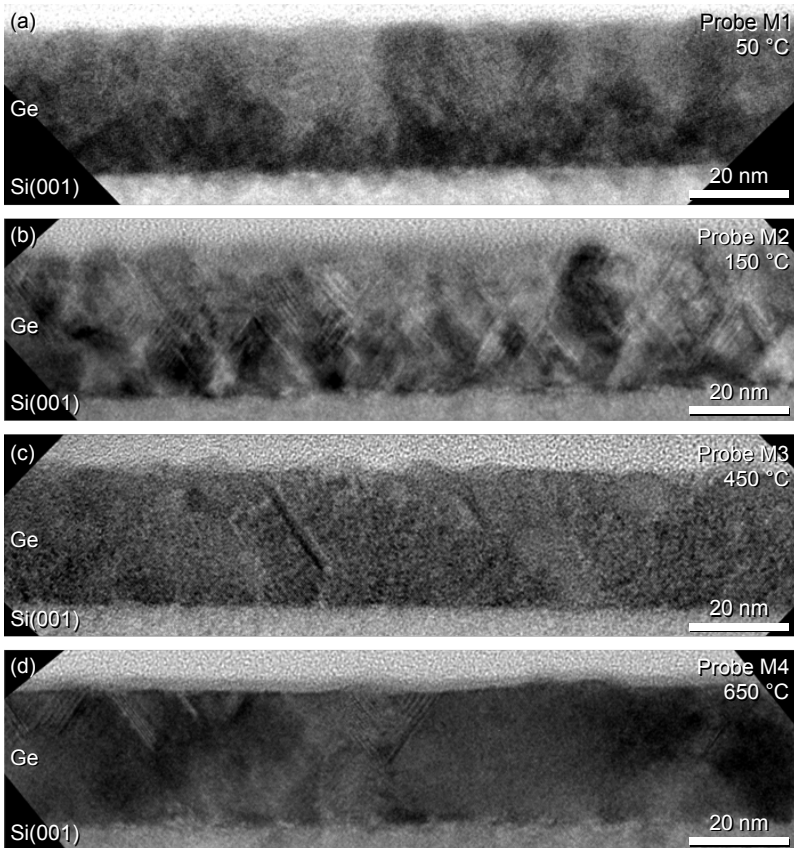


ABB. 6.12: TEM-Aufnahmen der Proben M1 bis M4 im Querschnitt. Nach dem Wachstum (a) liegt eine geschlossene aber raue Schicht vor, die Fehlstaapelungen und Zwillingslamellen aufweist. Mit zunehmender Schichtdicke kommt es auch zur Beschichtung mit amorphem Germanium. Teilweise setzt sich das kristalline Wachstum bis zur Oberfläche fort. Nach Temperung bis 150 °C (b) ist nahezu kein amorphes Material mehr vorhanden. Der Anzahl an Fehlstaapelungen nimmt mit zunehmender Temperatur (b)-(d) ab.

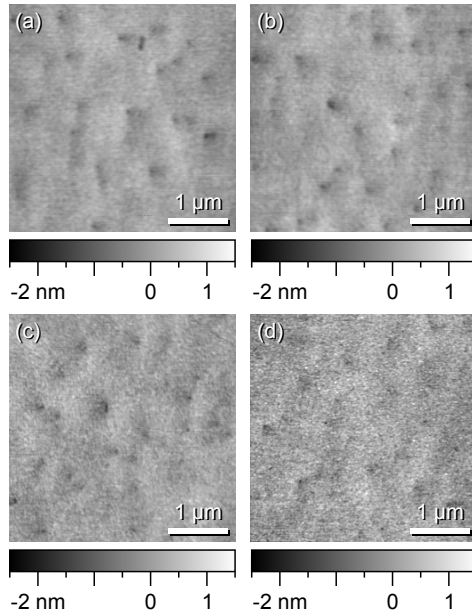


ABB. 6.13: AFM-Untersuchung der Proben M1 (a), M2 (b), M3 (c) und M4 (d). Es können keine signifikanten Unterschiede Oberflächenrauhigkeiten festgestellt werden. Die mittlere quadratische Rauheit der Oberfläche beträgt für alle Proben $r_{RMS} = 0,2$ nm.

Bereichen reicht die kristalline Phase bis zur Oberfläche, so dass weiterhin ein Beugungsmuster vorliegt. Mit zunehmender Temperatur kristallisiert das amorphe Germanium, was einer Glättung der kristallinen Bereiche entspricht und zu einer Änderung des Beugungsmusters führt. Eine weitere Glättung findet oberhalb von 450 °C an der Oberfläche statt.

Die Anzahl der im AFM auftretenden Vertiefungen entspricht im Rahmen des Fehlers der aus XRD- und TEM-Untersuchungen bestimmten Anzahl von Durchstoßversetzungen.

Abbildung 6.14 zeigt eine Projektion der Si/Ge-Grenzfläche im Dunkel-feld unter weak-beam Bedingungen, die durch Kippung der Probe um 25° um die im Bild horizontale [110]-Achse erzeugt wird. Direkt nach

6 Optimierung des Wachstumsprozesses

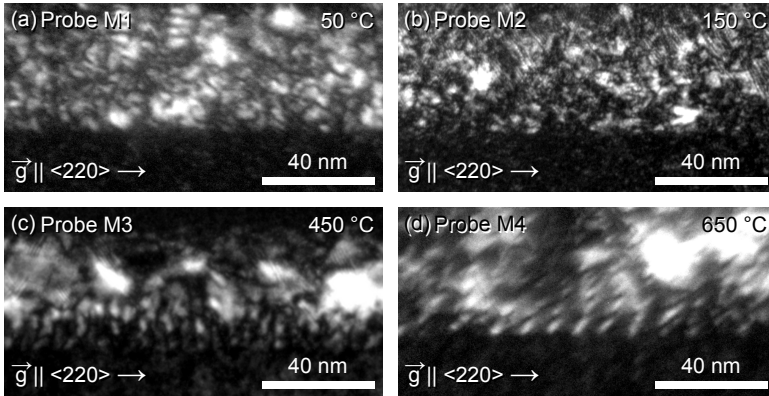


ABB. 6.14: Abbildung des Versetzungsnetzwerks in $[\bar{1}10]$ -Richtung durch Kippen der Proben M1 bis M4 im Dunkelfeld unter weak-beam Bedingungen um 25° um die im Bild horizontale $[110]$ -Achse. Direkt nach dem Wachstum (a) gibt es eine Vielzahl ungeordneter Kontraste aufgrund von Defekten an der Grenzfläche. Mit Erhöhung der Temperatur auf 150°C (b) bilden sich weitere einzelne Versetzungen aus. Eine Temperung bis 450°C (c) genügt um parallele Versetzungen entlang der $[\bar{1}10]$ -Richtung auszubilden, deren Abstände noch stark variieren. Eine weitere Erhöhung der Temperatur bis 650°C (d) führt zu einer Erhöhung der Regelmäßigkeit des Versetzungsnetzwerks. Der Abstand entspricht mit ca. 10 nm dem zu erwartenden Wert für vollständige Relaxation.

dem Wachstum (Abbildung 6.14 (a)) gibt es eine Vielzahl ungeordneter Kontraste, die auf das Vorhandensein von Defekten zurückzuführen sind. Mit Erhöhung der Temperatur auf 150°C (Abbildung 6.14 (b)) nimmt die Ordnung der Kontraste nicht weiter zu. Erst eine Temperung bis 450°C (Abbildung 6.14 (c)) führt zu einer erhöhten Regelmäßigkeit der Versetzungen in Form eines Versetzungsnetzwerks. Die Abstände der parallelen Versetzungen entlang der $[\bar{1}10]$ -Richtung variieren jedoch noch stark. Auch in der senkrecht dazu verlaufenden $[110]$ -Richtung liegen diese Versetzungen vor. Aufgrund des Unsichtbarkeitskriteriums (vgl. Kapitel 3.4) lässt sich wiederum jeweils nur eine Reihe von Versetzungen abbilden. Eine weitere Erhöhung der Temperatur bis 650°C (Abbil-

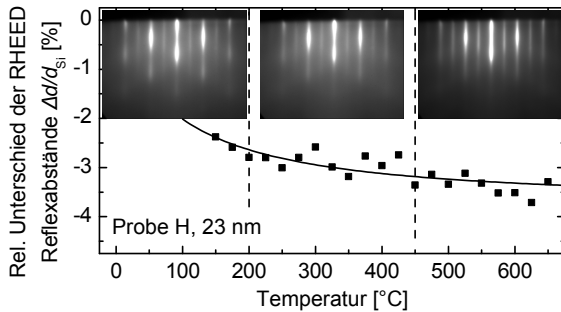


ABB. 6.15: Relative Unterschiede der RHEED-Reflexabstände im Tempereschritt und zugehörige RHEED-Bilder bei einer Wachstumstemperatur von 150 °C (Probe H). Ein Großteil der Relaxation geschieht bereits während des Wachstums. Eine Erhöhung der Temperatur hat eine Erhöhung der Relaxation zur Folge. Gleichzeitig wird die 2×1 Oberflächenrekonstruktion immer perfekter.

dung 6.14 (d)) führt zu einer weiteren Erhöhung der Regelmäßigkeit des Versetzungsnetzwerks und es lässt sich ein Abstand von ca. 10 nm bestimmen, der dem zu erwartenden Wert für vollständige Relaxation über vollständige Stufenversetzungen entspricht. In [172] wurde gezeigt, dass ein regelmäßiges Versetzungsnetzwerk bei Surfactant-modifizierter Epitaxie erst bei Wachstumstemperaturen oberhalb von 550 °C auftritt, so dass hier ein ähnliches Temperaturverhalten vorliegt.

Aus den XRD- und TEM-Untersuchungen konnten keine strukturellen Unterschiede zwischen Probe M4 und der Probe F festgestellt werden. Die kurzfristige Exposition mit Raumluft hat somit keinen Einfluss auf die Relaxationsvorgänge während der anschließenden Temperung im Ultrahochvakuum.

6.2.3 Temperung nach Wachstum bei 150 °C

Der Verlauf der Relaxation für eine bei 150 °C gewachsene Probe während der anschließenden Temperung ist in Abbildung 6.15 dargestellt. Beim Wachstum bleibt die 2×1 Oberflächenrekonstruktion erhalten, so dass

6 Optimierung des Wachstumsprozesses

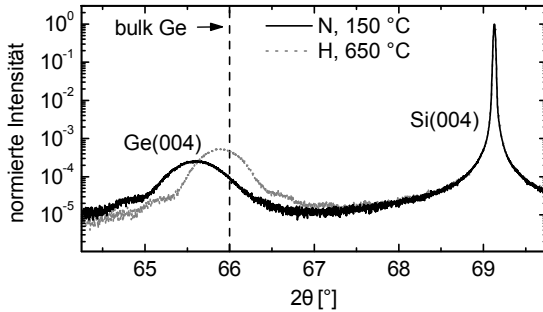


ABB. 6.16: Normierte hochauflösende $\theta/2\theta$ -Messung der (004)-Reflexe von Silizium und Germanium der Proben N (ungetempert) und H (getempert). Die Schichtreflexe beider Proben sind symmetrisch und weisen deutliche Schichtdickenoszillationen auf, was auf eine glatte Oberfläche und eine scharfe Si/Ge-Grenzfläche hinweist. Der Relaxationsgrad erhöht sich durch die Temperung von $R_{150^\circ\text{C}}^X = 82\% \pm 1\%$ auf $R_{150^\circ\text{C},650^\circ\text{C}}^X = 95\% \pm 1\%$, so dass keine vollständige Relaxation erreicht wird.

stets eine glatte Schicht vorliegt. Obwohl bereits beim Wachstum ein Großteil der Relaxation ($R_{150^\circ\text{C}}^R = 59\% \pm 12\%$) auftritt, geschieht dies nicht durch eine Aufrauung der Oberfläche und muss somit an der Grenzfläche durch Ausbildung von Versetzungen geschehen. Eine Erhöhung der Temperatur hat eine Erhöhung des Relaxationsgrads zur Folge, die für eine Wachstumstemperatur von 150°C mit $\Delta R_{150^\circ\text{C}}^R = 25\%$ geringer ausfällt als bei 50°C ($\Delta R_{50^\circ\text{C}}^R = 34\%$). Gleichzeitig wird die 2×1 Oberflächenrekonstruktion immer perfekter. Die Messwerte wurden durch eine Arrhenius-Funktion nach Formel 6.1 gefittet und hieraus die Aktivierungsenergie zu $E_A = 0,05\text{ eV}$ bestimmt, die somit identisch zum Wachstum bei 50°C ist. Eine ausführlichere Diskussion unter Berücksichtigung der Ergebnisse aller Wachstumstemperaturen ist in Kapitel 6.2.4 zu finden.

Das unterschiedliche Wachstums- und Relaxationsverhalten spiegelt sich auch in den strukturellen Untersuchungen wieder. Die hochauflösende $\theta/2\theta$ -Messung der (004)-Reflexe von Silizium und Germanium der Proben N (ungetempert, 19 nm) und H (getempert bis 650°C , 23 nm) in

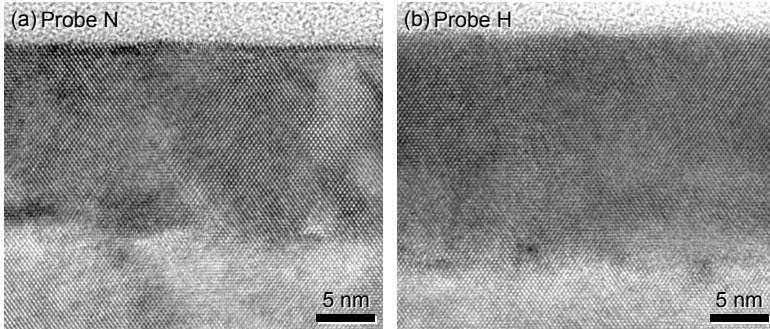


ABB. 6.17: Hochauflösende TEM-Aufnahmen der Proben N und H im Querschnitt. Die Oberfläche des Germaniumfilms ist sowohl nach dem Wachstum als auch nach der Temperung glatt. Es sind nach dem Wachstum Stapelfehler vorhanden, deren Dichte durch die Temperung stark reduziert wird.

Abbildung 6.16 zeigt symmetrische Schichtreflexe für beide Proben, die zusätzlich deutliche Schichtdickenoszillationen aufweisen, was auf eine glatte Oberfläche und eine scharfe Si/Ge-Grenzfläche hinweist. Wie in den vorherigen Untersuchungen nimmt der Relaxationsgrad mit steigender Temperatur zu und erhöht sich von $R_{150^\circ\text{C}}^X = 82\% \pm 1\%$ (Probe N) auf $R_{150^\circ\text{C},650^\circ\text{C}}^X = 95\% \pm 1\%$ (Probe H). Korrigiert man diesen Werte wiederum um die unterschiedlichen Ausdehnungskoeffizienten, so erhält man bei 650°C einen Relaxationsgrad von $R_{150^\circ\text{C},650^\circ\text{C}}^* = 91\% \pm 1\%$.

Die für die Probe N nach dem Wachstum aus einem ω -Scan bestimmte Halbwertsbreite von $\beta_{mess} = 1257$ arcsec ergibt eine Versetzungsdichte von $n_D = (4 \pm 2) \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$. Die geringere Halbwertsbreite der Probe H von $\beta_{mess} = 1004$ arcsec liefert mit der Schichtdicke von 23 nm eine etwas geringere Versetzungsdichte von $n_D = (2 \pm 1) \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$. Die Defektdichten nehmen somit auch hier mit der Temperung ab, allerdings nicht so deutlich, wie nach dem Wachstum bei 50°C .

Hochauflösende TEM-Querschnittsaufnahmen der Proben N und H in Abbildung 6.17 belegen, dass die Oberfläche des Germaniumfilms sowohl nach dem Wachstum als auch nach der Temperung glatt ist. Es

6 Optimierung des Wachstumsprozesses

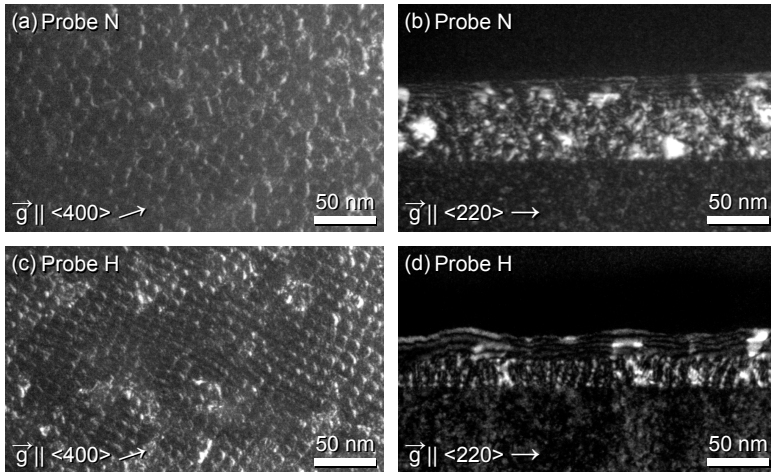


ABB. 6.18: TEM-Untersuchung der Si/Ge-Grenzfläche der Proben N und H. Die Draufsicht im Dunkelfeld unter weak-beam Bedingungen (a) zeigt ein noch unregelmäßiges Versetzungsnetzwerk nach dem Wachstum. Durch die anschließende Temperung (c) erhöht sich die Regelmäßigkeit dieses Versetzungsnetzwerks deutlich. Dies wird durch die Abbildung der Grenzfläche in $[\bar{1}10]$ -Richtung durch Kippung der Proben im Dunkelfeld unter weak-beam Bedingungen um 25° um die im Bild horizontale $[110]$ -Achse bestätigt ((b) und (d)). Der Abstand der vorliegenden vollständigen Stufenversetzungen beträgt ca. 10 nm.

sind nach dem Wachstum Stapelfehler vorhanden, deren Dichte durch die Temperung stark reduziert wird. Die Anzahl an Stapelfehlern und Zwillingslamellen ist im Vergleich zum Wachstum bei tieferen Temperaturen grundsätzlich geringer. Eine genaue Quantifizierung war jedoch nicht möglich. Des Weiteren lassen sich für beide Proben vollständige Stufenversetzungen identifizieren.

Genauere Untersuchungen des Versetzungsnetzwerks an der Grenzfläche wurden mit unterschiedlichen Abbildungsbedingungen durchgeführt. Die Draufsicht im Dunkelfeld unter weak-beam Bedingungen in Abbildung 6.18(a) zeigt ein noch unregelmäßiges Versetzungsnetzwerk nach

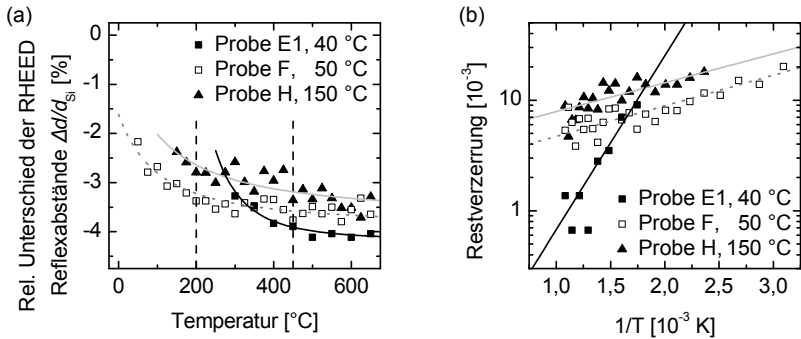


ABB. 6.19: (a) Relative Unterschiede der RHEED-Reflexabstände im Tempereschritt für Wachstumstemperaturen von 40 $^{\circ}C$ (Probe E1, 13 nm), 50 $^{\circ}C$ (Probe F, 21 nm) und 150 $^{\circ}C$ (Probe H, 23 nm) sowie (b) die entsprechenden aus RHEED bestimmten Restverzerrungen der Germaniumfilme.

dem Wachstum. Durch die anschließende Temperung (Abbildung 6.18(c)) erhöht sich die Regelmäßigkeit dieses Versetzungsnetzwerks deutlich und nähert sich dem Idealbild eines rechteckigen Versetzungsnetzwerks in $\langle 110 \rangle$ -Richtungen an. Dies lässt sich durch die Abbildung der Grenzfläche in $[\bar{1}10]$ -Richtung durch Kippung der Proben im Dunkelfeld unter weak-beam Bedingungen um 25 $^{\circ}$ um die im Bild horizontale $[110]$ -Achse bestätigen. Der Anteil unregelmäßigen Kontrasts nach dem Wachstum (Abbildung 6.18(b)), der die Kontraste des Versetzungsnetzwerk überlagert, nimmt mit Erhöhung der Temperatur deutlich ab (Abbildung 6.18(d)). Der Abstand der vorliegenden vollständigen Stufenversetzungen beträgt ca. 10 nm.

6.2.4 Zusammenfassung

Die Relaxationsverläufe während der Temperung der bei unterschiedlichen Wachstumstemperaturen hergestellten Proben unterscheiden sich in verschiedenen Aspekten (siehe Abbildung 6.19). Bei 40 $^{\circ}C$ liegt zunächst eine amorphe Germaniumschicht vor, so dass kein Relaxationsgrad aus

6 Optimierung des Wachstumsprozesses

RHEED-Messungen bestimmt werden kann. Ein Wachstum bei 50 °C resultiert in einem rauen, teilweise amorphen Germaniumfilm, der Fehlstapelungen und eine Vielzahl von Versetzungen, jedoch kein Versetzungsnetzwerk aufweist. Der aus RHEED bestimmte Relaxationsgrad nach dem Wachstum beträgt $R_{50^\circ\text{C}}^R = 50\% \pm 12\%$. Im Gegensatz hierzu liegt bei einer Wachstumstemperatur von 150 °C, neben einer deutlich geringen Zahl an Fehlstapelungen, bereits nach dem Wachstum ein Versetzungsnetzwerk an der Grenzfläche vor. Der aus RHEED bestimmte Relaxationsgrad beträgt in diesem Fall $R_{150^\circ\text{C}}^R = 59\% \pm 12\%$.

Durch die Erhöhung der Temperatur treten abhängig von der Wachstumstemperatur unterschiedliche Effekte auf. Der bei 40 °C erzeugte amorphe Germaniumfilm kristallisiert während der Temperung. Der Relaxationsgrad steigt durch die Ausbildung von Versetzungen einer Arrhenius-Beziehung folgend an und erreicht seinen Endwert von $R_{40^\circ\text{C},650^\circ\text{C}}^R = 99\% \pm 12\%$ bereits bei etwa 450 °C. Es bildet sich während der Temperung das charakteristische Versetzungsnetzwerk, wobei der genaue Temperaturbereich hierfür bisher nicht genauer untersucht wurde.

Auch nach einem Wachstum bei 50 °C steigt der Relaxationsgrad bis etwa 200 °C an und erreicht ein Maximum von $R_{50^\circ\text{C},650^\circ\text{C}}^R = 86\% \pm 12\%$. Zunächst kommt es hierbei zur Bildung von einzelnen ungeordneten Versetzungen. Mit Erhöhung der Temperatur auf 150 °C kann weniger Spannung elastisch gespeichert werden, was zur Ausbildung von weiteren Versetzungen führt. Aufgrund der noch geringen Anzahl und tiefen Temperatur kann sich jedoch noch kein Versetzungsnetzwerk bilden. Eine Temperung bis 450 °C liefert genügend Energie, damit die Versetzungen gleiten können. Dabei bilden sich parallele Versetzungen entlang der $[\bar{1}10]$ -Richtung, deren Abstände noch stark variieren. Auch in der senkrecht dazu verlaufenden $[110]$ -Richtung liegen diese Versetzungen vor. Die Regelmäßigkeit des überwiegend aus vollständigen Stufenversetzungen bestehenden Versetzungsnetzwerks erhöht sich, so dass ein Abstand von ca. 10 nm bestimmt werden kann, der dem zu erwartenden Wert für vollständige Relaxation entspricht. Gleichzeitig ist im RHEED eine Glättung zu beobachten, die auf die Kristallisierung der amorphen Anteile sowie der Glättung der Oberfläche nach Ausbildung des Versetzungsnetz-

werks zurückzuführen sind. Die Stapelfehlerdichte wird mit zunehmender Temperatur deutlich reduziert.

Der bei 150 °C gewachsene Film bleibt durchgehend glatt und weist bereits nach dem Wachstum ein Versetzungsnetzwerk auf. Der Relaxationsgrad erhöht sich und erreicht bei 650 °C sein Maximum von $R_{150^{\circ}\text{C},650^{\circ}\text{C}}^R = 84 \% \pm 12 \%$

Die aus den Arrhenius-Beziehungen bestimmten Aktivierungsenergien für Wachstumstemperaturen von 50 °C und 150 °C sind mit $E_A = 0,05 \text{ eV}$ identisch. Allerdings scheinen die Absolutwerte sehr niedrig zu sein. In der Literatur schwanken die Angaben für die Aktivierungsenergie für Versetzungsbildung sehr stark. Für $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ mit Germaniumgehalt unter 50% werden Werte von $E_A = 0,3 \text{ eV} - 4 \text{ eV}$ angegeben.[170, 173, 174, 175, 176] Für reines Germanium schwanken die Literaturwerte von $E_A = 0,3 \text{ eV} - 10 \text{ eV}$. [177, 178] Eine ermittelte Aktivierungsenergie von $E_A = 0,08 \text{ eV}$ wurde in [82] damit begründet, dass die Aktivierungsenergie laut [177] in Systemen mit höherer Gitterfehlpassung deutlich geringer sein kann. Unabhängig von den Absolutwerten korrelieren die ermittelten Aktivierungsenergien mit den bisherigen Ergebnissen zum Relaxationsvorgang. Nach dem Wachstum bei 50 °C und 150 °C liegen bereits ungeordnete bzw. geordnete Versetzungen vor. Mit zunehmender Temperatur nukleieren weitere Versetzungen bzw. breiten sich aus und interagieren miteinander. Lediglich die Temperatur, ab der das Versetzungsnetzwerk vollständig ausgebildet ist, unterscheidet sich. Im Falle der Festphasenepitaxie bei 40 °C muss zunächst eine Kristallisation stattfinden, bevor es zur Ausbildung von Versetzungen kommt. Da der Kohlenstoff die Inselbildung hierbei unterdrückt, muss die Relaxation über eine Umstrukturierung von der Grenzfläche ausgehend geschehen, wozu eine höhere Aktivierungsenergie nötig ist.[66] Dies kann durch die ermittelte Aktivierungsenergie von $E_A = 0,3 \text{ eV}$ bestätigt werden.

Da der Fehler bei der RHEED-Auswertung groß ist, wurden mit hochauflösenden $\theta/2\theta$ -Messungen des Ge(004)-Reflex die finalen Relaxationsgrade aller Proben bestimmt (Abbildung 6.20). Es ergibt sich auch hier eine Abnahme mit zunehmender Wachstumstemperatur von $R_{40^{\circ}\text{C},650^{\circ}\text{C}}^X = 107 \% \pm 1 \%$ über $R_{50^{\circ}\text{C},650^{\circ}\text{C}}^X = 103 \% \pm 1 \%$ bis $R_{150^{\circ}\text{C},650^{\circ}\text{C}}^X = 95 \% \pm 1 \%$.

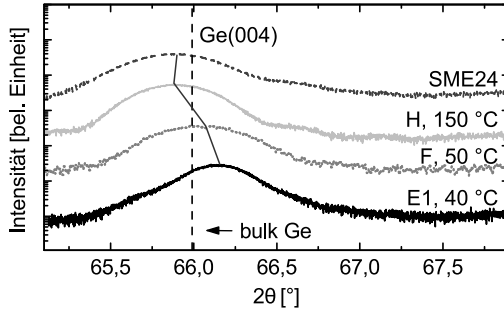


ABB. 6.20: Hochauflösende $\theta/2\theta$ -Messung des Ge(004)-Reflex der Proben E1 (2 Zyklen, 32 nm), F (21 nm) und H (23 nm), die bei unterschiedlichen Wachstumstemperaturen hergestellt wurden. Der Relaxationsgrad nimmt mit zunehmender Wachstumstemperatur ab. Die ähnlich dicke Probe SME24 ähnelt sehr stark der bei 150 °C gewachsenen Probe H.

Korrigiert man diese Werte um den Einfluss der thermischen Ausdehnungskoeffizienten, so erhält man bei 650 °C mit $R_{40^\circ\text{C},650^\circ\text{C}}^* = 103\% \pm 1\%$, $R_{50^\circ\text{C},650^\circ\text{C}}^* = 99\% \pm 1\%$ sowie $R_{150^\circ\text{C},650^\circ\text{C}}^* = 91\% \pm 1\%$ im Rahmen des Fehlers eine Übereinstimmung zu den RHEED-Untersuchungen. Grundsätzlich wurde beobachtet, dass die RHEED-Analysen den Relaxationsgrad im Verhältnis zu den Röntgendiffraktometriemessungen unterschätzen, ihren Verlauf jedoch qualitativ richtig beschreiben. Die Messung der vergleichbaren Probe SME24 ähnelt sehr stark der bei 150 °C gewachsenen Probe H und besitzt einen Relaxationsgrad von $R_{\text{SME24}}^X = 96\% \pm 1\%$ bzw. von $R_{\text{SME24}}^* = 92\% \pm 1\%$.

Zunächst könnte man vermuten, dass die unterschiedlichen Relaxationsgrade lediglich mit den unterschiedlichen Schichtdicken zusammenhängen (Tabelle 6.1). Tatsächlich tritt auch ein Schichtdickeneffekt auf, der in Kapitel 6.3 genauer betrachtet wird. Da die Schichtdickenvariation der hier gezeigten Proben F (50 °C) und H (150 °C) mit 21 nm bzw. 23 nm zu vernachlässigen ist, könnte lediglich die Schichtdicke der Probe E1 eine Rolle spielen. Diese Probe wurde in einem zweistufigen Prozess hergestellt. Für die RHEED-Untersuchungen wurde der erste Wachstumszyklus mit

6.2 Einfluss der Temperatur

Probe	T_G [°C]	Dicke [nm]	$R_{T_G}^R$	$R_{T_G}^*$	$R_{T_G,650^\circ\text{C}}^R$	$R_{T_G,650^\circ\text{C}}^*$
E1	40	16	-	-	99 %	-
		32	-	-	-	103 %
F	50	21	52 %	65 %	86 %	99 %
H	150	23	59 %	81 %	84 %	91 %
SME24	650	24	-	-	-	92 %

TAB. 6.1: Übersicht der Relaxationsgrade nach dem Wachstum bei unterschiedlichen Wachstumstemperaturen und nach der Temperung bis 650 °C im Vergleich zu einer mittels Surfactant-modifizierter Epitaxie hergestellten Probe.

16 nm verwendet, der eine geringere Schichtdicke als Proben F und H aufweist. Auf der anderen Seite wurde für die Röntgenuntersuchungen die Probe nach dem zweiten Zyklus mit einer Gesamtdicke von 32 nm untersucht. Wenn lediglich eine erhöhte Schichtdicke zu einem erhöhten Relaxationsgrad führt, müsste $R_{40^\circ\text{C},650^\circ\text{C}}^R$ deutlich kleiner als $R_{40^\circ\text{C},650^\circ\text{C}}^*$, $R_{50^\circ\text{C},650^\circ\text{C}}^R$ und $R_{150^\circ\text{C},650^\circ\text{C}}^R$ sein. Da dies nicht der Fall ist, handelt es sich nicht um einen Schichtdickeneffekt.

Da die unterschiedlichen Relaxationsgrade nicht durch Schichtdickenunterschiede zu erklären sind (lediglich die Schichtdicke der Probe E1 unterscheidet sich mit 16 nm bzw. 32 nm), müssen die unterschiedlichen Zustände nach dem Wachstum hierfür verantwortlich sein. Aufgrund des erhöhten Relaxationsgrads nach dem Wachstum ist mit zunehmender Wachstumstemperatur eine geringere Restspannung in der Schicht gespeichert. Je geringer aber die Restspannung ist, desto größer ist die Aktivierungsenergie für weitere Relaxation. Da bei Probe H bereits beim Wachstum ein Versetzungsnetzwerk entsteht und es nicht zu einer späteren Transformation der Oberfläche beim Tempern kommen muss, ist dieser Relaxationsverlauf dem der Surfactant-modifizierten Epitaxie am ähnlichsten. Es überrascht daher nicht, dass die Relaxationsgrade für diese beiden Prozesse im Rahmen des Fehlers identisch sind. Allerdings tritt im Gegensatz zur Probe SME24 keine Verbreiterung des Ge(004)-Reflexes zu höheren Winkeln in den $\theta/2\theta$ -Messungen auf, die durch Siliziuminterdiffusion während des Wachstums hervorgerufen werden.

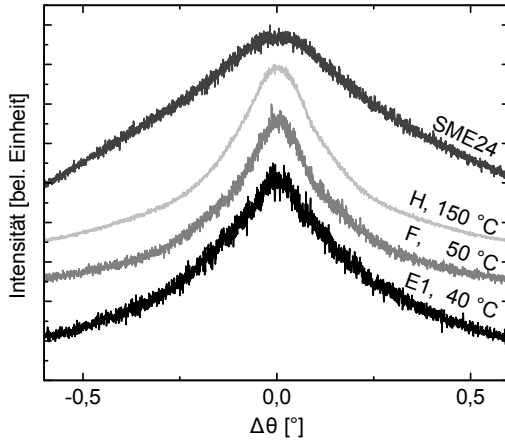


ABB. 6.21: ω -Messung des Ge(004)-Reflex der Proben E1 (2 Zyklen, 32 nm), F (21 nm) und H (23 nm), die bei unterschiedlichen Wachstumstemperaturen hergestellt wurden, sowie der Probe SME24. Die ω -Messungen der Proben E1, F und H sind nahezu identisch, während der Reflex der Probe SME24 hingegen deutlich breiter ist und auf eine stark erhöhte Versetzungsdichte hinweist.

Es ist naheliegend, dass auch die Defektdichten temperaturabhängig sind. Um dies zu bestätigen, wurden ω -Messungen durchgeführt (Abbildung 6.21). Alle Kurven wurden zunächst normiert und anschließend durch Addition mit einem festen Zahlenwert verschoben, um eine bessere Darstellung zu erreichen. Die ω -Messungen der Proben E1, F und H sind nahezu identisch, während der Reflex der Probe SME24 hingegen deutlich breiter ist. Dies zeigt sich auch in den ermittelten Halbwertsbreiten, die in Tabelle 6.2 mit den daraus berechneten Defektdichten n_D zusammengefasst sind. Eine Erhöhung der Wachstumstemperatur führt zu einer leichten Verringerung der Halbwertsbreite und somit auch der Defektdichte. Zur Probe F liegen TEM-Untersuchungen in der Draufsicht vor, aus denen die Anzahl der die Oberfläche durchstoßenden Versetzungen zu $n_{TD} = 3 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ bestimmt werden konnte, die im Rahmen des Fehlers mit der aus der ω -Messung bestimmten Defektdichte n_D übereinstimmt.

Probe	T_G [°C]	Dicke [nm]	β_{mess} [arcsec]	n_D [cm ⁻²]
E1	40	32	1238	$6 \cdot 10^9$
F	50	21	1181	$4 \cdot 10^9$
H	150	23	1004	$2 \cdot 10^9$
SME24	SME	24	1951	$2 \cdot 10^{10}$

TAB. 6.2: Übersicht der Defektdichten bei unterschiedlichen Wachstumstemperaturen nach der Temperung bis 650 °C im Vergleich zu einer mittels Surfactant-modifizierter Epitaxie hergestellten Probe.

Die Probe SME24 weist eine Defektdichte n_D von $2 \cdot 10^{10}$ cm⁻² auf, die um eine Größenordnung größer als bei Probe H ist.

6.3 Einfluss der Schichtdicke

Der Einfluss der Schichtdicke ist systematisch für das Wachstum bei 150 °C untersucht worden, da hier keine zusätzlichen Effekte wie die Transformation der Oberfläche auftreten und es auch nicht zu einer möglichen Beschichtung mit amorphem Material kommt, da die kristalline Schichtdicke nicht mehr limitiert ist.[168] Für Schichtdicken von 14 nm (Probe O1), 23 nm (Probe O2), 37 nm (Probe O3) und 49 nm (Probe O4) wurden während der Temperung die Unterschiede der RHEED-Reflexabstände analysiert.

In Abbildung 6.22 ist zu sehen, dass sich mit zunehmender Schichtdicke der Relaxationsgrad sowohl nach dem Wachstum als auch nach der Temperung erhöht. Die aus den RHEED-Untersuchungen bestimmten Relaxationsgrade betragen $R_{14\text{nm}}^R = 75\% \pm 12\%$, $R_{23\text{nm}}^R = 84\% \pm 12\%$, $R_{37\text{nm}}^R = 93\% \pm 12\%$ sowie $R_{49\text{nm}}^R = 98\% \pm 12\%$. Der grundsätzliche Verlauf der Relaxation über der Temperatur ändert sich hierbei nicht mit der Schichtdicke.

Alle Verläufe konnten mit der Arrhenius-Beziehung nach Formel 6.1 angenähert werden und hieraus die Aktivierungsenergien zu $E_A = 0,05$ eV bestimmt werden. Dies gilt auch für die bei einer Wachstumstemperatur von 50 °C hergestellten Proben. Der qualitative Verlauf des Relaxations-

6 Optimierung des Wachstumsprozesses

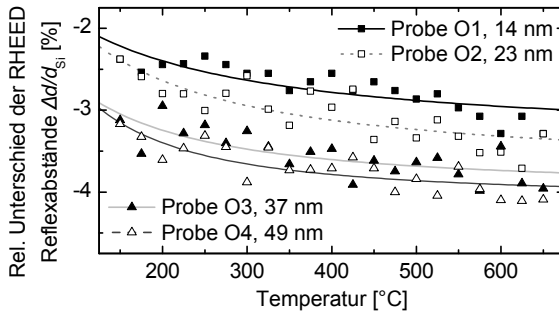


ABB. 6.22: Relative Unterschiede der RHEED-Reflexabstände im Temperaturschritt für eine Wachstumstemperatur von 150 °C und Schichtdicken von 14 nm bis 49 nm. Mit zunehmender Schichtdicke erhöht sich der Relaxationsgrad sowohl nach dem Wachstum als auch nach der Temperung, wobei der grundsätzliche Verlauf sich nicht mit der Schichtdicke ändert.

grads ist bei allen Proben unabhängig von der Schichtdicke identisch. Lediglich die Absolutwerte des Relaxationsgrads erhöhen sich auch hier mit zunehmender Schichtdicke.

Auch $\theta/2\theta$ -Messungen der (004)-Reflexe von Silizium und Germanium der Proben O1 bis O4 in Abbildung 6.23 bestätigen, dass der gemessene Relaxationsgrad mit zunehmender Schichtdicke von $R_{14\text{nm}}^X = 92\% \pm 1\%$ bis $R_{150\text{nm}}^X = 101\% \pm 1\%$ größer wird. Korrigiert um den Einfluss der unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten ergeben sich Relaxationsgrade von $R_{14\text{nm}}^* = 88\% \pm 1\%$ bis $R_{150\text{nm}}^* = 97\% \pm 1\%$ für die höchste Prozesstemperatur von 650 °C. Es treten deutliche Schichtdickenoszillationen auf, die auf eine glatte Oberfläche und eine scharfe Si/Ge-Grenzfläche hinweisen. Die unterschiedlichen Reflexbreiten sind auf die unterschiedlichen Schichtdicken zurückzuführen. Die Relaxationsgrade der Proben SME24 und SME59 sind mit $R_{\text{SME24}}^* = 92\% \pm 1\%$ bzw. $R_{\text{SME59}}^* = 94\% \pm 1\%$ im Rahmen des Fehlers identisch zu den Proben O2 und O4 mit ähnlicher Schichtdicke. Allerdings weisen die Filmreflexe der SME-Proben eine Asymmetrie aufgrund der Siliziuminterdiffusion auf. Dies kann bei den mittels Kohlenstoff-unterstützter Epitaxie hergestellten

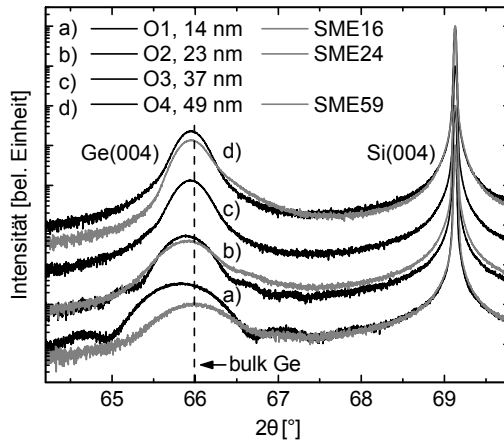


ABB. 6.23: Normierte hochauflösende $\theta/2\theta$ -Messung der (004)-Reflexe von Silizium und Germanium der Proben O1 bis O4 sowie SME16, SME24 und SME59. Der gemessene Relaxationsgrad wird mit zunehmender Schichtdicke (O1 bis O4) größer. Die Winkelpositionen der Schichtreflexe von SME 24 und SME 59 sind identisch zu den korrespondierenden Proben O2 und O4. Bei SME 16 handelt es sich nicht um einen glatten Ge-Film, so dass hier weitere Effekte auftreten. Alle Reflexe der SME-Proben weisen eine Asymmetrie aufgrund von Si-Interdiffusion auf.

Proben nicht festgestellt werden. Bei der Probe SME16 handelt es sich nicht um einen glatten Germaniumfilm [141], so dass hier andere Effekte dazu führen, dass eine Winkelposition erreicht wird, die größer als für Volumenmaterial ist.

Die mittels RHEED und Röntgendiffraktometrie bestimmten Relaxationsgrade sind in Tabelle 6.3 zusammengefasst. Beide Verfahren liefern qualitativ die gleichen Ergebnisse, wobei die aus RHEED bestimmten Werte wieder geringer ausfallen. Durch die Temperung erhöht sich der Relaxationsgrad um etwa 10 % bis 20 %. Mittels Surfactant-modifizierter Epitaxie gewachsene Proben erreichen im Rahmen des Fehlers identische Relaxationsgrade bei gleicher Schichtdicke, wobei erst oberhalb von 20 nm glatte Germaniumfilme vorliegen. Dies zeigt, dass die Relaxationsprozesse

6 Optimierung des Wachstumsprozesses

Probe	Dicke [nm]	$R_{T_G}^R$	$R_{T_G,650^\circ\text{C}}^R$	$R_{T_G,650^\circ\text{C}}^*$
O1	14	55 %	75 %	88 %
O2	23	61 %	84 %	91 %
O3	37	76 %	93 %	94 %
O4	49	79 %	98 %	94 %
O5	120	97 %	-	97 %
SME24	24	-	-	92 %
SME59	59	-	-	94 %
SME151	151	-	-	99 %

TAB. 6.3: Übersicht der Relaxationsgrade nach dem Wachstum bei 150 °C und nach der Temperung bis 650 °C für unterschiedliche Schichtdicken sowie von entsprechenden mittels Surfactant-modifizierter Epitaxie hergestellten Proben.

beim Kohlenstoff-unterstützten Wachstum bei 150 °C und bei SME zwar ähnlich effizient sind, es jedoch gerade zu Beginn des Wachstums deutliche Unterschiede gibt. Mit der Kohlenstoff-unterstützten Epitaxie können sehr dünne Germaniumfilme mit hohem Relaxationsgrad erzeugt werden, wie sie aktuell mit Surfactant-modifizierter Epitaxie nicht möglich sind.

Sämtliche experimentell bestimmten Restverzerrungen ε_{\parallel} für verschiedene Schichtdicken nach dem Wachstum bei Temperaturen von 50 °C und 150 °C sowie nach der Temperung sind in Abbildung 6.24 dargestellt. Die Messwerte mit großen Fehlerbalken wurden aus RHEED-Messungen bestimmt, während die restlichen aus Röntgenmessungen stammen. Mit zunehmender Schichtdicke sinkt die Restverzerrung sowohl nach dem Wachstum bei 50 °C als auch bei 150 °C. Ausführliche Betrachtungen des Relaxationsverhaltens in Abhängigkeit von der Temperatur in [179] zeigen, dass die Restverzerrung als Funktion der Dicke im einfachsten Fall

$$\varepsilon_{\parallel} = B \cdot \frac{1}{t} \quad (6.2)$$

mit einer Konstanten B entspricht, die sämtliche Parameter wie Elastizitätsmodul und Betrag des Burgersvektors der zur Relaxation beitragenden

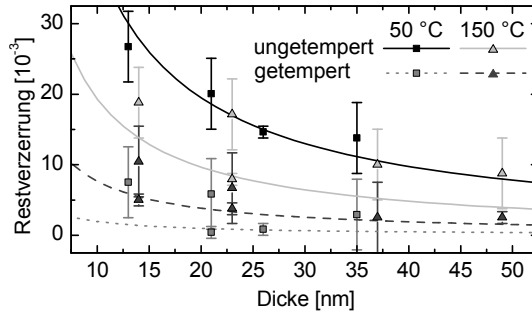


ABB. 6.24: Restverzerrung für verschiedene Schichtdicken nach dem Wachstum bei Temperaturen von 50 °C und 150 °C sowie nach der Temperung. Es wurden sowohl RHEED-Messungen (großer Fehlerbalken) als auch HRXRD-Messungen (kleiner Fehlerbalken) berücksichtigt. Eine Abschätzung aus der Fitkurve prognostiziert vollständige Relaxation ab ca. 30 nm (50 °C) bzw. ab etwa 120 nm (150 °C).

Versetzungen enthält. Der Einfluss der unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten muss in dieser Formel nicht berücksichtigt werden, da die Restverzerrungen im Falle von RHEED sowohl bei Wachstumstemperatur als auch bei 650 °C bestimmt und für die XRD-Messungen bereits um den Einfluss der unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten korrigiert worden sind. Die Ergebnisse der Relaxationsuntersuchungen sind in Abbildung 6.24 zusammengefasst. Aus den nach Formel 6.2 bestimmten Fitkurven lässt sich für eine Wachstumstemperatur von 50 °C eine Schichtdicke von etwa 30 nm abschätzen, ab der nach der Temperung (bei 650 °C) vollständige Relaxation ($R \geq 98,5\%$) vorliegt. Dies konnte durch spätere Experimente (Kapitel 6.5) bestätigt werden. Eine deutlich höhere Schichtdicke von etwa 120 nm ist für Wachstumstemperaturen von 150 °C und anschließender Temperung nötig.

6.4 Einfluss des Kohlenstoffs

Die Menge des verdampften Kohlenstoffs ist nicht nur dafür ausschlaggebend, ob Inselbildung unterdrückt wird, sie hat darüber hinaus auch

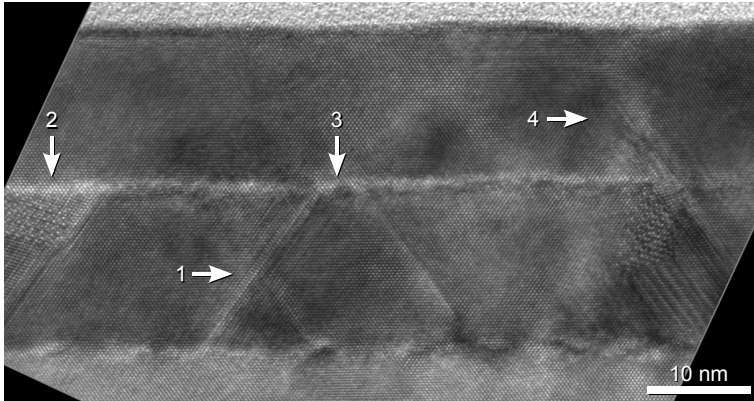


ABB. 6.25: Hochauflösende TEM-Aufnahme der Probe E1 im Querschnitt. Es sind Stapelfehlern und Zwillingslamellen vorhanden, die mit zunehmender Schichtdicke aufeinander zuwachsen und sich gegenseitig auslöschen können (Pfeil 1). Einige Stapelfehler und Zwillingslamellen enden an der Submonolage Kohlenstoff (Pfeile 2 und 3). Andere werden in ihrem Weiterwachsen nicht vom Kohlenstoff beeinflusst (Pfeil 4).

Einfluss auf das anschließende Germaniumwachstum. Diese Aspekte sollen im Folgenden genauer betrachtet werden. Zum Zeitpunkt der Abgabe dieser Arbeit sind diese Untersuchungen jedoch noch nicht abgeschlossen.

6.4.1 Einfluss auf Defektausbreitung

Bereits bei der $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ -Epitaxie konnte festgestellt werden, dass eingebauter Kohlenstoff die Defektausbreitung verändern kann.[60] Aus diesem Grund wurde der Einfluss der Kohlenstoffzwischenichten sowohl auf die Ausbreitung von Stapelfehlern als auch auf Versetzungen analysiert.

Die hochauflösende TEM-Querschnittsaufnahme von Probe E1 in Abbildung 6.25 zeigt den Einfluss der Kohlenstoffzwischenichten auf Stapelfehler und Zwillingslamellen. Unabhängig vom Kohlenstoff können Stapelfehler mit zunehmender Schichtdicke aufeinander zuwachsen und

sich gegenseitig auslöschen (Pfeil 1).[171] Einige Stapelfehler und Zwillinglamellen setzen sich genau bis zur Kohlenstoffzwischen-schicht fort und enden dort (Pfeile 2 und 3). Andere wiederum werden in ihrem Weiterwachsen nicht vom Kohlenstoff beeinflusst (Pfeil 4). In ganz seltenen Fällen können an der Submonolage Kohlenstoff auch neue Stapelfehler entstehen. Da jedoch die ersten Fälle sehr stark dominieren, nimmt die Stapelfehlerdichte deutlich mit zunehmender Schichtdicke und durch die Kohlenstoffzwischen-schicht ab.

Der Einfluss der Kohlenstoffzwischen-schichten auf Versetzungen wurde mit einer 1,4 μm dicken Probe S1 untersucht, die mit einem optimierten Prozessablauf (siehe Kapitel 6.5) gewachsen wurde. Dabei wurden die Kohlenstoffzwischen-schichten nicht alle bei der selben Temperatur erzeugt. Die erste Kohlenstoffbeschichtung ist bei 50 $^{\circ}\text{C}$ erfolgt, während die folgenden Submonolagen bei einer Substrattemperatur oberhalb von 600 $^{\circ}\text{C}$ verdampft wurden, so dass sich Kohlenstoffcluster bilden konnten. Aus diesem Grund sind hier nur ungleichmäßige Kontraste zu erkennen. Interessanterweise kommt es bei der ersten Kohlenstoffabscheidung auch während der Temperung nicht zu einer vergleichbaren Clusterbildung, so dass hier eine homogene Kohlenstoffverteilung vorliegt, die durch einen gleichmäßigen Kontrast in der TEM-Querschnittsaufnahme in Abbildung 6.26(a) erkennbar ist (unterste gestrichelte Linie).

Die Dunkelfeldaufnahme in Abbildung 6.26(b) zeigt eine Vielzahl von Versetzungen. Es ist zu erkennen, dass ein Großteil der Versetzungen an der Grenzfläche lokalisiert sind, wo das charakteristische Versetzungsnetzwerk vorliegt. Es ist weiterhin erkennbar, dass die Versetzungsdichte im Germaniumfilm mit zunehmender Schichtdicke deutlich abnimmt. Dies liegt vor allem an den eingebrachten Kohlenstoffzwischen-schichten. Die Kohlenstoffdeltas behindern Versetzungen teilweise in ihrer Ausbreitung nach oben, so dass sie parallel zur Oberfläche an der Kohlenstoffzwischen-schicht entlang verlaufen, bis sie diese entweder überwinden können oder auf eine andere Versetzung treffen und eine Versetzungsschleife bilden.

Die erste Kohlenstoffzwischen-schicht hat aufgrund ihrer Gleichmäßigkeit einen deutlicheren Effekt auf die Versetzungsausbreitung als die Kohlenstoffcluster. Allerdings spielt hier auch die im Vergleich höhere Anzahl an

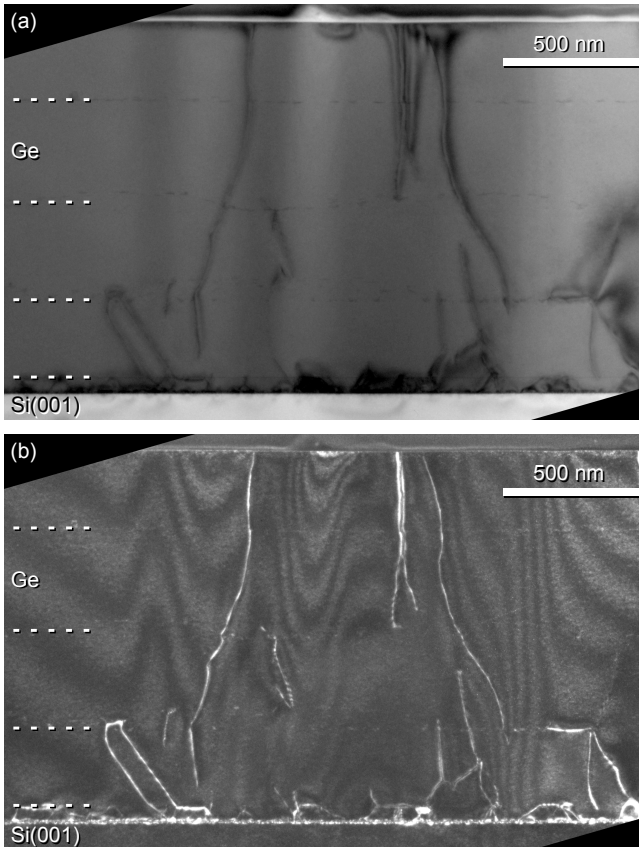


ABB. 6.26: TEM-Aufnahme der Probe S1 im Querschnitt. (a) Hellfeldaufnahme. Die Germaniumschicht ist einkristallin und besitzt eine glatte Oberfläche sowie eine scharfe Si/Ge-Grenzfläche. Es sind Kontraste erkennbar, die parallel zum Substrat verlaufen und dem Kohlenstoff zugeordnet werden können. Diese sind zur besseren Erkennung durch gestrichelte Linien gekennzeichnet. (b) Dunkelfeldaufnahme unter weak-beam Bedingungen. Es existieren starke Kontraste an der Si/Ge-Grenzfläche, die durch das Versetzungsnetzwerk hervorgerufen werden. Die Kohlenstoffdeltas behindern Versetzungen teilweise in ihrer Ausbreitung nach oben. Dieser Effekt ist an der ersten Kohlenstoffzwischen-schicht am ausgeprägtesten.

Defekten eine Rolle. Durch die mehrfache Erzeugung von Kohlenstoffdelta bei tiefen Temperaturen sollte es möglich sein, sehr dünne, defektarme Germaniumfilme mit einem hohen Relaxationsgrad herstellen zu können. Dies soll in zukünftigen Experimenten weiter untersucht werden.

6.4.2 Einfluss auf anschließendes Wachstum

Wenn man sich die RHEED-Analyse des Mehrschrittverfahrens in Abbildung 5.6 in Kapitel 5 anschaut, fällt auf, dass nach dem zweiten Wachstum der relative Unterschied der RHEED-Reflexabstände zum Silizium wieder geringer ist. Dies ist überraschend, da es bedeutet, dass sich die in-plane Gitterkonstante des Germaniums wieder der des Siliziums annähert, also Druckspannung aufgebaut wird. Zunächst könnte man vermuten, dass die Kohlenstoffsubmonolage die Gitterkonstante an der Oberfläche reduziert und somit zu einer Erhöhung der Druckspannung beim anschließenden Germaniumwachstum führt. Allerdings ist der reine Einfluss der Kohlenstoffbeschichtung auf die relativen Unterschiede der RHEED Reflexabstände bei allen durchgeführten Experimenten zu $0\% \pm 0,2\%$ bestimmt worden und somit vernachlässigbar. Eine weitere Möglichkeit zur Verringerung der in-plane Gitterkonstante wäre der sukzessive Einbau der Kohlenstoffsubmonolage in die darauf wachsende Germaniumschicht. Die vorliegenden SIMS- und TEM-Untersuchungen zeigen jedoch, dass der Kohlenstoff weiterhin lokal vorliegt, so dass auch dieser Erklärungsansatz fehlschlägt. Es ist jedoch bekannt, dass Kohlenstoff die Benetzungseigenschaften verändert, was zur Erzeugung von Quantenpunkten ausgenutzt wird.[73] Da aus den RHEED-Analysen hervorgeht, dass mit dem Effekt der induzierten Druckspannung auch eine Aufrauung der Oberfläche stattfindet, ist davon auszugehen, dass auch hier eine vollständige Benetzung beim anschließenden Germaniumwachstum verhindert wird.

Abbildung 6.27 zeigt die aus Abbildung 5.6 bestimmte Veränderung der relativen Unterschiede der RHEED-Reflexabstände durch das Wachstum von 13 nm Germanium in Abhängigkeit der vorherigen Kohlenstoffbeschichtung. Eine Erhöhung der Kohlenstoffmenge führt hierbei zu einer größeren induzierten Druckspannung bei gleichzeitig ausgeprägterer Auf-

6 Optimierung des Wachstumsprozesses

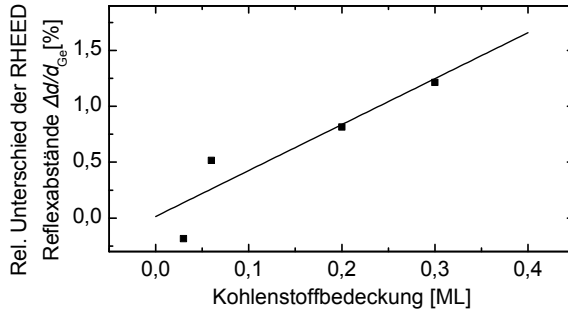


ABB. 6.27: Veränderung der relativen Unterschiede der RHEED-Reflexabstände durch das Wachstum von 13 nm Germanium in Abhängigkeit der vorherigen Kohlenstoffbeschichtung. Eine Erhöhung der Kohlenstoffmenge führt zu einer größeren induzierten Druckspannung (bei gleichzeitig ausgeprägterer Aufrauung der Oberfläche).

rauung der Oberfläche. Allerdings handelt es sich hierbei um nachträgliche Untersuchungen des mehrstufigen Prozesses. Es liegt somit für jede Kohlenstoffbedeckung ein unterschiedlicher Ausgangszustand zugrunde (Schichtdicke und Relaxationsgrad). RHEED-Untersuchungen verschiedener hier nicht gezeigter Proben mit unterschiedlichen Schichtdicken und Relaxationsgraden bestätigen jedoch, dass dieser Aufrauungseffekt beim anschließenden Wachstum hauptsächlich von der Kohlenstoffmenge bestimmt wird. Zusätzlich konnte beobachtet werden, dass die Aufrauung der Oberfläche mit zunehmender Temperatur des anschließenden Wachstums ausgeprägter wird.

Um Relaxationsphänomene vollständig ausschließen zu können, wurde ein Experiment mit Silizium durchgeführt (Probe P). Die saubere 2×1 rekonstruierte Si(001)-Oberfläche wurde mit 0,2 ML Kohlenstoff bei 500 °C beschichtet. Anschließend wurde bei gleicher Temperatur Silizium gewachsen. Abbildung 6.28 zeigt, dass die 2×1 Oberflächenrekonstruktion verschwindet und bereits nach dem Wachstum von 3 nm bis 4 nm eine dreidimensionale Oberfläche vorliegt. Die aus den RHEED-Bildern bestimmte Änderung der Reflexabstände beträgt etwa 1 % und bleibt nach der Umwandlung der Oberfläche konstant.

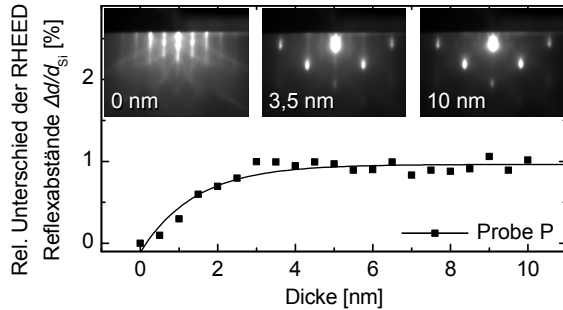


ABB. 6.28: Auf eine mit 0,2 ML Kohlenstoff beschichtete Si(001)-Oberfläche wird Silizium gewachsen (Probe P). Bereits nach dem Wachstum von 3 nm bis 4 nm liegt eine dreidimensionale Oberfläche vor.

Aus diesen Ergebnissen zusammen mit weiteren Experimenten zur Optimierung des Wachstumsprozesses ergeben sich folgende Vermutungen, die jedoch noch weiter abgesichert werden müssen: Die beobachtete Aufrauung der Oberfläche steigt mit zunehmender Kohlenstoffbedeckung und führt zu einer im RHEED sichtbaren Verringerung der in-plane Gitterkonstante beim anschließenden Wachstum. Ein Kohlenstoffeinbau in die Schicht ist aufgrund der geringen Wachstumstemperatur und der SIMS-Ergebnisse nicht plausibel. Somit scheint die Aufrauung für diesen Effekt verantwortlich zu sein. In [180] wurde gezeigt, dass nach dem Einsetzen des dreidimensionalen Wachstums zunächst eine Verringerung der gemessenen in-plane Gitterkonstante einsetzt, bevor sich mit zunehmender Schichtdicke auch die gemessene in-plane Gitterkonstante wieder vergrößert. Ein ähnlicher Effekt könnte hier auftreten. Da die Kohlenstoffbedeckung die Aufrauung direkt beeinflusst, sollte sie so gering wie möglich sein. Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Experimente lassen darauf schließen, dass 0,2 Monolagen Kohlenstoff ausreichen, um eine Inselbildung beim Tempern reproduzierbar zu verhindern.

Des Weiteren konnte gezeigt werden, dass eine Temperung bis 650 °C nicht ausreicht, um eine erneute Glättung der entstandenen Rauheit zu bewirken, wenn das anschließende Wachstum auf der Submonolage Kohlenstoff nicht bei tiefen Temperaturen ($T < 200$ °C) begonnen wird.

6.5 Optimierter Prozessablauf

In Kapitel 6.2 wurde gezeigt, dass die Wachstumstemperatur sowohl einen Einfluss auf die kristalline Perfektion als auch auf den Relaxationsgrad hat. Aus diesem Grund wurde ein optimierter Prozessablauf entwickelt, der einen Tieftemperaturschritt bei 50 °C (hoher Relaxationsgrad, geringe Interdiffusion) mit Wachstum bei höheren Temperaturen von 150 °C bis 650 °C (höhere kristalline Perfektion) kombiniert. Ein anfänglicher Tieftemperaturschritt bei 40 °C würde zwar einen höheren Relaxationsgrad bei dünnen Schichten ermöglichen, allerdings hätte dies auch eine höhere Anzahl an Fehlstapelungen sowie stärkere Si-Interdiffusion im Vergleich zum Wachstum bei 50 °C zur Folge.

Da eine erhöhte Menge Kohlenstoff zu einer Aufrauung der Oberfläche beim anschließenden Wachstum führt, sollte sie so gering wie möglich sein. Es hat sich gezeigt, dass 0,2 Monolagen Kohlenstoff ausreichen, um eine Inselbildung beim Tempern reproduzierbar zu verhindern und gleichzeitig die Defektausbreitung zu reduzieren. Eine weitere Optimierung, die durch die Verwendung vieler Kohlenstoffdeltas eine möglichst geringe Defektdichte erzielt, ist noch nicht abgeschlossen (vgl. Kapitel 6.4.1).

Abbildung 6.29(a) zeigt das Schema des optimierten Prozessablaufs mit dem sich beliebige Schichtdicken ab etwa 15 nm realisieren lassen. Allerdings sind je nach gewünschter Schichtdicke unterschiedliche Teilschritte durchzuführen. Für Schichtdicken von etwa 15 bis 35 nm können durch Germaniumwachstum bei 50 °C mit anschließender Bedeckung mit 0,2 Monolagen Kohlenstoff und Temperung bis 650 °C mit einer Rampe von 25 K/min realisiert werden (Abbildung 6.29(b)). Dabei wird ein hoher Relaxationsgrad $R = 80\% - 100\%$ erreicht. Allerdings liegt nach dem Wachstum keine reine Germaniumoberfläche vor, so dass sich dieses Konzept nicht für alle Anwendungen eignet.

Schichtdicken von etwa 25 bis 70 nm lassen sich durch einen zweistufigen Prozess realisieren, der auf dem eben beschriebenen aufbaut (Abbildung 6.29(c)). Auf die Kohlenstoff-bedeckte Germaniumoberfläche wird in einem zweiten Wachstumsschritt bei 150 °C Germanium gewachsen, das während des Wachstums glatt bleibt. Die Wahl der Schichtdicke im ersten

6.5 Optimierter Prozessablauf

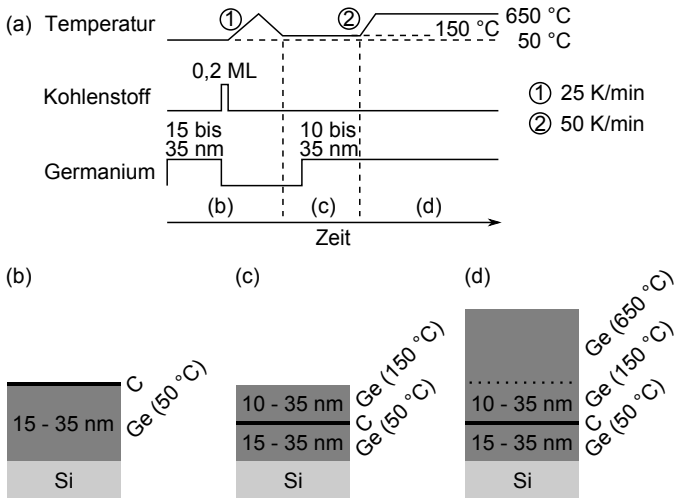


ABB. 6.29: Optimierter Prozessablauf. (a) Schema für beliebige Schichtdicken ab etwa 15 nm. Germaniumfilme von 15 bis 35 nm (b) werden durch Ge-Wachstum bei 50 °C mit 0,2 Monolagen Kohlenstoff auf der Oberfläche und Temperung bis 650 °C hergestellt. Schichtdicken von etwa 25 bis 70 nm (c) lassen sich durch zwei Wachstumszyklen (1. bei 50 °C, 2. bei 150 °C) realisieren und enden nicht mit einer Kohlenstoffbedeckung. Dickere Schichten (d) werden zunächst wie (c) realisiert, wobei die Temperatur anschließend bei geöffnetem Ge-Shutter bis auf 650 °C erhöht wird.

Zyklus beeinflusst sowohl die relative Lage der Kohlenstoffsubmonolage als auch den Relaxationsgrad der Schicht.

Größere Schichtdicken werden realisiert, indem die Temperatur direkt nach dem Wachstum bei 150 °C (Abbildung 6.29(c)) bei geöffnetem Ge-Shutter auf 650 °C erhöht und bis zur gewünschten Dicke weitergewachsen wird (Abbildung 6.29(d)). Aufgrund des bereits hohen Relaxationsgrads vor der Erhöhung der Temperatur, ist kein Einfluss der Rampe auf die strukturellen Eigenschaften der Schicht zu erwarten. Es wurde aus diesem Grund eine steilere Rampe von 50 K/min verwendet. Durch die höhere Substrattemperatur können Schichten mit höherer kristallographischer

6 Optimierung des Wachstumsprozesses

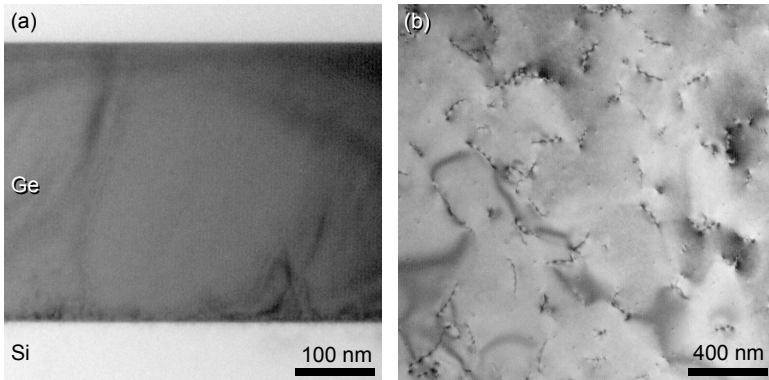


ABB. 6.30: TEM-Untersuchung der 320 nm dicken Probe Q. Die Querschnittsaufnahme (a) bestätigt, dass der Germaniumfilm eine glatte Oberfläche und eine scharfe Si-/Ge-Grenzfläche aufweist. Die Anzahl der die Oberfläche durchstoßenden Versetzungen konnte aus der Draufsicht (b) zu $n_{TD} = 2 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ bestimmt werden.

Perfektion gewachsen werden. Ein direktes Wachstum bei 650 °C auf die Kohlenstoff-bedeckte Germaniumoberfläche des ersten Zyklus ist nicht möglich, da es hier zur Bildung von Inseln kommt.

Abbildung 6.30(a) zeigt die TEM-Querschnittsaufnahme der Probe Q, die nach dem beschriebenen Verfahren hergestellt wurde und eine Gesamtschichtdicke von 320 nm besitzt. Es ist zu erkennen, dass der Germaniumfilm eine glatte Oberfläche und eine scharfe Si-/Ge-Grenzfläche aufweist. Die Anzahl der die Oberfläche durchstoßenden Versetzungen konnte aus TEM-Untersuchungen in der Draufsicht (Abbildung 6.30(b)) zu $n_{TD} = 2 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ bestimmt werden. Der durch Röntgendiffraktometriemessungen bestimmte Relaxationsgrad beträgt $R^X = 103 \% \pm 1 \%$, so dass sich ein um die thermische Ausdehnung korrigierter Relaxationsgrad bei der höchsten Prozesstemperatur von $R^* = 99 \% \pm 1 \%$ ergibt und somit vollständige Relaxation vorliegt. Die aus einem ω -Scan bestimmte Halbwertsbreite $\beta_{mess} = 371 \text{ arcsec}$ entspricht einer Versetzungsdichte von $n_D = 6 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2} \pm 3 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$, die etwas geringer als die aus TEM bestimmte ist.

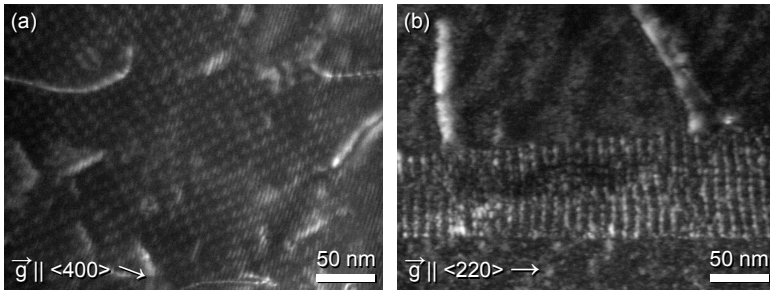


ABB. 6.31: TEM-Untersuchung der Si/Ge-Grenzfläche der Probe Q. Die Draufsicht im Dunkelfeld unter weak-beam Bedingungen (a) zeigt ein sehr regelmäßiges Versetzungsnetzwerk in $[\bar{1}10]$ - und $[110]$ -Richtung. Dies wird durch die Abbildung der Grenzfläche in $[\bar{1}10]$ -Richtung durch Kippung der Proben im Dunkelfeld unter weak-beam Bedingungen (b) um 25° um die im Bild horizontale $[110]$ -Achse bestätigt. Der Abstand der vorliegenden vollständigen Stufenversetzungen beträgt ca. 10 nm.

Das Versetzungsnetzwerk an der Grenzfläche wurde unter unterschiedlichen Abbildungsbedingungen analysiert. Die Draufsicht im Dunkelfeld unter weak-beam Bedingungen in Abbildung 6.31(a) zeigt ein Versetzungsnetzwerk mit sehr hoher Regelmäßigkeit. Dies lässt sich durch die Abbildung der Grenzfläche durch Kippung der Probe im Dunkelfeld unter weak-beam Bedingungen um 25° um die im Bild horizontale $[110]$ -Achse bestätigen. Der Abstand der vorliegenden vollständigen Stufenversetzungen beträgt ca. 10 nm.

Der optimierte Prozessablauf ist somit geeignet, relaxierte Germaniumfilme mit beliebigen Schichtdicken ab etwa 15 nm direkt auf Si(001) Substraten zu wachsen.

7 Dotierung und Temperaturstabilität

Um den Einfluss der Dotierung auf den Wachstumsprozess zu analysieren, wurde die Probe R mithilfe des optimierten Wachstumsprozesses gewachsen. Der 440 nm dicke Germaniumfilm ist durch Ko-Verdampfen homogen mit Bor dotiert. Der durch Röntgendiffraktometriemessungen bestimmte Relaxationsgrad beträgt $R^X = 104 \% \pm 1 \%$, so dass sich ein um die thermische Ausdehnung korrigierter Relaxationsgrad bei der höchsten Prozesstemperatur von $R^* = 100 \% \pm 1 \%$ ergibt und somit vollständige Relaxation vorliegt. Die aus einem ω -Scan bestimmte Halbwertsbreite von $\beta_{mess} = 444 \text{ arcsec}$ entspricht einer Versetzungsdichte von $n_D = 1 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2} \pm 5 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$. Die Ergebnisse sind somit vergleichbar mit denen der 320 nm dicken intrinsischen Probe Q. Die *in situ* Bor-Dotierung hat somit keinen Einfluss auf den Wachstums- und Relaxationsprozess, sowie es auch schon von der Surfactant-modifizierten Epitaxie bekannt ist.[181]

Um den Einfluss der Kohlenstoffsubmonolagen auf die Dotierung zu untersuchen, wurde die Probe S1 mithilfe des optimierten Wachstumsprozesses gewachsen, die abwechselnd Bor-dotierte und intrinsische Germaniumschichten enthält (Abbildung 7.1). Die Bor-dotierten Germaniumschichten sind hierfür jeweils mit 0,2 Monolagen Kohlenstoff beschichtet worden, um den Einfluss des Kohlenstoffs auf die Bor-Diffusion untersuchen zu können. Die Bor-Dotierung wurde von Schicht zu Schicht reduziert und die Gesamtdicke beträgt 1,4 μm .

Aus Röntgenuntersuchungen ergibt sich ein Relaxationsgrad von $R^X = 104 \% \pm 1 \%$ bzw. korrigiert um die unterschiedliche thermische Ausdehnung von $R^* = 100 \% \pm 1 \%$. Es liegt somit wie zu erwarten vollständige Relaxation vor. Die aus einem ω -Scan bestimmte Halbwertsbreite von $\beta_{mess} = 288 \text{ arcsec}$ entspricht einer Versetzungsdichte von etwa $n_D = 4 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2} \pm 2 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$.

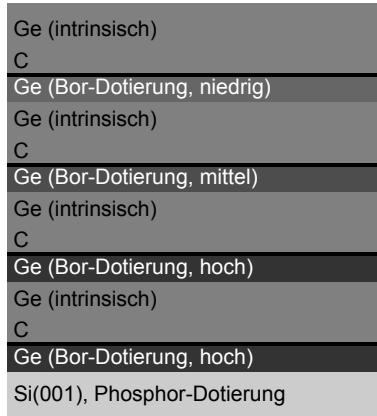


ABB. 7.1: Schematischer Aufbau der Probe S1. Auf Si(001) wurden abwechselnd B-dotierte Ge-Schichten, C-Submonolagen und intrinsische Ge-Schichten gewachsen. Die Dotierkonzentration wurde von Schicht zu Schicht reduziert.

Mit Sekundärionenmassenspektroskopie wurden Konzentrationsprofile von Silizium, Germanium, Kohlenstoff und Bor aufgenommen. Um eine bestmögliche Auflösung zu erhalten, wurden drei Messungen durchgeführt. Durch die Kombination der Profile erhält man nun die vollständige Elementverteilung in hoher Tiefenauflösung, wie sie in Abbildung 7.2 dargestellt ist.

Aus der Simulation des Kurvenverlaufs von Silizium und Germanium (vgl. Kapitel 2.5) lässt sich Diffusionslänge für Silizium in Germanium zu $L = 6,6$ nm ermitteln. Hieraus lässt sich für den relevanten Temperaturbereich von 625 °C bis 650 °C mit der Zeit $T = 21780$ s eine Diffusionskonstante von $D = 2,0 \cdot 10^{-17}$ cm²/s bestimmen, die zwischen den Diffusionskonstanten von Surfactant-modifizierter Epitaxie mit geringer und hoher Sb-Bedeckung liegt.[128] Die Peakformen des Kohlenstoffprofils sind nicht identisch, was auf die ungleichmäßige Verteilung zurückzuführen ist. Die maximale Borkonzentration beträgt $9 \cdot 10^{19}$ cm⁻³ Es gibt keine Hinweise auf Bor- und Kohlenstoffdiffusion.

7 Dotierung und Temperaturstabilität

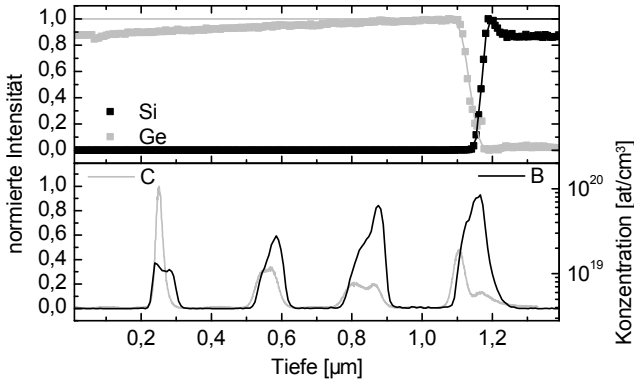


ABB. 7.2: SIMS-Untersuchungen der Probe S1. (Oben) Untersuchung der Interdiffusion von Silizium in Germanium. Zusätzlich zu den Messwerten sind die Simulationskurven des Verlaufs eingezeichnet. Die daraus bestimmte Diffusionskonstante von $D = 2,0 \cdot 10^{-17} \text{ cm}^2/\text{s}$ liegt zwischen den Diffusionskonstanten von Surfactant-modifizierter Epitaxie mit geringer und hoher Sb-Bedeckung. (Unten) Kohlenstoffverteilung und Borkonzentration. Die C-Peakformen sind nicht identisch, was auf die ungleichmäßige Verteilung des Kohlenstoffs zurückzuführen ist. Es gibt keine Hinweise auf Bor- und Kohlenstoffdiffusion.

Um den Einfluss der Kohlenstoffzwischen-schichten auf die Ausdiffusion von Bor zu untersuchen, wurden einzelne Stücke auf einem Siliziumsubstrat in die Präparationskammer der DCA S1000 eingeschleust und getempert. Da für diese Kammer noch keine Temperaturkalibration durchgeführt wurde, wurde zunächst ein Stückchen bei einer Heizertemperatur von nominell $900 \text{ }^\circ\text{C}$ eine Stunde lang erhitzt. Der Druck während der Temperung betrug $p < 1 \cdot 10^{-7} \text{ mbar}$. Aufgrund der drastischen Veränderung der Oberfläche durch diesen Prozess lag die Proben-temperatur zumindest kurzzeitig oberhalb der Schmelztemperatur von Ge von $937,2 \text{ }^\circ\text{C}$ [182]. Aus diesem Grund wurde für jede weitere Probe die Heizertemperatur reduziert, bis bei der Temperung das Erreichen der Schmelztemperatur ausgeschlossen werden konnte. Die nominelle Temperatur betrug $850 \text{ }^\circ\text{C}$. Für diese Probe S2 wurden ebenfalls die oben beschriebenen SIMS-Messungen durchgeführt.

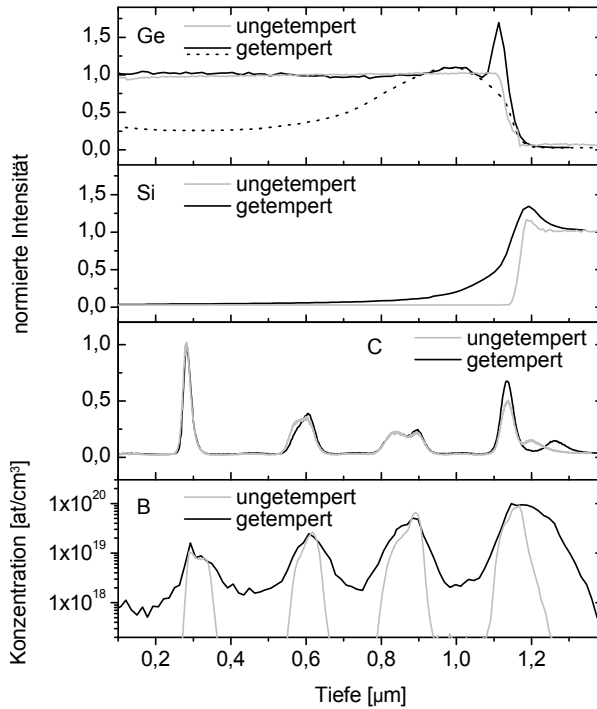


ABB. 7.3: SIMS-Untersuchungen der Probe S2 (getempert) und Vergleich mit S1 (ungetempert). Aufgrund von Oberflächenrauheiten ist der Ge-Verlauf (gestrichelt) nicht konstant bis zur Grenzfläche. Es ist eine starke Eindiffusion von Si ins Ge ($D = 4,4 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2/\text{s}$) zu erkennen, während die Kohlenstoffprofile unverändert sind. Borddiffusion fand einzig an der Si/Ge-Grenzfläche statt. Die unterschiedlichen Peakbreiten der B-Verteilung sind durch unterschiedliche Messauflösungen bedingt.

7 Dotierung und Temperaturstabilität

In Abbildung 7.3 sind die SIMS-Profile der getemperten Probe S2 sowie der ungetemperten Probe S1 dargestellt. Aufgrund von Oberflächenveränderungen der Probe, die später diskutiert werden, wurde die Probe S2 mit einem geringeren Messradius untersucht. Dies hat zur Folge, dass sich Oberflächenrauheiten unterschiedlich auf die Verläufe auswirken. Dieser Einfluss ist bei Germanium besonders deutlich sichtbar, so dass hier für die Probe S2 zwei Verläufe von unterschiedlichen Massezahlen gezeigt sind. Die schwarze Kurve spiegelt den konstanten Germaniumverlauf korrekt wieder, kann jedoch den Gradienten nahe der Si/Ge-Grenzfläche nicht korrekt abbilden. Die gestrichelte Linie hingegen bildet das Grenzflächenprofil korrekt ab (komplementär zum Si-Profil) weist jedoch einen nicht konstanten Verlauf bis zur Oberfläche auf. Aus der Kombination der Messkurven lässt sich zusammen mit der Siliziumkurve eine starke Interdiffusion von Si ins Ge feststellen. Die Diffusionskonstante lässt sich mit $L = 40 \text{ nm}$ und $t = 3600 \text{ s}$ zu $D = 4,4 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2/\text{s}$ berechnen. Der Siliziumverlauf weist genau auf Höhe der ersten Kohlenstoffsubmonolage eine Steigungsänderung auf, so dass von einer leicht abschwächenden Wirkung auf die Interdiffusion ausgegangen werden kann. Die Temperung hat keinen Einfluss auf die Kohlenstoffprofile. Da die Borddiffusion in Ge um bis zu fünf Größenordnungen geringer als in Si ausfällt [183], findet eine ausgeprägte Borddiffusion nahe der Grenzfläche und ins Siliziumsubstrat, jedoch nicht innerhalb des Germaniums statt. Die unterschiedlichen Peakbreiten der Borverteilung sind einzig durch die unterschiedlichen Messauflösungen bedingt.

Ein weiterer interessanter Effekt konnte bei der Temperung im UHV beobachtet werden. Auch unterhalb der Schmelztemperatur kommt es zur Desorption von Germanium, die mehrere Mikrometer breite Krater in der Schicht erzeugt. In Abbildung 7.4(a) ist eine Rasterelektronenmikroskopieaufnahme der Probe S2 in der Draufsicht gezeigt. Die Kraterränder laufen vorzugsweise entlang von $\langle 110 \rangle$ Richtungen. Die Kraterdichte beträgt $3 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-2}$ und ist somit niedriger als die Dichte der die Oberfläche durchstoßenden Versetzungen. Im Querschnitt in Abbildung 7.4(b) ist zu erkennen, dass die Kraterränder nicht gleichmäßig verlaufen. Insgesamt sind drei unterschiedlich stark ausgeprägte Stufen

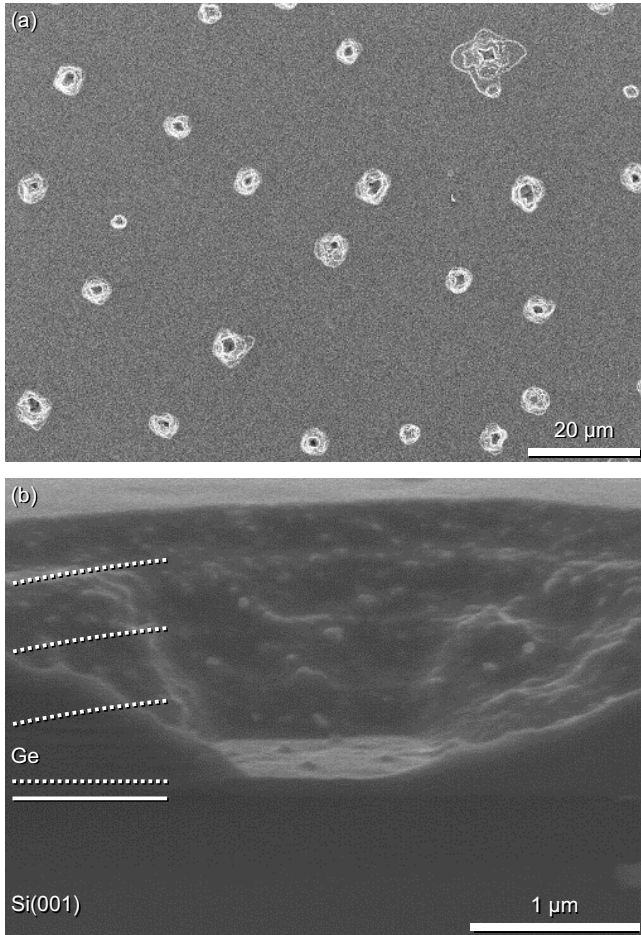


ABB. 7.4: REM-Aufnahmen der Probe S2 nach der Temperung bei 850 °C für 60 Minuten. (a) In der Draufsicht sind Krater mit einer Dichte von $3 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-2}$ zu erkennen. Die Kraterränder folgen kristallographischen Hauptrichtungen. (b) Im Querschnitt sind unterschiedlich stark ausgeprägte Stufen zu erkennen, die mit der Lage der Kohlenstoffsubmonolagen korrelieren. Die Krater reichen nicht bis zur Si/Ge-Grenzfläche (durchgezogene Linie) sondern enden am untersten Kohlenstoffdelta.

7 Dotierung und Temperaturstabilität

zu erkennen, die mit der Lage der Kohlenstoffsubmonolagen (durch gestrichelte Linien gekennzeichnet) korrelieren. Die Krater reichen nicht bis zur Si/Ge-Grenzfläche (durchgezogene Linie). Aus vorherigen TEM-Untersuchungen in Kapitel 6.4.1 ist bekannt, dass die Gleichmäßigkeit der ersten Kohlenstoffsubmonolage deutlich höher ist, als bei den weiteren drei. Der Kohlenstoff scheint hier ein weiteres Abdampfen der darunter liegenden Germaniumschicht zu verhindern.

Die hier vorgestellten Untersuchungen belegen, dass der Kohlenstoff auch bei hohen Temperaturen nicht zur Diffusion in Germanium neigt. Es kommt zu starker Interdiffusion von Si ins Ge, die durch die Kohlenstoffzwischen-schichten abgeschwächt wird. Im vermischten Bereich nahe der Grenzfläche kommt es aufgrund der höheren Diffusionskonstante von Bor in Silizium zu einer starken Ausdiffusion ins Substrat. Darüber hinaus konnte keine Bordiffusion festgestellt werden. Der Kohlenstoff verringert gleichzeitig die Desorption von Ge bei der Temperung nahe des Schmelzpunkts.

8 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein neuer Prozess zum Wachstum von Germanium auf Silizium (001)-Substraten entwickelt. Durch die Kombination von Tieftemperaturepitaxie gefolgt von der Beschichtung mit einer Submonolage Kohlenstoff und einer anschließenden Temperung, können vollständig relaxierte, glatte Germaniumfilme erzeugt werden. Der zunächst sehr komplexe Mehrstufenprozess wurde im Rahmen dieser Arbeit optimiert und dabei der Einfluss verschiedener Prozessparameter analysiert. Hierbei wurde der Prozessablauf weitestgehend vereinfacht und dabei die Kohlenstoffmenge minimiert, um Einflüsse auf die elektrischen Eigenschaften zu begrenzen.

Der Einfluss der Wachstumstemperatur ist für einen großen Bereich untersucht worden. Während es bei 40 °C bereits nach weniger als zwei Monolagen zu einer Beschichtung mit amorphem Material kommt, führt ein Wachstum bei 50 °C zu einer Aufrauung der Oberfläche, die mit zunehmender Schichtdicke zur Bildung von amorphen Bereichen führt. Gleichzeitig reichen auch kristalline Bereiche bis zur Oberfläche. Eine Erhöhung der Wachstumstemperatur auf 100 °C verhindert die Aufrauung während des Wachstums weitestgehend und ab 150 °C bis 200 °C tritt sie nicht mehr auf, so dass die wachsende Schicht auch mit zunehmender Schichtdicke glatt und kristallin bleibt. Ab 250 °C schlägt das Wachstum sehr schnell in irreversible Inselbildung um. Es ist somit ein Temperaturbereich $T_G < 250$ °C für die Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie geeignet.

Der Einfluss der anschließenden Temperung wurde für drei Wachstumstemperaturen genauer analysiert. Bei 40 °C kommt es zur Beschichtung mit amorphem Germanium, das während der Temperung kristallisiert, wobei der Kohlenstoff die Inselbildung unterdrückt. Der Relaxationsgrad steigt durch die Ausbildung von Versetzungen exponentiell und erreicht

seinen Maximalwert bereits ab etwa 450 °C. Beim Wachstum bei 50 °C kommt es zur Aufrauung der Oberfläche. Der Relaxationsgrad steigt exponentiell mit der Temperatur und erreicht sein Maximum bei etwa 200 °C. Dies geschieht durch die Kristallisation bei gleichzeitiger Ausbildung von Versetzungen, die bei Temperaturen zwischen 150 °C und 450 °C ein Versetzungsnetzwerk bilden. Anschließend kommt es zur Glättung der Oberfläche. Der bei 150 °C gewachsene Film bleibt durchgehend glatt und weist bereits nach dem Wachstum ein Versetzungsnetzwerk auf. Der Relaxationsgrad erhöht sich langsam und erreicht bei 650 °C sein Maximum.

Grundsätzlich steigt der Relaxationsgrad nach dem Wachstum mit zunehmender Wachstumstemperatur an. Aufgrund des erhöhten Relaxationsgrads nach dem Wachstum ist mit zunehmender Wachstumstemperatur eine geringere Restspannung in der Schicht gespeichert. Je geringer aber die Restspannung ist, desto größer ist die Aktivierungsenergie für weitere Relaxation, so dass niedrigere Wachstumstemperaturen zu höheren Relaxationsgraden nach der Temperung führen.

Eine Erhöhung der Schichtdicke führt zu einer Erhöhung des maximal erreichten Relaxationsgrads. Dabei ist der grundsätzliche Verlauf der Relaxation nicht schichtdickenabhängig sondern charakteristisch für eine bestimmte Wachstumstemperatur. Die für vollständige Relaxation nötige Schichtdicke nimmt mit höherer Wachstumstemperatur zu und beträgt etwa 30 nm (Wachstum bei 50 °C) bzw. 120 nm (Wachstum bei 150 °C).

Aus den durchgeführten Experimenten konnte geschlossen werden, dass eine Mindestmenge von 0,2 Monolagen Kohlenstoff nötig sind, um reproduzierbar Inselbildung bei der Temperung zu unterbinden. Der auf der Oberfläche vorliegende Kohlenstoff beeinflusst das nachfolgende Wachstum, so dass es hier zu einer Aufrauung der Oberfläche kommt, die erst durch eine weitere Temperung geglättet wird. Weiterhin konnte gezeigt werden, dass die Kohlenstoffzwischenschichten sowohl die Ausbreitung von Versetzungen als auch von Stapelfehlern und Zwillingslamellen reduziert und somit zu einer Verringerung der Defektdichte an der Oberfläche führt. Die Untersuchung der oberen Grenze für die Menge des verwendeten Kohlenstoffs für eine maximale Reduzierung der Defektausbreitung bei

gleichzeitiger Handhabbarkeit der auftretenden Oberflächenaufrauung ist ebenso noch nicht abgeschlossen wie die Optimierung des Prozessablaufs unter Verwendung vieler Kohlenstoffdeltas zur maximalen Reduzierung der Dichte von Durchstoßversetzungen. Die bisherige Optimierung zielte auf eine möglichst geringe Nutzung von Kohlenstoff um die Eigenschaften des Germaniumfilms möglichst nicht zu verändern. In wie weit die Kohlenstoffdeltas die elektrischen und optischen Eigenschaften der Germaniumfilme beeinflussen, ist Schwerpunkt zukünftiger Untersuchungen. Die *in situ* Dotierung mit Bor hat keinen Einfluss auf die strukturellen Eigenschaften der Schicht und beeinflusst den Wachstumsprozess nicht. Es konnten Dotierungen im Bereich von $9 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ demonstriert werden. Durch Temperversuche konnte gezeigt werden, dass die Kohlenstoff- und Borprofile im Germanium temperaturstabil sind. Lediglich eine erwartete Ausdiffusion von Bor ins Silizium konnte festgestellt werden. Darüber hinaus scheint die Siliziuminterdiffusion durch Kohlenstoffsubmonolagen abgeschwächt zu werden.

Vergleichende Untersuchungen von Proben, die mittels Surfactant-modifizierter Epitaxie gewachsen wurden belegen, dass die Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie bei 150 °C identische Ergebnisse in Bezug auf den Relaxationsgrad der Schicht für die untersuchten Schichtdicken von etwa 25 nm bis 150 nm liefert. Röntgenuntersuchungen bestätigen jedoch, dass die Halbwertsbreiten der ω -Messungen und somit die Defektdichten der SME-Proben größer sind. Während Germaniumfilme mit Schichtdicken um 15 nm mit Relaxationsgraden von fast 90 % mittels Kohlenstoff-unterstützter Epitaxie hergestellt werden konnten, liegen bei SME-Proben mit nominell gleicher Dicke keine glatten Schichten vor.

Die Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie bietet somit die Möglichkeit durch gezielte Wahl der Wachstumsparameter relaxierte Germaniumfilme mit beliebigen Schichtdicken direkt auf Si(001) Substraten zu wachsen.

A Anhang

Im Folgenden wird eine Übersicht der Wachstumsparameter sowie der wichtigsten Messwerte der in dieser Arbeit besprochenen Proben gegeben.

Probe	T_G [°C]	Schichtdicke [nm]	R_{T_G, T_A}^* [%]	n_D^{XRD} [cm ⁻²]
SME16	650	16	- ^a	-
SME24	650	24	92	$2 \cdot 10^{10}$
SME59	650	59	94	$1 \cdot 10^{10}$
SME151	650	151	99	$4 \cdot 10^9$

^a keine glatte Schicht

TAB. A.1: Probenübersicht - Surfactant-modifizierte Epitaxie

A Anhang

Probe	Zyklen	T_G [°C]	Kohlenstoff [ML] ^a	T_A [°C]	Schichtdicke [nm]
A1	5	50	0,3/0,2/0,06/0,03	650	65 (5x13 ^a)
A2	6	50	0,3/0,2/0,06/0,03	650	155 (5x13+90 ^a)
B	2	50	-	650	26 (2x13 ^a)
C	1	50	-	650	65 (5x13 ^a)
D	5	50	0,3/0,2/0,06/0,03	650 ^b	65 (5x13 ^a)
E1	2	40	0,3/0,2	650	32 (2x16 ^a)
E2	3	40	0,3/0,2	650	110 (2x20+70 ^a)
F	1	50	0,3	650	21
G	1	100	0,3	650	19
H	1	150	0,3	650	23
I	1	200	0,3	650	17
J	1	250	0,3	650	20 ^a
K	1	300	0,3	650	20 ^a
L	1	400	0,3	650	20 ^a
M1	1	50	0,3	-	26
M2	1	50	0,3	150	26
M3	1	50	0,3	450	26
M4	1	50	0,3	650	26
N	1	150	0,3	-	19
O1	1	150	0,3	650	14
O2	1	150	0,3	650	23
O3	1	150	0,3	650	37
O4	1	150	0,3	650	49
O5	1	150	-	-	120
P	2	500	0,2	-	40 (2x10 ^a)
Q	2	50/150	0,2	650	320 (40+280 ^a)
R	2	50/150	0,2	650	440 (50+390 ^a)
S1	5	50/150	0,2	650	1400

^a nominell

^b einzelne Temperung nach dem letzten Zyklus

TAB. A.2: Probenübersicht - Herstellung

Probe	R_{TG}^R [%]	R_{TG}^* [%]	$R_{TG,TA}^R$ [%]	$R_{TG,TA}^*$ [%]	n_D^{XRD} [cm ⁻²]	n_{TD}^{TEM} [cm ⁻²]
A1	36 ^a	-	82 ^a	100	$4 \cdot 10^9$	$1 \cdot 10^{11}$
A2	-	-	-	100	$7 \cdot 10^9$	-
B	-	-	-	-	$5 \cdot 10^9$	-
C	-	-	-	-	$8 \cdot 10^9$	-
D	-	-	-	-	$2 \cdot 10^{10}$	-
E1	-	-	99	103	$6 \cdot 10^9$	-
E2	-	-	-	-	$2 \cdot 10^{10}$	-
F	52	-	86	99	$4 \cdot 10^9$	-
G	-	-	-	95	$1 \cdot 10^9$	-
H	59	-	84	91	$2 \cdot 10^9$	-
I	-	-	-	87	-	-
J	-	-	-	71	$2 \cdot 10^9$	-
K	-	-	-	75	$7 \cdot 10^9$	-
L	-	-	-	-	-	-
M1	-	65	-	-	-	-
M2	-	65	-	91	-	-
M3	-	65	-	96	$6 \cdot 10^9$	-
M4	-	65	-	98	$5 \cdot 10^9$	$3 \cdot 10^9$
N	-	81	-	-	$4 \cdot 10^9$	-
O1	55	-	75	88	-	-
O2	59	-	84	91	$4 \cdot 10^9$	-
O3	76	-	94	94	$9 \cdot 10^9$	-
O4	79	-	98	94	$9 \cdot 10^9$	-
O5	-	89	-	97	$3 \cdot 10^9$	-
P	-	-	-	-	-	-
Q	-	-	-	99	$6 \cdot 10^8$	$2 \cdot 10^9$
R	-	-	-	100	$1 \cdot 10^9$	-
S1	-	-	-	100	$4 \cdot 10^8$	-

^a Relaxationsgrad nach dem ersten Zyklus

TAB. A.3: Probenübersicht - Relaxationsgrad und Versetzungsdichten

Abbildungsverzeichnis

2.1	Oberflächenprozesse	7
2.2	Wachstumsmodi	8
2.3	Spannungszustände der Heteroepitaxie	9
2.4	Versetzen	11
3.1	Entstehung der RHEED-Beugungsbilder	17
3.2	RHEED Muster	18
3.3	Relaxationsuntersuchung mit RHEED	19
3.4	Bragg-Bedingung	20
3.5	Aufbau des Diffraktometers	21
3.6	$\theta/2\theta$ -Messung	22
3.7	ω -Messung	23
3.8	Reziproke Gitterkarte	25
3.9	Reflektometrie-Messung	26
3.10	Funktionsweise eines Rasterkraftmikroskops	28
3.11	Unterschiedliche TEM-Abbildungsbedingungen	29
3.12	Schema Sekundärionenmassenspektroskopie	31
4.1	Aufbau der DCA S1000	35
4.2	Aufbau der VG 80 S	36
4.3	Homogenität der Germaniumrate	40
4.4	Homogenität der Siliziumrate	41
4.5	Transformation der Oberflächenrekonstruktion durch C	42
4.6	Kohlenstoffeinbau in Silizium	43
4.7	Homogenität der Kohlenstoffrate	45
4.8	Transformation der Oberflächenrekonstruktion durch B	46
4.9	Homogenität der Borrate	47
4.10	Antimonrate	48

4.11	Temperaturkalibration	49
5.1	Übersicht über den Wachstumsprozess	50
5.2	TEM-Aufnahme im Querschnitt (A1)	51
5.3	TEM Aufnahmen der Si/Ge-Grenzfläche (A1)	52
5.4	Reziproke Gitterkarte des Ge($\bar{2}24$)-Reflexes (A1)	53
5.5	RHEED-Analyse der Relaxation der (A1)	54
5.6	Rel. Unterschiede der RHEED-Reflexabstände (A1 und A2)	56
5.7	Stufenprofil zur Diffusion	57
5.8	SIMS-Untersuchungen (A2)	58
5.9	Zyklisches Wachstum ohne Kohlenstoff (B)	59
5.10	Wachstum einer dickeren Schicht ohne Kohlenstoff (C)	60
5.11	Zyklisches Wachstum mit einer einzelnen Temperung (D)	61
6.1	RHEED nach dem Germaniumwachstum	63
6.2	Einfluss der Temperung auf RHEED-Abstände	65
6.3	RHEED nach der Temperung	66
6.4	AFM nach der Temperung	67
6.5	Rel. Unterschiede der RHEED-Reflexabstände (E1)	69
6.6	Norm. $\theta/2\theta$ -Messung des (004)-Reflex (E1)	70
6.7	HRTEM-Querschnittsaufnahme (E1)	71
6.8	TEM-Untersuchung der Si/Ge-Grenzfläche (E1)	72
6.9	SIMS-Untersuchungen (E2)	73
6.10	Rel. Unterschiede der RHEED-Reflexabstände (F)	74
6.11	Norm. $\theta/2\theta$ -Messung des (004)-Reflex (M1 bis M4)	76
6.12	TEM-Aufnahmen im Querschnitt (M1 bis M4)	78
6.13	AFM nach der Temperung	79
6.14	TEM-Untersuchung der Si/Ge-Grenzfläche (M1 bis M4)	80
6.15	Rel. Unterschiede der RHEED-Reflexabstände (H)	81
6.16	Norm. $\theta/2\theta$ -Messung des (004)-Reflex (N und H)	82
6.17	HRTEM-Querschnittsaufnahme (N und H)	83
6.18	TEM-Untersuchung der Si/Ge-Grenzfläche (N und H)	84
6.19	RHEED-Reflexabstände unterschiedlicher Wachstumstemp.	85
6.20	Norm. $\theta/2\theta$ -Messung des Ge(004)-Reflex (E1, F und H)	88
6.21	ω -Messung des Ge(004)-Reflex (E1, F, H und SME24)	90

6.22	RHEED-Reflexabstände unterschiedlicher Schichtdicken	92
6.23	Norm. $\theta/2\theta$ -Messung des (004)-Reflex (O1 bis O4 + SME)	93
6.24	Restverzerrung nach Wachstum und Temperung	95
6.25	HRTEM-Querschnittsaufnahme (E1)	96
6.26	TEM-Aufnahme im Querschnitt (S)	98
6.27	RHEED-Reflexabstände abhängig der Kohlenstoffmenge	100
6.28	RHEED-Reflexabstände von Si abh. der Kohlenstoffmenge	101
6.29	Schema des optimierten Prozessablaufs	103
6.30	TEM-Untersuchung (R)	104
6.31	TEM-Untersuchung der Si/Ge-Grenzfläche (R)	105
7.1	Aufbau der Probe S1	107
7.2	SIMS-Profile der Si, Ge, C und B-Verteilung der Probe S1	108
7.3	SIMS-Profile der Si, Ge, C und B-Verteilung (S1 und S2)	109
7.4	REM-Aufnahmen der Probe S2	111

Tabellenverzeichnis

4.1	El. Konstanten in Abhängigkeit des C-Gehalts	44
6.1	Relaxationsgrade in Abh. der Wachstumstemperatur . . .	89
6.2	Defektdichten in Abh. der Wachstumstemperatur	91
6.3	Relaxationsgrade in Abhängigkeit der Schichtdicken . . .	94
A.1	Probenübersicht - Surfactant-modifizierte Epitaxie	117
A.2	Probenübersicht - Herstellung	118
A.3	Probenübersicht - Relaxationsgrad und Versetzungsdichten	119

Literaturverzeichnis

- [1] WINKLER, C.: Germanium, Ge, ein neues, nichtmetallisches Element. In: *Berichte der deutschen chemischen Gesellschaft* 19 (1886), Nr. 1, S. 210–211. <http://dx.doi.org/10.1002/cber.18860190156>
- [2] BARDEEN, J. ; BRATTAIN, W.: The Transistor, A Semi-Conductor Triode. In: *Physical Review* 74 (1948), Nr. 2, S. 230–231. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.74.230>
- [3] RIORDAN, M. ; HODDESON, L.: *Crystal fire: The birth of the information age*. 1st Edition. New York : Norton, 1997. – ISBN 978-0393041248
- [4] TANENBAUM, M. ; VALDES, L. B. ; BUEHLER, E. ; HANNAY, N. B.: Silicon n-p-n Grown Junction Transistors. In: *Journal of Applied Physics* 26 (1955), Nr. 6, S. 686. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1722071>
- [5] KILBY, J. S.: *Miniaturized Electronic Circuits*, US 3138743, Patent, angemeldet: 06.02.1959: erteilt: 23.06.1964
- [6] NOYCE, R. N.: *Semiconductor Device-And-Lead Structure*, US 2981877, Patent, angemeldet: 30.07.1959: erteilt: 25.04.1961
- [7] HUMMEL, R. E.: *Understanding materials science: History, properties, applications*. 2nd Edition. New York : Springer, 2004. – ISBN 0-387-20939-5
- [8] UYANAGI, K. ; TAKAHASHI, S. ; USAGAWA, T. ; UMEMOTO, Y. ; TSUKADA, T.: *Heterojunction bipolar transistor*, US 4683487, Patent, angemeldet: 06.11.1985: erteilt: 28.07.1987

- [9] TEMKIN, H. ; BEAN, J. C. ; ANTREASYAN, A. ; LEIBENGUTH, R.: $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ strained-layer heterostructure bipolar transistors. In: *Applied Physics Letters* 52 (1988), Nr. 13, S. 1089. <http://dx.doi.org/10.1063/1.99220>
- [10] TATSUMI, T. ; HIRAYAMA, H. ; AIZAKI, N.: Si/Ge_{0.3}Si_{0.7}/Si heterojunction bipolar transistor made with Si molecular beam epitaxy. In: *Applied Physics Letters* 52 (1988), Nr. 11, S. 895. <http://dx.doi.org/10.1063/1.99265>
- [11] OSTEN, H. J. ; KNOLL, D. ; HEINEMANN, B. ; RÜCKER, H. ; TILLACK, B.: Carbon doped SiGe heterojunction bipolar transistors for high frequency applications. <http://dx.doi.org/10.1109/BIPOL.1999.803538>. In: *Proceedings of the 1999 Bipolar/BiCMOS Circuits and Technology Meeting*. Piscataway and N.J. : Institute of Electrical and Electronics Engineers, 1999. – ISBN 0-7803-5712-4, S. 109–116
- [12] MOORE, G. E.: Cramming more components onto integrated circuits. In: *Electronics* 38 (1965), Nr. 8, S. 114
- [13] CHENG, B. ; CAO, M. ; RAO, R. ; INANI, A. ; VANDE VOORDE, P. ; GREENE, W. M. ; STORK, J. M. C. ; ZHIPING Y. ; ZEITZOFF, P. M. ; WOO, J. C. S.: The impact of high- κ gate dielectrics and metal gate electrodes on sub-100 nm MOSFETs. In: *IEEE Transactions on Electron Devices* 46 (1999), Nr. 7, S. 1537–1544. <http://dx.doi.org/10.1109/16.772508>
- [14] *The International Technology Roadmap for Semiconductors (ITRS) 2011: Process Integration, Devices, and Structures (PIDS)*. <http://www.itrs.net/Links/2011ITRS/2011Chapters/2011PIDS.pdf>
- [15] PRINCE, M.: Drift Mobilities in Semiconductors. I. Germanium. In: *Physical Review* 92 (1953), Nr. 3, S. 681–687. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.92.681>
- [16] MORIN, F.: Lattice-Scattering Mobility in Germanium. In: *Physical Review* 93 (1954), Nr. 1, S. 62–63. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.93.62>

- [17] ROSENBERG, J. J.: VA-8 Germanium MISFETs Exhibiting Low Interface State Density Using Ge_3N_4 Gate Insulator. In: *IEEE Transactions on Electron Devices* 30 (1983), Nr. 11, S. 1602. <http://dx.doi.org/10.1109/T-ED.1983.21396>
- [18] ROSENBERG, J. J. ; MARTIN, S. C.: Self-aligned germanium MOSFETs using a nitrided native oxide gate insulator. In: *IEEE Electron Device Letters* 9 (1988), Nr. 12, S. 639–640. <http://dx.doi.org/10.1109/55.20421>
- [19] REINKING, D. ; KAMMLER, M. ; HOFFMANN, N. ; HOEGEN, M. Horn-von ; HOFMANN, K. R.: Ge p-MOSFETs Compatible with Si CMOS-Technology. In: *Solid-State Device Research Conference, 1999. Proceeding of the 29th European Bd. 1, 1999.* – ISBN 2–86332–245–1, S. 300–303
- [20] LEE, M. L. ; LEITZ, C. W. ; CHENG, Z. ; PITERA, A. J. ; LANGDO, T. ; CURRIE, M. T. ; TARASCHI, G. ; FITZGERALD, E. A. ; ANTONIADIS, D. A.: Strained Ge channel p-type metal–oxide–semiconductor field-effect transistors grown on $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ virtual substrates. In: *Applied Physics Letters* 79 (2001), Nr. 20, S. 3344. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1417515>
- [21] DEY, S. ; JOSHI, S. V. ; GARCIA-GUTIERREZ, D. I. ; CHAUMONT, M. ; CAMPION, A. ; JOSÉ-YACAMÁN, M. ; BANERJEE, S. K.: Pure germanium epitaxial growth on thin strained silicon-germanium graded layers on bulk silicon substrate for high-mobility channel metal-oxide-semiconductor field-effect transistors. In: *Journal of Electronic Materials* 35 (2006), Nr. 8, S. 1607–1612. <http://dx.doi.org/10.1007/s11664-006-0205-y>
- [22] KELLY, D. Q. ; WIEDMANN, I. ; DONNELLY, J. P. ; JOSHI, S. V. ; DEY, S. ; BANERJEE, S. K. ; GARCIA-GUTIERREZ, D. I. ; JOSÉ-YACAMÁN, 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. <http://dx.doi.org/10.1063/1.2195008>

- [23] LIU, E.-S. ; KELLY, D. Q. ; DONNELLY, J. P. ; TUTUC, E. ; BANERJEE, S. K.: Negative Differential Resistance in Buried-Channel $\text{Ge}_x\text{C}_{1-x}$ pMOSFETs. In: *IEEE Electron Device Letters* 30 (2009), Nr. 2, S. 136–138. <http://dx.doi.org/10.1109/LED.2008.2009364>
- [24] YU, H.-Y. ; ISHIBASHI, M. ; PARK, J.-H. ; KOBAYASHI, M. ; SARASWAT, K. C.: p-Channel Ge MOSFET by Selectively Heteroepitaxially Grown Ge on Si. In: *Electron Device Letters, IEEE* (2009), Nr. 6, S. 675–677. <http://dx.doi.org/10.1109/LED.2009.2019847>
- [25] NAYFEH, A. ; CHUI, C. O. ; YONEHARA, T. ; SARASWAT, K. C.: Fabrication of high-quality p-MOSFET in Ge grown heteroepitaxially on Si. In: *IEEE Electron Device Letters* 26 (2005), Nr. 5, S. 311–313. <http://dx.doi.org/10.1109/LED.2005.846578>
- [26] PHILIPP, H. ; TAFT, E.: Optical Constants of Germanium in the Region 1 to 10 eV. In: *Physical Review* 113 (1959), Nr. 4, S. 1002–1005. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.113.1002>
- [27] PHILIPP, H. ; TAFT, E.: Optical Constants of Silicon in the Region 1 to 10 eV. In: *Physical Review* 120 (1960), Nr. 1, S. 37–38. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.120.37>
- [28] CASEY, H. C. ; SELL, D. D. ; WECHT, K. W.: Concentration dependence of the absorption coefficient for n- and p-type GaAs between 1.3 and 1.6 eV. In: *Journal of Applied Physics* 46 (1975), Nr. 1, S. 250. <http://dx.doi.org/10.1063/1.321330>
- [29] SZE, S. M.: *Physics of semiconductor devices*. 2nd Edition. New York : Wiley, 1981. – ISBN 0–471–05661–8
- [30] COLACE, L. ; MASINI, G. ; GALLUZZI, F. ; ASSANTO, G. ; CAPELLINI, G. ; DI GASPARE, L. ; PALANGE, E. ; EVANGELISTI, F.: Metal–semiconductor–metal near-infrared light detector based on epitaxial Ge/Si. In: *Applied Physics Letters* 72 (1998), Nr. 24, S. 3175. <http://dx.doi.org/10.1063/1.121584>

- [31] BUCA, D. ; WINNERL, S. ; LENK, S. ; MANTL, S. ; BUCHAL, C.: Metal–germanium–metal ultrafast infrared detectors. In: *Journal of Applied Physics* 92 (2002), Nr. 12, S. 7599. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1519958>
- [32] ANG, K.-W. ; ZHU, S. ; YU, M. ; LO, G.-Q. ; KWONG, D. L.: High-Performance Waveguided Ge-on-SOI Metal-Semiconductor-Metal Photodetectors With Novel Silicon-Carbon (Si:C) Schottky Barrier Enhancement Layer. In: *IEEE Photonics Technology Letters* 20 (2008), Nr. 9, S. 754–756. <http://dx.doi.org/10.1109/LPT.2008.921092>
- [33] CHEN, L. ; LIPSON, M.: Ultra-low capacitance and high speed germanium photodetectors on silicon. In: *Optics Express* 17 (2009), Nr. 10, S. 7901. <http://dx.doi.org/10.1364/OE.17.007901>
- [34] SORIANELLO, V. ; IACOVO, A. d. ; COLACE, L. ; FABBRI, A. ; TORTORA, L. ; BUFFAGNI, E. ; ASSANTO, G.: High responsivity near-infrared photodetectors in evaporated Ge-on-Si. In: *Applied Physics Letters* 101 (2012), Nr. 8, S. 081101. <http://dx.doi.org/10.1063/1.4747213>
- [35] FAMÀ, S. ; COLACE, L. ; MASINI, G. ; ASSANTO, G. ; LUAN, H.-C.: High performance germanium-on-silicon detectors for optical communications. In: *Applied Physics Letters* 81 (2002), Nr. 4, S. 586. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1496492>
- [36] AHN, D. ; HONG, C.-y. ; LIU, J. ; GIZIEWICZ, W. ; BEALS, M. ; KIMERLING, L. C. ; MICHEL, J. ; CHEN, J. ; KÄRTNER, F. X.: High performance, waveguide integrated Ge photodetectors. In: *Optics Express* 15 (2007), Nr. 7, S. 3916. <http://dx.doi.org/10.1364/OE.15.003916>
- [37] OEHME, M. ; WERNER, J. ; KASCHEL, M. ; KIRFEL, O. ; KASPER, E.: Germanium waveguide photodetectors integrated on silicon with MBE. In: *Thin Solid Films* 517 (2008), Nr. 1, S. 137–139. <http://dx.doi.org/10.1016/j.tsf.2008.08.062>

- [38] MICHEL, J. ; LIU, J. ; KIMERLING, L. C.: High-performance Ge-on-Si photodetectors. In: *Nature Photonics* 4 (2010), Nr. 8, S. 527–534. <http://dx.doi.org/10.1038/nphoton.2010.157>
- [39] LI, C. ; XUE, C. ; LIU, Z. ; CHENG, B. ; LI, C. ; WANG, Q.: High-Bandwidth and High-Responsivity Top-Illuminated Germanium Photodiodes for Optical Interconnection. In: *IEEE Transactions on Electron Devices* (2013), S. 1183–1187. <http://dx.doi.org/10.1109/TED.2013.2241066>
- [40] 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. <http://dx.doi.org/10.1109/LPT.2005.848546>
- [41] VIVIEN, L. ; OSMOND, J. ; FÉDÉLI, J.-M. ; MARRIS-MORINI, D. ; CROZAT, P. ; DAMLENCOURT, J.-F. ; CASSAN, E. ; LECUNFF, Y. ; LAVAL, S.: 42 GHz pin Germanium photodetector integrated in a silicon-on-insulator waveguide. In: *Optics Express* 17 (2009), Nr. 8, S. 6252. <http://dx.doi.org/10.1364/OE.17.006252>
- [42] ASSEFA, S. ; XIA, F. ; VLASOV, Y. A.: Reinventing germanium avalanche photodetector for nanophotonic on-chip optical interconnects. In: *Nature* 464 (2010), Nr. 7285, S. 80–84. <http://dx.doi.org/10.1038/nature08813>
- [43] MORSE, M. ; DOSUNMU, O. ; SARID, G. ; CHETRIT, Y.: Performance of Ge-on-Si p-i-n Photodetectors for Standard Receiver Modules. In: *IEEE Photonics Technology Letters* 18 (2006), Nr. 23, S. 2442–2444. <http://dx.doi.org/10.1109/LPT.2006.885623>
- [44] MASINI, G. ; SAHNI, S. ; CAPELLINI, G. ; WITZENS, J. ; GUNN, C.: High-Speed Near Infrared Optical Receivers Based on Ge Waveguide Photodetectors Integrated in a CMOS Process. In: *Advances in Optical Technologies* 2008 (2008), Nr. 2, S. Article ID 196572. <http://dx.doi.org/10.1155/2008/196572>

- [45] BUCKWALTER, J. F. ; ZHENG, X. ; LI, G. ; RAJ, K. ; KRISHNAMOORTHY, A. V.: A Monolithic 25-Gb/s Transceiver With Photonic Ring Modulators and Ge Detectors in a 130-nm CMOS SOI Process. In: *IEEE Journal of Solid-State Circuits* 47 (2012), Nr. 6, S. 1309–1322. <http://dx.doi.org/10.1109/JSSC.2012.2189835>
- [46] HACKBARTH, T. ; HERZOG, H.-J. ; HIEBER, K.-H. ; KÖNIG, U. ; BOLLANI, M. ; CHRASTINA, D. ; KÄNEL, H. v.: Reduced self-heating in Si/SiGe field-effect transistors on thin virtual substrates prepared by low-energy plasma-enhanced chemical vapor deposition. In: *Applied Physics Letters* 83 (2003), Nr. 26, S. 5464. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1636820>
- [47] KASPER, E. ; LYUTOVICH, K.: Strain adjustment with thin virtual substrates. In: *Solid-State Electronics* 48 (2004), Nr. 8, S. 1257–1263. <http://dx.doi.org/10.1016/j.sse.2004.01.009>
- [48] WANG, G. ; LOO, R. ; TAKEUCHI, S. ; SOURIAU, L. ; LIN, J. C. ; MOUSSA, A. ; BENDER, H. ; JAEGER, B. d. ; ONG, P. ; LEE, W. ; MEURIS, M. ; CAYMAX, M. ; VANDERVORST, W. ; BLANPAIN, B. ; HEYNS, M. M.: Fabrication of high quality Ge virtual substrates by selective epitaxial growth in shallow trench isolated Si (001) trenches. In: *Thin Solid Films* 518 (2010), Nr. 9, S. 2538–2541. <http://dx.doi.org/10.1016/j.tsf.2009.09.133>
- [49] PEROVA, T. S. ; WASYLUK, J. ; LYUTOVICH, K. ; KASPER, E. ; OEHME, M. ; RODE, K. ; WALDRON, A.: Composition and strain in thin $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ virtual substrates measured by micro-Raman spectroscopy and x-ray diffraction. In: *Journal of Applied Physics* 109 (2011), Nr. 3, S. 033502. <http://dx.doi.org/10.1063/1.3536508>
- [50] OEHME, M. ; GOLLHOFER, M. ; WIDMANN, D. ; SCHMID, M. ; KASCHTEL, M. ; KASPER, E. ; SCHULZE, J.: Direct bandgap narrowing in Ge LED's on Si substrates. In: *Optics Express* 21 (2013), Nr. 2, S. 2206. <http://dx.doi.org/10.1364/OE.21.002206>

- [51] SÜESS, M. J. ; GEIGER, R. ; MINAMISAWA, R. A. ; SCHIEFLER, G. ; FRIGERIO, J. ; CHRASTINA, D. ; ISELLA, G. ; SPOLENAK, R. ; FAIST, J. ; SIGG, H.: Analysis of enhanced light emission from highly strained germanium microbridges. In: *Nature Photonics* 7 (2013), Nr. 6, S. 466–472. <http://dx.doi.org/10.1038/nphoton.2013.67>
- [52] LUECK, M. R. ; ANDRE, C. L. ; PITERA, A. J. ; LEE, M. L. ; FITZGERALD, E. A. ; RINGEL, S. A.: Dual junction GaInP/GaAs solar cells grown on metamorphic SiGe/Si substrates with high open circuit voltage. In: *IEEE Electron Device Letters* 27 (2006), Nr. 3, S. 142–144. <http://dx.doi.org/10.1109/LED.2006.870250>
- [53] GUPTA, S. ; CHEN, R. ; MAGYARI-KÖPE, B. ; LIN, H. ; YANG, B. ; NAINANI, A. ; NISHI, Y. ; HARRIS, J. S. ; SARASWAT, K. C.: GeSn technology: Extending the Ge electronics roadmap. <http://dx.doi.org/10.1109/IEDM.2011.6131568>. In: *IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM), 2011*. Piscataway and NJ : IEEE, 2011. – ISBN 978–1–4577–0506–9, S. 16.6.1–16.6.4
- [54] GUPTA, S. ; MAGYARI-KÖPE, B. ; NISHI, Y. ; SARASWAT, K. C.: Achieving direct band gap in germanium through integration of Sn alloying and external strain. In: *Journal of Applied Physics* 113 (2013), Nr. 7, S. 073707. <http://dx.doi.org/10.1063/1.4792649>
- [55] WERNER, J. ; OEHME, M. ; SCHMID, M. ; KASCHEL, M. ; SCHIRMER, A. ; KASPER, E. ; SCHULZE, J.: Germanium-tin p-i-n photodetectors integrated on silicon grown by molecular beam epitaxy. In: *Applied Physics Letters* 98 (2011), Nr. 6, S. 061108. <http://dx.doi.org/10.1063/1.3555439>
- [56] SU, S. ; CHENG, B. ; XUE, C. ; WANG, W. ; CAO, Q. ; XUE, H. ; HU, W. ; ZHANG, G. ; ZUO, Y. ; WANG, Q.: GeSn p-i-n photodetector for all telecommunication bands detection. In: *Optics Express* 19 (2011), Nr. 7, S. 6400. <http://dx.doi.org/10.1364/OE.19.006400>
- [57] SAU, J. ; COHEN, M.: Possibility of increased mobility in Ge-Sn alloy system. In: *Physical Review B* 75 (2007), Nr. 4. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.75.045208>

- [58] HAN, G. ; SU, S. ; ZHAN, C. ; ZHOU, Q. ; YANG, Y. ; WANG, L. ; GUO, P. ; WEI, W. ; WONG, C. P. ; SHEN, Z. X. ; CHENG, B. ; YEO, Y.-C.: High-mobility germanium-tin (GeSn) P-channel MOSFETs featuring metallic source/drain and sub-370 °C process modules. <http://dx.doi.org/10.1109/IEDM.2011.6131569>. In: *IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, 2011. Piscataway and NJ : IEEE, 2011. – ISBN 978-1-4577-0506-9, S. 16.7.1–16.7.3
- [59] GUPTA, S. ; VINCENT, B. ; LIN, D. H. C. ; GUNJI, M. ; FIRRINCIELI, A. ; GENCARELLI, F. ; MAGYARI-KÖPE, B. ; YANG, B. ; DOUHARD, B. ; DELMOTTE, J. ; FRANQUET, A. ; CAYMAX, M. ; DEKOSTER, J. ; NISHI, Y. ; SARASWAT, K. C.: GeSn channel nMOSFETs: Material potential and technological outlook. <http://dx.doi.org/10.1109/VLSIT.2012.6242478>. In: *2012 Symposium on VLSI Technology*. Piscataway : IEEE, 2012. – ISBN 978-1-4673-0846-5, S. 95–96
- [60] OSTEN, H. J. ; BUGIEL, E.: Relaxed $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_y\text{C}_y$ buffer structures with low threading dislocation density. In: *Applied Physics Letters* 70 (1997), Nr. 21, S. 2813. <http://dx.doi.org/10.1063/1.119067>
- [61] RITENOUR, A. ; YU, S. ; LEE, M. L. ; LU, Z. ; BAI, W. ; PITERA, A. ; FITZGERALD, E. A. ; KWONG, D. L. ; ANTONIADIS, D. A.: Epitaxial strained germanium p-MOSFETs with HfO_2 gate dielectric and TaN gate electrode. In: *Electron Devices Meeting, 2003. IEDM '03 Technical Digest. IEEE International*, 2003. – ISBN 0-7803-7872-5, S. 18.2.1–18.2.4
- [62] YANG, T. H. ; LUO, G. L. ; CHANG, E. Y. ; HSIEH, Y. C. ; CHANG, C. Y.: Interface-blocking mechanism for reduction of threading dislocations in SiGe and Ge epitaxial layers on Si(100) substrates. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* 22 (2004), Nr. 5, S. L17. <http://dx.doi.org/10.1116/1.1781188>

- [63] LUAN, H.-C. ; LIM, D. R. ; LEE, K. K. ; CHEN, K. M. ; SANDLAND, J. G. ; WADA, K. ; KIMERLING, L. C.: High-quality Ge epilayers on Si with low threading-dislocation densities. In: *Applied Physics Letters* 75 (1999), Nr. 19, S. 2909. <http://dx.doi.org/10.1063/1.125187>
- [64] HARTMANN, J. M. ; ABBADIE, A. ; PAPON, A. M. ; HOLLIGER, P. ; ROLLAND, G. ; BILLON, T. ; FÉDÉLI, J. M. ; ROUVIÈRE, M. ; 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. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1699524>
- [65] OSTEN, H. J. ; BUGIEL, E. ; KLATT, J.: Suppressing of island formation in surfactant-controlled solid phase epitaxy of germanium on Si(100). In: *Applied Physics Letters* 61 (1992), Nr. 16, S. 1918. <http://dx.doi.org/10.1063/1.108363>
- [66] AIZAWA, N. ; HOMMA, Y. ; TOMITA, M.: Effect of surfactant on Ge crystallization on Si in solid phase epitaxy. In: *Surface Science* 376 (1997), Nr. 1-3, S. L419-L423. [http://dx.doi.org/10.1016/S0039-6028\(96\)01586-5](http://dx.doi.org/10.1016/S0039-6028(96)01586-5)
- [67] COPEL, M. ; REUTER, M. ; KAXIRAS, E. ; TROMP, R.: Surfactants in epitaxial growth. In: *Physical Review Letters* 63 (1989), Nr. 6, S. 632-635. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.63.632>
- [68] THORNTON, J. M. C. ; WILLIAMS, A. A. ; MACDONALD, J. E. ; SILFHOUT, R. G. ; FINNEY, M. S. ; NORRIS, C.: Strain relaxation during the surfactant modified epitaxial growth of Ge/Si(001). In: *Surface Science* 273 (1992), Nr. 1-2, S. 1-8. [http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028\(92\)90270-G](http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028(92)90270-G)
- [69] 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 & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films* 12 (1994), Nr. 4, S. 1932. <http://dx.doi.org/10.1116/1.578985>

- [70] HOEGEN, M. Horn-von: Growth of semiconductor layers studied by spot profile analysing low energy electron diffraction – Part II. In: *Zeitschrift für Kristallographie* 214 (1999), Nr. 11, S. 684–721. <http://dx.doi.org/10.1524/zkri.1999.214.11.684>
- [71] 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. <http://dx.doi.org/10.1063/1.2120900>
- [72] 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. <http://dx.doi.org/10.1016/j.tsf.2005.08.410>
- [73] SCHMIDT, O. G. ; LANGE, C. ; EBERL, K. ; KIENZLE, O. ; ERNST, F.: Formation of carbon-induced germanium dots. In: *Applied Physics Letters* 71 (1997), Nr. 16, S. 2340. <http://dx.doi.org/10.1063/1.120072>
- [74] SCHMIDT, O. G. ; EBERL, K. ; AUERSWALD, J.: C-induced Ge dots: enhanced light-output from Si-based nanostructures. In: *Journal of Luminescence* 80 (1998), Nr. 1-4, S. 491–495. [http://dx.doi.org/10.1016/S0022-2313\(98\)00161-6](http://dx.doi.org/10.1016/S0022-2313(98)00161-6)
- [75] LEIFELD, O. ; HARTMANN, R. ; MÜLLER, E. ; KAXIRAS, E. ; KERN, K. ; GRÜTZMACHER, D.: Self-organized growth of Ge quantum dots on Si(001) substrates induced by sub-monolayer C coverages. In: *Nanotechnology* 10 (1999), Nr. 2, S. 122–126. <http://dx.doi.org/10.1088/0957-4484/10/2/303>
- [76] LEIFELD, O. ; BEYER, A. ; GRÜTZMACHER, D. ; KERN, K.: Nucleation of Ge dots on the C-alloyed Si(001) surface. In: *Physical Review B* 66 (2002), Nr. 12. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.66.125312>
- [77] BEYER, A. ; MÜLLER, E. ; SIGG, H. ; STUTZ, S. ; GRÜTZMACHER, D. ; LEIFELD, O. ; ENSSLIN, K.: Size control of carbon-induced Ge quantum dots. In: *Applied Physics Letters* 77 (2000), Nr. 20, S. 3218. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1326033>

- [78] WAKAYAMA, Y. ; GERTH, G. ; WERNER, P. ; GÖSELE, U. ; SOKOLOV, L. V.: Structural transition of Ge dots induced by submonolayer carbon on Ge wetting layer. In: *Applied Physics Letters* 77 (2000), Nr. 15, S. 2328. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1316778>
- [79] DENTEL, D. ; BISCHOFF, J. L. ; KUBLER, L. ; STOFFEL, M. ; CASTELEIN, G.: Influence of a pre-deposited carbon submonolayer on the Ge island nucleation on Si(001). In: *Journal of Applied Physics* 93 (2003), Nr. 9, S. 5069. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1562747>
- [80] SCHMIDT, O. G. ; LANGE, C. ; EBERL, K. ; KIENZLE, O. ; ERNST, F.: C-induced Ge dots: a versatile tool to fabricate ultra-small Ge nanostructures. In: *Thin Solid Films* 336 (1998), Nr. 1-2, S. 248–251. [http://dx.doi.org/10.1016/S0040-6090\(98\)01244-9](http://dx.doi.org/10.1016/S0040-6090(98)01244-9)
- [81] STOFFEL, M. ; SIMON, L. ; BISCHOFF, J. L. ; AUBEL, D. ; KUBLER, L.: MBE Si regrowth on carbon-induced Si(001)-c(4×4) reconstructions studied by RHEED. In: *Thin Solid Films* 380 (2000), Nr. 1-2, S. 259–262. [http://dx.doi.org/10.1016/S0040-6090\(00\)01519-4](http://dx.doi.org/10.1016/S0040-6090(00)01519-4)
- [82] OSTEN, H. J. ; KLATT, J.: In situ monitoring of strain relaxation during antimony-mediated growth of Ge and Ge_{1-y}C_y layers on Si(001) using reflection high energy electron diffraction. In: *Applied Physics Letters* 65 (1994), Nr. 5, S. 630. <http://dx.doi.org/10.1063/1.112253>
- [83] KOLODZEY, J. ; O'NEIL, P. A. ; ZHANG, S. ; ORNER, B. A. ; ROE, K. J. ; UNRUH, K. M. ; SWANN, C. P. ; WAITE, M. M. ; SHAH, S. I.: Growth of germanium-carbon alloys on silicon substrates by molecular beam epitaxy. In: *Applied Physics Letters* 67 (1995), Nr. 13, S. 1865. <http://dx.doi.org/10.1063/1.114358>
- [84] ROE, K. J. ; DASHIELL, M. W. ; KOLODZEY, J. ; BOUCAUD, P. ; LOURTIOZ, J.-M.: Molecular beam epitaxy growth of Ge_{1-y}C_y alloys on Si (100) with high carbon contents. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* 17 (1999), Nr. 3, S. 1301. <http://dx.doi.org/10.1116/1.590745>

- [85] OSTEN, H. J. ; HEINEMANN, B. ; KNOLL, D. ; LIPPERT, G. ; RÜCKER, H.: Effects of carbon on boron diffusion in SiGe: Principles and impact on bipolar devices. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* 16 (1998), Nr. 3, S. 1750. <http://dx.doi.org/10.1116/1.590048>
- [86] ATZMON, Z. ; BAIR, A. E. ; JAQUEZ, E. J. ; MAYER, J. W. ; CHANDRASEKHAR, D. ; SMITH, D. J. ; HERVIG, R. L. ; ROBINSON, McD.: Chemical vapor deposition of heteroepitaxial $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ films on (100)Si substrates. In: *Applied Physics Letters* 65 (1994), Nr. 20, S. 2559. <http://dx.doi.org/10.1063/1.112635>
- [87] SAVAGE, D. E. ; LIU, F. ; ZIELASEK, V. ; LAGALLY, M. G.: Kapitel 2: Fundamental Mechanisms of Film Growth. In: HULL, R. (Hrsg.) ; BEAN, J. C. (Hrsg.): *Germanium silicon: physics and materials*. San Diego [u.a.] : Acad. Press, 1999 (Semiconductors and Semimetals, 56). – ISBN 0-12-752164-X, S. 49-100
- [88] POHL, U. W.: *Epitaxy of Semiconductors: Introduction to physical principles*. Berlin and Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2013. – ISBN 978-3-642-32969-2
- [89] BAUER, E.: Phänomenologische Theorie der Kristallabscheidung an Oberflächen. II. In: *Zeitschrift für Kristallographie* 110 (1958), S. 395-431
- [90] FRANK, F. C. ; MERWE, J. H. van d.: One-Dimensional Dislocations. II. Misfitting Monolayers and Oriented Overgrowth. In: *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 198 (1949), Nr. 1053, S. 216-225. <http://dx.doi.org/10.1098/rspa.1949.0096>
- [91] FRANK, F. C. ; MERWE, J. H. van d.: One-Dimensional Dislocations. I. Static Theory. In: *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 198 (1949), Nr. 1053, S. 205-216. <http://dx.doi.org/10.1098/rspa.1949.0095>
- [92] VOLMER, M. ; WEBER, A.: Keimbildung in übersättigten Gebilden. In: *Zeitschrift für Physikalische Chemie Neue Folge* 119 (1926), S. 277-301

- [93] STRANSKI, I. N. ; KRASTANOW, L.: Zur Theorie der orientierten Ausscheidung von Ionenkristallen aufeinander. In: *Monatshefte für Chemie* 71 (1938), Nr. 1, S. 351–364. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01798103>
- [94] MATTHEWS, J. W. ; BLAKESLEE, A. E. ; MADER, S.: Use of misfit strain to remove dislocations from epitaxial thin films. In: *Thin Solid Films* 33 (1976), Nr. 2, S. 253–266. [http://dx.doi.org/10.1016/0040-6090\(76\)90085-7](http://dx.doi.org/10.1016/0040-6090(76)90085-7)
- [95] PEOPLE, R. ; BEAN, J. C.: Calculation of critical layer thickness versus lattice mismatch for $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ strained-layer heterostructures. In: *Applied Physics Letters* 47 (1985), Nr. 3, S. 322. <http://dx.doi.org/10.1063/1.96206>
- [96] PEOPLE, R. ; BEAN, J. C.: Erratum: Calculation of critical layer thickness versus lattice mismatch for $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ strained-layer heterostructures [Appl. Phys. Lett. 47, 322 (1985)]. In: *Applied Physics Letters* 49 (1986), Nr. 4, S. 229. <http://dx.doi.org/10.1063/1.97637>
- [97] SPIESS, L. ; TEICHERT, G. ; SCHWARZER, R. ; BEHNKEN, H. ; GENZEL, C.: *Moderne Röntgenbeugung: Röntgendiffraktometrie für Materialwissenschaftler, Physiker und Chemiker*. 2., überarbeitete und erweiterte Auflage. Wiesbaden : Teubner, 2008 (Studium). – ISBN 978-3-8351-0166-1
- [98] HULL, R.: Kapitel 3: Misfit Strain and Accommodation in SiGe Heterostructures. In: HULL, R. (Hrsg.) ; BEAN, J. C. (Hrsg.): *Germanium silicon: physics and materials*. San Diego [u.a.] : Acad. Press, 1999 (Semiconductors and Semimetals, 56). – ISBN 0-12-752164-X, S. 101–167
- [99] HOUGHTON, D. C.: Strain relaxation kinetics in $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ heterostructures. In: *Journal of Applied Physics* 70 (1991), Nr. 4, S. 2136. <http://dx.doi.org/10.1063/1.349451>
- [100] TERSOFF, J. ; LEGOUES, F.: Competing relaxation mechanisms in strained layers. In: *Physical Review Letters* 72 (1994), Nr. 22, S. 3570–3573. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.72.3570>

- [101] READ, W. T.: *Dislocations in crystals*. McGraw-Hill, 1953 (International series in pure and applied physics)
- [102] HULL, R. ; BEAN, J. C.: Misfit dislocations in lattice-mismatched epitaxial films. In: *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences* 17 (1992), Nr. 6, S. 507–546. <http://dx.doi.org/10.1080/10408439208244585>
- [103] GOTTSTEIN, G.: *Physical Foundations of Materials Science*. Berlin and Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2004. – ISBN 978–3–642–07271–0
- [104] BORCHARDT-OTT, W.: *Crystallography*. Berlin and Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2012. – ISBN 978–3–642–16451–4
- [105] CLAEYS, C. ; SIMOEN, E.: *Extended Defects in Germanium*. Bd. 118. Berlin and Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2009. – ISBN 978–3–540–85611–5
- [106] KASPER, E. ; LYUTOVICH, K. ; BAUER, M. ; OEHME, M.: New virtual substrate concept for vertical MOS transistors. In: *Thin Solid Films* 336 (1998), Nr. 1-2, S. 319–322. [http://dx.doi.org/10.1016/S0040-6090\(98\)01317-0](http://dx.doi.org/10.1016/S0040-6090(98)01317-0)
- [107] IBACH, H. ; LÜTH, H.: *Festkörperphysik: Einführung in die Grundlagen ; mit 18 Tafeln und 104 Übungen*. 7. Auflage. Berlin and Heidelberg : Springer, 2009 (Springer-Lehrbuch). – ISBN 978–3–540–85794–5
- [108] RÄISÄNEN, J. ; HIRVONEN, J. ; ANTTILA, A.: The diffusion of silicon in germanium. In: *Solid-State Electronics* 24 (1981), Nr. 4, S. 333–336. [http://dx.doi.org/10.1016/0038-1101\(81\)90027-7](http://dx.doi.org/10.1016/0038-1101(81)90027-7)
- [109] SÖDERVALL, U. ; FRIESEL, M.: Diffusion of Silicon and Phosphorus into Germanium as Studied by Secondary Ion Mass Spectrometry. In: *Defect and Diffusion Forum* 143-147 (1997), S. 1053–1058. <http://dx.doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.143-147.1053>

- [110] UPPAL, S. ; 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 in Germanium. In: *MRS Proceedings* 809 (2004). <http://dx.doi.org/10.1557/PROC-809-B8.10>
- [111] 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), Nr. 1-2, S. 90-99. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2004.10.042>
- [112] CLAEYS, C. L. (Hrsg.) ; SIMOEN, E. (Hrsg.): *Germanium-based technologies: From materials to devices*. Amsterdam and London : Elsevier, 2007. – ISBN 0-08-044953-0
- [113] HERNÁNDEZ-CALDERÓN, I. ; HÖCHST, H.: New method for the analysis of reflection high-energy electron diffraction: α -Sn(001) and InSb(001) surfaces. In: *Physical Review B* 27 (1983), Nr. 8, S. 4961-4965. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.27.4961>
- [114] LARSEN, P. K. ; DOBSON, P. J.: *Reflection High-Energy Electron Diffraction and Reflection Electron Imaging of Surfaces*. Bd. 188. Boston and MA : Springer US, 1989. – ISBN 978-1-4684-5582-3
- [115] ICHIMIYA, A. ; COHEN, P. I.: *Reflection high-energy electron diffraction*. Cambridge and U.K and New York : Cambridge University Press, 2004. – ISBN 0521453739
- [116] BRAUN, W.: *Springer tracts in modern physics*. Bd. 154: *Applied RHEED: Reflection high-energy electron diffraction during crystal growth*. Berlin and New York : Springer, 1999. – ISBN 3-540-65199-3
- [117] HENZLER, M. ; GÖPEL, W.: *Oberflächenphysik des Festkörpers*. Stuttgart : Teubner, 1991 (Teubner Studienbücher. Physik). – ISBN 3-519-03047-0
- [118] ASHCROFT, N. W. ; MERMIN, N. D.: *Festkörperphysik*. 3., verb. Aufl. München [u.a.] : Oldenbourg, 2007. – ISBN 9783486582734

- [119] MAES, J. W. ; SCHANNEN, O. F. Z. ; TROMMEL, J. ; WERNER, K. ; RADELAAR, S. ; BALK, P.: Detection of Misfit Strain Relaxation in MBE Grown $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ Films by Dynamic Monitoring of Rheed Diffraction Features. In: *MRS Proceedings* 263 (1992). <http://dx.doi.org/10.1557/PROC-263-427>
- [120] OSTEN, H. J. ; BUGIEL, E. ; ZAUMSEIL, P.: Antimony-mediated growth of epitaxial $\text{Ge}_{1-y}\text{C}_y$ layers on Si(001). In: *Journal of Crystal Growth* 142 (1994), Nr. 3-4, S. 322–326. [http://dx.doi.org/10.1016/0022-0248\(94\)90339-5](http://dx.doi.org/10.1016/0022-0248(94)90339-5)
- [121] TOLAN, M.: *Springer tracts in modern physics*. Bd. 148: *X-ray scattering from soft-matter thin films: Materials science and basic research*. Berlin and New York : Springer, 1999. – ISBN 978-3-540-65182-6
- [122] BRAGG, W. H. ; BRAGG, W. L.: The Reflection of X-rays by Crystals. In: *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 88 (1913), Nr. 605, S. 428–438. <http://dx.doi.org/10.1098/rspa.1913.0040>
- [123] MCSKIMIN, H. J. ; ANDREATCH, P.: Elastic Moduli of Germanium Versus Hydrostatic Pressure at 25.0 °C and –195.8 °C. In: *Journal of Applied Physics* 34 (1963), Nr. 3, S. 651. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1729323>
- [124] AYERS, J. E.: The measurement of threading dislocation densities in semiconductor crystals by X-ray diffraction. In: *Journal of Crystal Growth* 135 (1994), Nr. 1-2, S. 71–77. [http://dx.doi.org/10.1016/0022-0248\(94\)90727-7](http://dx.doi.org/10.1016/0022-0248(94)90727-7)
- [125] BRUKER AXS GMBH: *D8 X-ray Diffractometer User's Manual Vol. III*. 2001
- [126] 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

- [127] ZAUMSEIL, P.: Characterization of the perfection of $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ layers on silicon by x-ray methods. In: *Journal of Crystal Growth* 129 (1993), Nr. 3-4, S. 537–542. [http://dx.doi.org/10.1016/0022-0248\(93\)90488-I](http://dx.doi.org/10.1016/0022-0248(93)90488-I)
- [128] WIETLER, T. F.: *Surfactant-modifizierte Epitaxie für Ge/Si-Heterobauelemente*. Hannover, Leibniz Universität Hannover, Dissertation, 2010
- [129] PARRATT, L. G.: Surface Studies of Solids by Total Reflection of X-Rays. In: *Physical Review* 95 (1954), Nr. 2, S. 359–369. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.95.359>
- [130] ALFORD, T. L. ; FELDMAN, L. C. ; MAYER, J. W.: *Fundamentals of Nanoscale Film Analysis*. New York and London : Springer, 2007. – ISBN 0–387–29260–8
- [131] BOWEN, W. R. ; HILAL, N.: *Atomic force microscopy in process engineering: An introduction to AFM for improved processes and products*. 1st Edition. Amsterdam : Butterworth-Heinemann, 2009 (Butterworth-Heinemann / IChemE series). – ISBN 978–1–85617–517–3
- [132] EATON, P. J. ; WEST, P.: *Atomic force microscopy*. Oxford and New York : Oxford University Press, 2010. – ISBN 978–0–19–957045–4
- [133] MAGONOV, S. N. (Hrsg.) ; WHANGBO, M.-H (Hrsg.): *Surface analysis with STM and AFM: Experimental and theoretical aspects of image analysis*. Weinheim and New York : VCH, 1996. – ISBN 3–527–29313–2
- [134] SCHRODER, D. K.: *Semiconductor material and device characterization*. 3rd Edition. Hoboken and N.J : IEEE Press and Wiley, 2006. – ISBN 978–0–471–73906–7
- [135] BINNIG, G. ; QUATE, C. F.: Atomic Force Microscope. In: *Physical Review Letters* 56 (1986), Nr. 9, S. 930–933. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.56.930>
- [136] TAGANTSEV, A. K. ; CROSS, L. E. ; FOUSEK, J.: *Domains in Ferroic Crystals and Thin Films*. New York : Springer, 2010. – ISBN 978–1–4419–1416–3

- [137] REIMER, L. ; KOHL, H.: *Transmission electron microscopy: Physics of image formation*. 5th Edition. New York and NY : Springer, 2008. – ISBN 978-0-387-40093-8
- [138] WILLIAMS, D. B. ; CARTER, C. B.: *Transmission electron microscopy: A textbook for materials science*. 2nd Edition. New York [u.a.] : Plenum Press, 2009. – ISBN 978-0-387-76502-0
- [139] EGERTON, R. F.: *Physical principles of electron microscopy: An introduction to TEM, SEM, and AEM*. New York : Springer Science+Business Media, 2005. – ISBN 0-387-25800-0
- [140] CZICHOS, H. (Hrsg.) ; SAITO, T. (Hrsg.) ; SMITH, L. (Hrsg.): *Springer Handbook of Metrology and Testing*. Berlin and Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2011. – ISBN 978-3-642-16640-2
- [141] MÖLLERS, M.: *Hauchdünne Ge-Pufferschichten für relaxierte SiGe Schichten auf Si(001) Substraten*. Hannover, Leibniz Universität Hannover, Studienarbeit, 2012
- [142] DOUCETTE, L. D. ; CUNHA, M. P. ; LAD, R. J.: Precise orientation of single crystals by a simple x-ray diffraction rocking curve method. In: *Review of Scientific Instruments* 76 (2005), Nr. 3, S. 036106. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1867392>
- [143] WIBERG, E. ; HOLLEMAN, A. F.: *Lehrbuch der anorganischen Chemie*. 81.-90., sorgfältig rev., verb. und stark erw. Aufl. von Egon Wiberg. Berlin and New York : De Gruyter, 1976. – ISBN 3-11-005962-2
- [144] SCHWEIZER, S.: *Dynamisches Verhalten von Silizium-Elektroden in Fluor-haltigen Elektrolyten*. Cottbus, Brandenburgische Technische Universität Cottbus, Dissertation, 2004
- [145] OKORN-SCHMIDT, H. F.: Characterization of silicon surface preparation processes for advanced gate dielectrics. In: *IBM Journal of Research and Development* 43 (1999), Nr. 3, S. 351. <http://dx.doi.org/10.1147/rd.433.0351>

- [146] SPIERINGS, G. A. C. M.: Wet chemical etching of silicate glasses in hydrofluoric acid based solutions. In: *Journal of Materials Science* 28 (1993), Nr. 23, S. 6261–6273. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01352182>
- [147] NIWANO, M. ; KAGEYAMA, J.-i. ; KURITA, K. ; KINASHI, K. ; TAKAHASHI, I. ; MIYAMOTO, N.: Infrared spectroscopy study of initial stages of oxidation of hydrogen-terminated Si surfaces stored in air. In: *Journal of Applied Physics* 76 (1994), Nr. 4, S. 2157. <http://dx.doi.org/10.1063/1.357627>
- [148] GRUNDNER, M. ; JACOB, H.: Investigations on hydrophilic and hydrophobic silicon (100) wafer surfaces by X-ray photoelectron and high-resolution electron energy loss-spectroscopy. In: *Applied Physics A Solids and Surfaces* 39 (1986), Nr. 2, S. 73–82. <http://dx.doi.org/10.1007/BF00616822>
- [149] LIPPERT, G.: *Verunreinigung in der Siliziummolekularstrahlepitanie*. Egelsbach and Frankfurt (Main) and Washington : Hänsel-Hohenhausen, 1995. – ISBN 3826710568
- [150] VIG, J. R.: UV/ozone cleaning of surfaces. In: *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films* 3 (1985), Nr. 3, S. 1027. <http://dx.doi.org/10.1116/1.573115>
- [151] MEYERSON, B. S. ; HIMPSEL, F. J. ; URAM, K. J.: Bistable conditions for low-temperature silicon epitaxy. In: *Applied Physics Letters* 57 (1990), Nr. 10, S. 1034. <http://dx.doi.org/10.1063/1.103557>
- [152] ISHIZAKA, A. ; SHIRAKI, Y.: Low Temperature Surface Cleaning of Silicon and Its Application to Silicon MBE. In: *Journal of The Electrochemical Society* 133 (1986), Nr. 4, S. 666. <http://dx.doi.org/10.1149/1.2108651>
- [153] TABE, M.: Etching of SiO₂ Films by Si in Ultra-High Vacuum. In: *Japanese Journal of Applied Physics* 21 (1982), Nr. Part 1, No. 3, S. 534–538. <http://dx.doi.org/10.1143/JJAP.21.534>

- [154] POLK, D. E.: Structural model for amorphous silicon and germanium. In: *Journal of Non-Crystalline Solids* 5 (1971), Nr. 5, S. 365–376. [http://dx.doi.org/10.1016/0022-3093\(71\)90038-X](http://dx.doi.org/10.1016/0022-3093(71)90038-X)
- [155] KOITZSCH, C. ; CONRAD, D. ; SCHEERSCHMIDT, K. ; SCHARMANN, F. ; MASLARSKI, P. ; PEZOLDT, J.: Carbon-induced reconstructions on Si(111) investigated by RHEED and molecular dynamics. In: *Applied Surface Science* 179 (2001), Nr. 1-4, S. 49–54. [http://dx.doi.org/10.1016/S0169-4332\(01\)00262-8](http://dx.doi.org/10.1016/S0169-4332(01)00262-8)
- [156] CIMALLA, V. ; STAUDEN, Th. ; ECKE, G. ; SCHARMANN, F. ; EICHHORN, G. ; PEZOLDT, J. ; SLOBOSHANIN, S. ; SCHAEFER, J. A.: Initial stages in the carbonization of (111)Si by solid-source molecular beam epitaxy. In: *Applied Physics Letters* 73 (1998), Nr. 24, S. 3542. <http://dx.doi.org/10.1063/1.122801>
- [157] OSTEN, H. J. ; KIM, M. ; PRESSEL, K. ; ZAUMSEIL, P.: Substitutional versus interstitial carbon incorporation during pseudomorphic growth of $\text{Si}_{1-y}\text{C}_y$ on Si(001). In: *Journal of Applied Physics* 80 (1996), Nr. 12, S. 6711. <http://dx.doi.org/10.1063/1.363797>
- [158] BERTI, M. ; SALVADOR, D. d. ; DRIGO, A. V. ; ROMANATO, F. ; STANGL, J. ; ZERLAUTH, S. ; SCHÄFFLER, F. ; BAUER, G.: Lattice parameter in $\text{Si}_{1-y}\text{C}_y$ epilayers: Deviation from Vegard's rule. In: *Applied Physics Letters* 72 (1998), Nr. 13, S. 1602. <http://dx.doi.org/10.1063/1.121127>
- [159] KELIRES, P. C.: Short-range order, bulk moduli, and physical trends in c- $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ alloys. In: *Physical Review B* 55 (1997), Nr. 14, S. 8784–8787. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.55.8784>
- [160] MCSKIMIN, H. J.: Measurement of Elastic Constants at Low Temperatures by Means of Ultrasonic Waves—Data for Silicon and Germanium Single Crystals, and for Fused Silica. In: *Journal of Applied Physics* 24 (1953), Nr. 8, S. 988. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1721449>

- [161] KUNC, K. ; BALKANSKI, M. ; NUSIMOVICI, M. A.: Lattice dynamics of several $A^N B^{8-N}$ compounds having the zinblende structure. II. Numerical calculations. In: *physica status solidi (b)* 72 (1975), Nr. 1, S. 229–248. <http://dx.doi.org/10.1002/pssb.2220720125>
- [162] MCSKIMIN, H. J. ; ANDREATCH, P.: Elastic Moduli of Diamond as a Function of Pressure and Temperature. In: *Journal of Applied Physics* 43 (1972), Nr. 7, S. 2944. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1661636>
- [163] PARK, C.-Y. ; ABUKAWA, T. ; KINOSHITA, T. ; ENTA, Y. ; KONO, S.: Low Energy Electron Diffraction and X-Ray Photoelectron Spectroscopy Studies of the Formation of Submonolayer Interfaces of Sb/Si(111). In: *Japanese Journal of Applied Physics* 27 (1988), Nr. Part 1, No. 1, S. 147–148. <http://dx.doi.org/10.1143/JJAP.27.147>
- [164] BAUER, M. ; OEHME, M. ; KASPER, E.: Crystalline to amorphous phase transition in very low temperature molecular beam epitaxy. In: *Materials Science and Engineering: B* 89 (2002), Nr. 1-3, S. 263–268. [http://dx.doi.org/10.1016/S0921-5107\(01\)00777-2](http://dx.doi.org/10.1016/S0921-5107(01)00777-2)
- [165] TETZLAFF, D. ; WIETLER, T. F. ; BUGIEL, E. ; OSTEN, H. J.: Carbon-mediated growth of thin, fully relaxed germanium films on silicon. In: *Applied Physics Letters* 100 (2012), Nr. 1, S. 012108. <http://dx.doi.org/10.1063/1.3675450>
- [166] TETZLAFF, D. ; WIETLER, T. F. ; BUGIEL, E. ; OSTEN, H. J.: Strain relaxation of thin Ge films on Si(001) grown by carbon-mediated epitaxy. In: *Journal of Crystal Growth* 378 (2013), S. 254–258. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2012.12.087>
- [167] MAGIDSON, V. ; REGELMAN, D. V. ; BESERMAN, R. ; DETTMER, K.: Evidence of Si presence in self-assembled Ge islands deposited on a Si(001) substrate. In: *Applied Physics Letters* 73 (1998), Nr. 8, S. 1044. <http://dx.doi.org/10.1063/1.122079>
- [168] EAGLESHAM, D. J. ; CERULLO, M.: Low-temperature growth of Ge on Si(100). In: *Applied Physics Letters* 58 (1991), Nr. 20, S. 2276. <http://dx.doi.org/10.1063/1.104898>

- [169] EAGLESHAM, D. J.: Semiconductor molecular-beam epitaxy at low temperatures. In: *Journal of Applied Physics* 77 (1995), Nr. 8, S. 3597. <http://dx.doi.org/10.1063/1.358597>
- [170] HULL, R. ; BEAN, J. ; WERDER, D. ; LEIBENGUTH, R.: Activation barriers to strain relaxation in lattice-mismatched epitaxy. In: *Physical Review B* 40 (1989), Nr. 3, S. 1681–1684. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.40.1681>
- [171] BUGIEL, E. ; ZAUMSEIL, P. ; LUBNOW, A. ; WEHMANN, H.-H. ; SCHLACHETZKI, A.: Structural Analysis of InP Films Grown on (100)Si Substrates. In: *Physica Status Solidi (a)* 132 (1992), Nr. 1, S. 115–125. <http://dx.doi.org/10.1002/pssa.2211320112>
- [172] JANZEN, A. ; DUMKOW, I. ; HOEGEN, M. Horn-von: Thermal activation of dislocation array formation. In: *Applied Physics Letters* 79 (2001), Nr. 15, S. 2387. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1408599>
- [173] TIMBRELL, P. Y. ; BARIBEAU, J.-M. ; LOCKWOOD, D. J. ; MCCAFREY, J. P.: An annealing study of strain relaxation and dislocation generation in $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ heteroepitaxy. In: *Journal of Applied Physics* 67 (1990), Nr. 10, S. 6292. <http://dx.doi.org/10.1063/1.345146>
- [174] PEROVIC, D. D. ; HOUGHTON, D. C.: Spontaneous nucleation of misfit dislocations in strained epitaxial layers. In: *Physica Status Solidi (a)* 138 (1993), Nr. 2, S. 425–430. <http://dx.doi.org/10.1002/pssa.2211380209>
- [175] LEGOUES, F. ; MOONEY, P. ; TERSOFF, J.: Measurement of the Activation Barrier to Nucleation of Dislocations in Thin Films. In: *Physical Review Letters* 71 (1993), Nr. 3, S. 396–399. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.71.396>
- [176] LEGOUES, F. ; MOONEY, P. ; TERSOFF, J.: Erratum: Measurement of the Activation Barrier to Nucleation of Dislocations in Thin Films [Phys. Rev. Lett. 71, 396 (1993)]. In: *Physical Review Letters* 71 (1993), Nr. 19, S. 3234. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.71.3234>

- [177] 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. <http://dx.doi.org/10.4028/www.scientific.net/SSP.32-33.433>
- [178] TEICHLER, H. ; WILDER, J.: Dislocation and Grain Boundary Energies in Si and Ge from an Anharmonic Bond Charge Model. In: *Journal de Physique III* 7 (1997), Nr. 12, S. 2281-2292. <http://dx.doi.org/10.1051/jp3:1997259>
- [179] CAMMARATA, R. C. ; SIERADZKI, K. ; 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. <http://dx.doi.org/10.1063/1.372001>
- [180] MIKI, K. ; SAKAMOTO, K. ; SAKAMOTO, T.: Rheed Observation of Lattice Relaxation During Ge/Si(O01) Heteroepitaxy. In: *MRS Proceedings* 148 (1989). <http://dx.doi.org/10.1557/PROC-148-323>
- [181] TUREWICZ, P.: *Wachstum und Charakterisierung von p-dotiertem SME-Germanium auf Silizium(100)*. Hannover, Leibniz Universität Hannover, Diplomarbeit, 2009
- [182] HASSION, F. ; THURMOND, C. ; TRUMBORE, F. A.: On the Melting Point of Germanium. In: *Journal of Physical Chemistry* 59 (1955), Nr. 10, S. 1076-1078. <http://dx.doi.org/10.1021/j150532a022>
- [183] MIRABELLA, S. ; SALVADOR, D. d. ; NAPOLITANI, E. ; BRUNO, E. ; PRIOLO, F.: Mechanisms of boron diffusion in silicon and germanium. In: *Journal of Applied Physics* 113 (2013), Nr. 3, S. 031101. <http://dx.doi.org/10.1063/1.4763353>

Publikationsverzeichnis

Im Rahmen dieser Dissertation entstandene Veröffentlichungen

Artikel in Fachzeitschriften

1. TETZLAFF, D. ; WIETLER, T. F. ; BUGIEL, E. ; OSTEN, H. J.: Strain relaxation of thin Ge films on Si(001) grown by carbon-mediated epitaxy. In: *Journal of Crystal Growth* 378 (2013), S. 254. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcryspro.2012.12.087>
2. TETZLAFF, D. ; WIETLER, T. F. ; BUGIEL, E. ; OSTEN, H. J.: Carbon-mediated growth of thin, fully relaxed germanium films on silicon. *Applied Physics Letters* 100 (2012), Nr. 1, S. 012108. <http://dx.doi.org/10.1063/1.3675450>

Konferenzbeiträge

1. TETZLAFF, D. ; WIETLER, T. F. ; BUGIEL, E. ; OSTEN, H. J.: Carbon-mediated Epitaxy of Ge on Si. *NanoDay 2013* (Leibniz Universität Hannover), Hannover (Germany), October 10, 2013.
2. TETZLAFF, D. ; WIETLER, T. F. ; BUGIEL, E. ; OSTEN, H. J.: Influence of growth temperature on strain relaxation of thin Ge films on Si(001) grown by carbon-mediated epitaxy. *8th International Conference on Si Epitaxy and Heterostructures (ICSI 8)*, Fukuoka (Japan), June 2 - 6, 2013.
3. TETZLAFF, D. ; WIETLER, T. F. ; BUGIEL, E. ; OSTEN, H. J.: Strain relaxation of thin Ge films on Si(001) grown by carbon-mediated epitaxy. *17th International Conference on Molecular Beam Epitaxy*, Nara (Japan), September 23 - 28, 2012.

-
4. TETZLAFF, D. ; WIETLER, T. F. ; BUGIEL, E. ; OSTEN, H. J.: Untersuchung der Relaxation bei der Kohlenstoff-unterstützten Epitaxie von Ge auf Si. *Deutscher MBE-Workshop 2012*, Hannover (Germany), September 11 - 12, 2012.
 5. TETZLAFF, D. ; WIETLER, T. F. ; BUGIEL, E. ; OSTEN, H. J.: Carbon-Mediated Growth of Epitaxial Germanium Layers on Silicon. *Deutscher MBE-Workshop 2011*, Berlin(Germany), October 05 - 06, 2011
 6. TETZLAFF, D. ; WIETLER, T. F. ; BUGIEL, E. ; OSTEN, H. J.: Ge-Epitaxie für NIR-Fotodetektoren. *NanoDay 2011* (Leibniz Universität Hannover), Hannover (Germany), September 29, 2011.
 7. TETZLAFF, D. ; WIETLER, T. F. ; BUGIEL, E. ; OSTEN, H. J.: Carbon-Mediated Growth of Epitaxial Germanium Layers on Silicon. *7th International Conference on Si Epitaxy and Heterostructures (ICSI 7)*, Leuven (Belgium), August 28 - September 1, 2011.

Über die Arbeit hinausgehende Veröffentlichungen

Artikel in Fachzeitschriften

1. WIETLER, T. F. ; SCHMIDT, J. ; TETZLAFF, D. ; BUGIEL, E.: Surfactant-mediated epitaxy of silicon germanium films on silicon (001) substrates. *Thin Solid Films*, in press. <http://dx.doi.org/10.1016/j.tsf.2013.08.125>
2. LEMME, M. C. ; GOTTLOB, H. D. B. ; ECHTERMEYER, T. J. ; SCHMIDT, M. ; KURZ, H. ; ENDRES, R. ; SCHWALKE, U. ; CZERNOHORSKY, M. ; TETZLAFF, D. ; OSTEN, H. J.: CMOS Integration of Epitaxial Gd₂O₃. *Journal of Vacuum Science & Technology B* 27 (2009) Nr. 1, S. 258. <http://dx.doi.org/10.1116/1.3054350>

3. CZERNOHORSKY, M. ; TETZLAFF, D. ; BUGIEL, E. ; DARGIS, R. ; OSTEN, H. J. ; GOTTLOB, H. D. B. ; SCHMIDT, M. ; LEMME, M. C. ; KURZ, H.: Stability of Crystalline Gd₂O₃ Thin Films on Silicon during Rapid Thermal Annealing. *Semiconductor Science and Technology* 23 (2008), Nr. 3, S. 035010. <http://dx.doi.org/10.1088/0268-1242/23/3/035010>

Konferenzbeiträge

1. WIETLER, T. F. ; SCHMIDT, J. ; TETZLAFF, D. ; BUGIEL, E.: Surfactant-mediated epitaxy of Silicon Germanium films on Silicon (001) substrates. *8th International Conference on Si Epitaxy and Heterostructures (ICSI 8)*, Fukuoka (Japan), June 2 - 6, 2013.
2. WIETLER, T. F. ; RUHKOPF, J. ; RUGERAMIGABO, E. P. ; TETZLAFF, D. ; KRÜGENER, J. ; BUGIEL, E. ; OSTEN, H. J.: Surfactant-modifizierte Epitaxie von Germanium auf fehlgeneigten Siliziumsubstraten. *Deutscher MBE-Workshop 2011*, Berlin (Germany), October 05 - 06, 2011.
3. WIETLER, T. F. ; RUHKOPF, J. ; RUGERAMIGABO, E. P. ; TETZLAFF, D. ; KRÜGENER, J. ; BUGIEL, E. ; OSTEN, H. J.: Surfactant-Mediated Epitaxy of Germanium on Vicinal Silicon Substrates. *7th International Conference on Si Epitaxy and Heterostructures (ICSI 7)*, Leuven (Belgium), August 28 - September 1, 2011.
4. RUHKOPF, J. ; WIETLER, T. F. ; RUGERAMIGABO, E. P. ; TETZLAFF, D. ; KRÜGENER, J. ; BUGIEL, E. ; OSTEN, H. J.: Surfactant-mediated epitaxy of germanium layers on vicinal silicon substrates. *Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, Dresden (Germany), March 13 - 18, 2011.
5. WIETLER, T. F. ; TUREWICZ, P. ; RUGERAMIGABO, E. P. ; SCHWENDT, D. ; TETZLAFF, D. ; BUGIEL, E. ; HOFMANN, K. R.: P-type Ge films on Si(001) grown by surfactant-mediated epitaxy. *5th International SiGe Technology and Device Meeting (ISTDM 2010)*, Stockholm (Sweden), May 24 - 26, 2010.

-
6. SCHWENDT, D. ; TETZLAFF, D. ; BUGIEL, E. ; OSTEN, H. J. ; GOTTLOB, H. D. B.: Stability of Crystalline Gd₂O₃ Thin Films on Silicon during Post-growth Processing. *3rd International Conference on Signals, Circuits and Systems (SCS'09)*, Djerba (Tunisia), November 6 - 8, 2009. <http://dx.doi.org/10.1109/ICSCS.2009.5414206>

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei einigen Menschen bedanken, die mich während meiner Promotionszeit unterstützt haben:

Ich möchte mich zuallererst bei Professor Hans Jörg Osten für das interessante Thema der Arbeit sowie für die Betreuung und sämtliche Hilfestellungen in dieser Zeit bedanken. Desweiteren bedanke ich mich bei Professor Erich Kasper für die Übernahme des Koreferats. Bei Professor Tobias Wietler möchte ich mich neben der Übernahme des Vorsitzes der Prüfungskommission auch für die vielen konstruktiven Gespräche bedanken.

Dr. Eberhard Bugiel möchte ich für die ausgiebigen TEM-Untersuchungen und anschließenden Diskussionen danken, die viel zum Verständnis der Kohlenstoff-unterstützten Epitaxie beigetragen haben. Professor Andreas Fissel danke ich für die interessanten Diskussionen und Anregungen zur Elektronenbeugung.

Ich bedanke mich bei Dr. Jan Krügener und Dr. Dominik Schwendt für ihre Hilfsbereitschaft sowie die guten Gespräche zum Thema und weit darüber hinaus.

Ich möchte mich auch herzlich bei den technischen Mitarbeitern Guido Glowatzki, Tanja Helmbrecht, Andreas Klatt, Bernd Koch, Andrea Lissel, Hartmut Schwarz und Detlef Zech für die Erfüllung vieler kleiner und großer Arbeiten und Lösung zahlreicher technischer Probleme bedanken.

Abschließend möchte ich meiner Frau Angela und meiner Tochter Nora danken, die mich auch in stressigen Zeiten mit Liebe und Geduld getragen und ertragen haben.

Lebenslauf

Name	Dominic Tetzlaff
geboren am	18. Mai 1982
in	Hannover
seit 10 / 2008	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Materialien und Bauelemente der Elektronik, Leibniz Universität Hannover
09 / 2008	Abschluss als Diplom-Ingenieur Elektrotechnik an der Leibniz Universität Hannover Diplomarbeit: "Beeinflussung des Spannungszustands von kristallinen Halbleiterschichten durch den Einbau von Fremdatomen"
2002 - 2008	Studium der Elektrotechnik an der Leibniz Universität Hannover
2001 - 2002	Zivildienst
06 / 2001	Allgemeine Hochschulreife am Kurt-Schwitters-Gymnasium Misburg, Hannover