

Epitaxie virtueller Germaniumsubstrate für III-V-Halbleiter

Von der Fakultät für Elektrotechnik und Informatik der
Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover genehmigte

Dissertation zur Erlangung des Grades

Doktor der Naturwissenschaften

Dr. rer. nat.

von

M. Sc. (Nanotechnologie) Andreas Grimm

geboren am 15.02.1987

in Heide (Holstein)

Referent: Prof. Dr.-Ing. Tobias Wietler
Koreferent: Prof. Dr. Christoph Tegenkamp
Tag der Promotion: 25.11.2016

Hiermit versichere ich, die vorliegende Arbeit

**Epitaxie virtueller Germaniumsubstrate
für III-V-Halbleiter**

selbständig verfasst zu haben und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt zu haben. Alle wörtlichen und sinngemäß aus veröffentlichten und nicht veröffentlichten Schriften und sonstigen Quellen entnommenen Stellen sind als solche kenntlich gemacht. Weiterhin erkläre ich, dass die Arbeit in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner anderen Prüfbehörde vorgelegen hat.

Hannover, den 26.08.2016

Andreas Grimm

Je mehr sich bei Erforschung der Natur die Erfahrungen und Versuche häufen, desto schwankender werden die Theorien. Es ist aber immer gut sie nicht gleich deswegen aufzugeben. Denn jede Hypothese die gut war, dient wenigstens die Erscheinungen bis auf ihre Zeit gehörig zusammen zu denken und zu behalten. Man sollte die widersprechenden Erfahrungen besonders niederlegen, bis sie sich hinlänglich angehäuft haben um es der Mühe wert zu machen ein neues Gebäude aufzuführen.

Georg Christoph Lichtenberg, 1602 [1]

Kurzfassung

In der vorliegenden Dissertation wird die Integration von Galliumarsenid auf virtuellen Germaniumsubstraten mit und ohne Fehlschnitt untersucht. Zur Herstellung der virtuellen Germaniumsubstrate (VS) werden voll relaxierte Germaniumschichten auf Siliziumsubstraten aufgewachsen. Dazu werden die Surfactant-modifizierte Epitaxie mit Antimon (SME) sowie die Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie (CME) angewendet. Um die Eignung der VS zu beurteilen, wird Galliumarsenid auf die hergestellten VS epitaktisch gewachsen und charakterisiert. Durch die Wahl von VS mit einem Fehlschnitt von 6° zur nächsten $\{111\}$ -Ebene wird die Ausbildung von Antiphasengrenzen an der Galliumarsenid/Germanium-Grenzfläche verhindert.

Die mit der Surfactant-modifizierten Epitaxie hergestellten Germaniumschichten weisen eine Gesamtschichtdicke von 500 nm auf und sind bis auf eine geringe Zugspannung, die durch unterschiedliche thermische Ausdehnung beim Abkühlen hervorgerufen wird, vollständig relaxiert. Um zu gewährleisten, dass die Menge an Antimon, welche nach Prozessende an der Oberfläche verbleibt, so gering wie möglich ist, wird ein zweistufiger Wachstumsprozess basierend auf der SME entwickelt und optimiert. Die nach Wachstumsende dieses Prozesses an der Oberfläche verbliebene Menge an Antimon kann auf weniger als $\frac{1}{100}$ Monolage abgeschätzt werden. Durch eine entsprechende thermische Präparation nach Wachstumsende wird eine überwiegend doppel-atomar gestufte Germaniumoberfläche erreicht, die Voraussetzung für das epitaktische Wachstum von Galliumarsenid ohne Ausbildung von Antiphasengrenzen ist.

Die Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie erlaubt es zwar, virtuelle Germaniumsubstrate, die vollständig relaxiert sind, mit Schichtdicken kleiner 50 nm herzustellen, jedoch konnten keine Wachstumsbedingungen gefunden werden, bei denen sich eine doppel-atomar gestufte Germaniumoberfläche ausbildet.

Das Wachstum von $1\text{ }\mu\text{m}$ dicken Galliumarsenidschichten zeigt die Eignung der VS, die mit der SME hergestellt worden sind. Durch Transmissionselektronenmikroskopie wird der Einfluss des Fehlschnitts nachgewiesen. Im Gegensatz zu den VS ohne Fehlschnitt wird die Ausbildung von Antiphasengrenzen bei den VS mit Fehlschnitt nahezu vollständig verhindert.

Abstract

This dissertation deals with the integration of gallium arsenide on virtual germanium substrates (VS) with and without miscut. VS are made by epitaxial growth of fully relaxed germanium layers on silicon substrates. The germanium layers are either grown by surfactant-mediated epitaxy with antimony (SME) or by carbon-mediated epitaxy. In order to evaluate the suitability of VS, gallium arsenide is grown on them and characterized. By using VS with a miscut of 6° to the next $\{111\}$ -plane the development of antiphase boundaries at the gallium arsenide/germanium interface can be suppressed.

VS grown by surfactant-mediated epitaxy have a germanium layer thickness of 500 nm and are fully relaxed. However, there is a small amount of tensile strain after sample cooling left due to difference in thermal expansion. To make sure that there is as little antimony as possible at the surface, a two step growth process based on SME is introduced and optimized. Thus, after the growth process the amount of residual antimony on the surface is estimated to be less than $\frac{1}{100}$ monolayer. A thermal preparation leads to a predominantly double-atomically stepped germanium surface which is inevitable for antiphase boundary free growth of gallium arsenide.

Employing carbon-mediated epitaxy to grow VS leads to fully relaxed germanium layers with thicknesses less than 50 nm . However, it has not been possible to find appropriate growth conditions that direct to a double-atomic stepped germanium surface.

The epitaxial growth of $1\text{ }\mu\text{m}$ thick gallium arsenide layers shows the potential of VS grown by SME. Transmission electron microscopy reveals an almost antiphase boundary free growth of gallium arsenide on the VS with miscut. The gallium arsenide layers grown on VS without an miscut reveal antiphase boundaries at the gallium arsenide/germanium interface, indicating the effect of the miscut.

Schlagwörter: Germanium, Silizium, Galliumarsenid

keywords: germanium, silicon, gallium arsenide

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Nutzung solarer Strahlungsenergie durch Solarzellen	2
1.2	Auf dem Weg zu Tandemsolarzellen	3
1.3	Wie Tandemsolarzellen auf Silizium-Substraten realisiert werden können	6
1.4	Aufbau der Dissertation	8
2	Grundlagen: Epitaxie	10
2.1	Epitaxie	10
2.1.1	Thermodynamische Beschreibung epitaktischen Wachstums	11
2.1.2	Oberflächenrekonstruktion	12
2.2	Heteroepitaxie dünner Schichten	13
2.2.1	Ge auf Si	13
2.2.2	GaAs auf Ge	15
2.3	Molekularstrahlepitaxie	17
3	Grundlagen: Stand der Technik	18
3.1	Epitaxie von relaxierten Ge-Schichten auf Silizium	18
3.1.1	Surfactant-modifizierte Epitaxie	21
3.1.2	Parameterraum für die Herstellung virtueller Ge-Substrate mit SME	22
3.1.3	Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie	24
3.2	Epitaxie von GaAs auf (virtuellen) Ge-Substraten	24
3.2.1	Vizinale Oberflächen	25
3.2.2	Epitaxie von GaAs auf Ge	27
4	Charakterisierungsmethoden	30
4.1	Elektronenbeugung (RHEED)	30
4.2	Röntgenbeugung (XRD)	34
4.2.1	Theta-2Theta-Messung	35
4.2.2	Omega-Messung	37
4.2.3	Omega-2Theta-Messungen und reziproke Gitterkarten	39
4.2.4	Röntgenreflektometrie (XRR)	40
4.3	Elektronenmikroskopie (SEM/TEM)	40
4.3.1	Rasterelektronenmikroskopie (SEM)	41
4.3.2	Transmissionselektronenmikroskopie (TEM)	42

4.4	Rastersondenmethoden (STM/AFM)	44
4.4.1	Rastertunnelmikroskopie (STM)	44
4.4.2	Rasterkraftmikroskopie (AFM)	45
4.5	Spektroskopische Verfahren	46
4.5.1	Röntgenphotoelektronenspektroskopie (XPS)	47
4.5.2	Photolumineszenz-Spektroskopie	50
5	Herstellung virtueller Substrate für die III-V-Epitaxie	51
5.1	Probenpräparation	51
5.1.1	MBE-Systeme	51
5.1.2	Kalibration	54
5.1.3	Substrate	57
5.1.4	Reinigung	58
5.1.5	Oberflächenpräparation	59
5.2	Surfactant-modifizierte Epitaxie mit Sb	61
5.2.1	Probenherstellung	61
5.2.2	Optimierung des SME-Wachstumsprozesses für die III-V-Epitaxie	62
5.2.3	Sb an der Oberfläche	68
5.2.4	Ein-Domänigkeit der Ge-Oberflächen	73
5.2.5	Herstellung virtueller Substrate für die GaAs-Epitaxie	77
5.3	Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie	79
5.3.1	Optimierter Prozessablauf der CME	79
5.3.2	Probenherstellung	79
5.3.3	CME auf verkippten Substraten	81
5.4	Zusammenfassung	91
6	GaAs-Epitaxie auf virtuellen Germaniumsubstraten	92
6.1	Probenpräparation	92
6.1.1	MBE-System	92
6.1.2	Kalibration	93
6.1.3	Reinigung virtueller Substrate	94
6.1.4	Oberflächenpräparation	95
6.1.5	Wachstumsparameter für die GaAs-Epitaxie	97
6.2	GaAs-Epitaxie auf virtuellen Ge-Substraten	97
6.2.1	Wachstumsprozess	98
6.2.2	Strukturelle Untersuchung	100
6.2.3	Photolumineszenz-Spektroskopie	113
6.3	Zusammenfassung	119

7 Zusammenfassung und Ausblick	121
7.1 Zusammenfassung	121
7.2 Ausblick	123
Anhang	138
Literatur	138
Nomenklatur	166
Abbildungsverzeichnis	168
Tabellenverzeichnis	169
Publikationsverzeichnis	172
Curriculum Vitae	174
Danksagung	175

1 Einleitung

Der Verzicht auf nukleare und fossile Energieträger, der durch den deutschen Bundestag im *Erneuerbare-Energien-Gesetz* festgelegt ist [2], ist in Deutschland ein viel diskutiertes Thema. Durch regenerative Energiequellen soll der Anteil konventioneller Energiequellen in den folgenden Jahren gesenkt werden. Der Anteil regenerativer Energiequellen am deutschen Strommix soll von derzeit 30% [3] auf 55%-60% im Jahr 2035 erhöht werden [2]. Um diese Steigerung zu erreichen, soll in den nächsten Jahren ein Ausbau der regenerativen Energiequellen stattfinden. Um eine ausreichende und zuverlässige Energieversorgung zu gewährleisten, muss der Ausbau regenerativer Energiequellen zwei Ansätze verfolgen. Zum einen müssen zusätzliche Windkraft-, Solar-, Biomasse- und Wasserkraftanlagen errichtet werden. Jedoch ist gerade dieser Zubau weiterer Anlagen abhängig von Bebauungsplänen, Kommunalpolitik und Bürgerbeteiligung. Zum anderen kann der Ausbau regenerativer Energiequellen auch das Ersetzen vorhandener Anlagen durch neue und effizientere sein. An dieser Stelle zeigt die Photovoltaik ihren Vorteil gegenüber anderen regenerativen Energiequellen. Im Gegensatz zu Windkraft-, Wasserkraft- oder Biomasseanlagen, können Solarzellen platzsparend auf Hausdächern installiert werden. Solarzellen ermöglichen die Umwandlung von Sonnenenergie in elektrische Energie. Bisher wandeln Solarzellen nur etwa 20% des einfallenden Lichts in Energie um, was die Frage aufwirft: Wie können Solarzellen noch effizienter werden?

Um diese Frage zu beantworten, wird kurz erklärt, wie Solarzellen, die überwiegend aus Silizium (Si) hergestellt werden, funktionieren. Anschließend wird die Bedeutung des Elements Germanium (Ge) zur Herstellung von hocheffizienten Tandemsolarzellen gezeigt. Dazu wird ein kurzer Überblick über bestehende Konzepte von Tandemsolarzellen gegeben und es wird gezeigt, wie eine Si-basierte Tandemsolarzelle mit Ge und Galliumarsenid (GaAs) aussehen könnte. Abschließend wird die Fragestellung dieser vorliegenden Dissertation, wie die monolithische Integration von III-V-Materialien wie GaAs auf Si-Substraten unter Verwendung von Ge gelingen kann, vorgestellt.

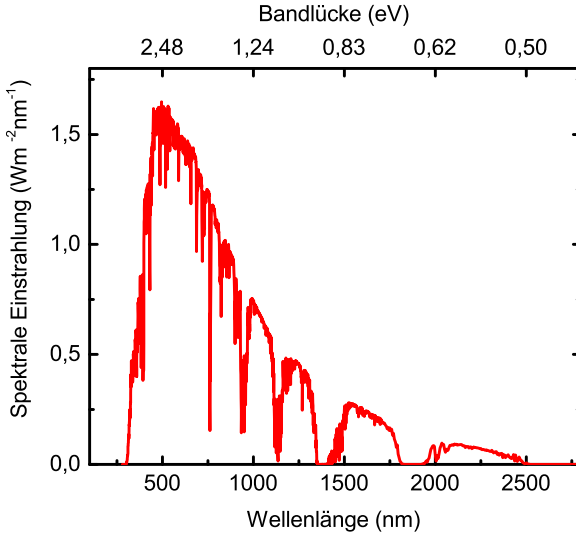


Abb. 1.1: Solares Spektrum AM1,5 unter Berücksichtigung von Streuung und Absorption in der Erdatmosphäre unter einem Einstrahlwinkel von 48° zur Oberflächennormalen [4].

1.1 Nutzung solarer Strahlungsenergie durch Solarzellen

Basierend auf dem inneren photoelektrischen Effekt [5] wird bei herkömmlichen Solarzellen nur ein bestimmter Teil des solaren Spektrums (Abbildung 1.1) in Energie umgewandelt. Eine Si-basierte Solarzelle kann aufgrund der Bandlücke von Si ($E_{g, Si} = 1,12 \text{ eV}$) Licht mit einer Wellenlänge von $\lambda \leq 1107 \text{ nm}$ in Energie umwandeln. Optimalerweise hat einfallendes Licht eine Energie E_{phot} gleich dem energetischen Abstand Bandlücke E_g zwischen Leitungs- (E_L) und Valenzband (E_V) in Si. Weist absorbiertes Licht eine größere Energie als die Energie der Bandlücke auf ($E_{phot} > E_g$), wird die überschüssige Energie in nicht nutzbare Wärme umgesetzt (Thermalisation). Der Weltrekordwirkungsgrad für eine Si-basierte Solarzelle liegt bereits bei $\eta = 25,6\%$ (AM1,5) [6] und ist somit sehr nah an dem theoretisch maximalen Wirkungsgrad (Shockley-Queisser-Limit [7]) von $\eta \approx 29\%$ [8]. Das

in Abbildung 1.1 gezeigte solare Spektrum wird dabei als AM1,5¹ (AM1,5, Luftmasse, engl. *air mass*) bezeichnet.

Es gibt verschiedene Konzepte, die bestehende Si-Solarzellen-Technologie weiterzuentwickeln oder abzulösen, eine aktuelle Übersicht ist in [9] gegeben. Neben der Si-basierten Technologie, innerhalb derer beispielsweise an einer Wiederverwendung der Si-Substrate² zur Reduzierung der Herstellungskosten gearbeitet wird [11], werden auch Solarzellen aus anderen Materialien wie beispielsweise aus Perowskiten [12, 13], aus Kesteriten ($Cu_2ZnSn(S,Se)_4$ -System) [14, 15] oder aus nanostrukturierten Materialien [16] entwickelt.

An dieser Stelle wird ein weiterer Ansatz zur Steigerung der Effizienz von Solarzellen vorgestellt. Durch die Kombination verschiedener Solarzellmaterialien zu Tandemsolarzellen (auch als Mehrschicht-Solarzellen bezeichnet) kann der Wirkungsgrad von Solarzellen signifikant ($\eta \geq 40\%$) gesteigert werden [8]. Es werden in Tandemsolarzellen zwei oder mehr halbleitende Materialien unterschiedlicher Bandlücken ($E_{g,1}, E_{g,2}, \dots$) miteinander kombiniert, um ein breiteres Spektrum der solaren Strahlung [4] (siehe Abbildung 1.1) zu absorbieren. Dadurch wird mehr einfallendes Licht als in einer Einzel-Solarzelle ohne Verluste durch Thermalisation absorbiert und in elektrische Energie umgewandelt.

1.2 Auf dem Weg zu Tandemsolarzellen

Um einen höchstmöglichen Wirkungsgrad η in einer Tandemsolarzelle zu erreichen, müssen die einzelnen Solarzellmaterialien so gewählt werden, dass das solare Spektrum optimal absorbiert werden kann. Dafür ist vor allem die Bandlücke E_g des jeweiligen Materials entscheidend, da diese die maximal mögliche zu absorbierende Wellenlänge des Lichtes bestimmt. In Abbildung 1.2 werden typische Solarzellmaterialien mit ihren entsprechenden Bandlücken E_g und Gitterkonstanten a gezeigt. Neben dem bereits überwiegend genutztem Si, werden Ge und Verbindungshalbleiter der Gruppe III und V (III-V) gezeigt. Außerdem ist in Abbildung 1.2 die ideale Bandlücke für eine 2-fach- und 3-fach-Tandemsolarzelle (bei freier Substratwahl) eingezeichnet, basierend auf dem AM1,5-Spektrum [17]. So ergeben sich

¹In der Literatur auch als AM1,5G bezeichnet. Es berücksichtigt einfallende und nicht-konzentrierte Lichtstrahlen auf der Erdoberfläche unter einem Winkel von 48° (bezogen auf die Oberflächennormale, nicht-senkrechter Lichteinfall, wie er typisch für europäische bzw. nordamerikanische Breitengrade ist) sowie die Streuung und Absorption von Lichtstrahlen in der Erdatmosphäre.

²Gegenwärtig verursacht das Substrat 23% der Gesamtherstellungskosten von Si-Solarzellen [10].

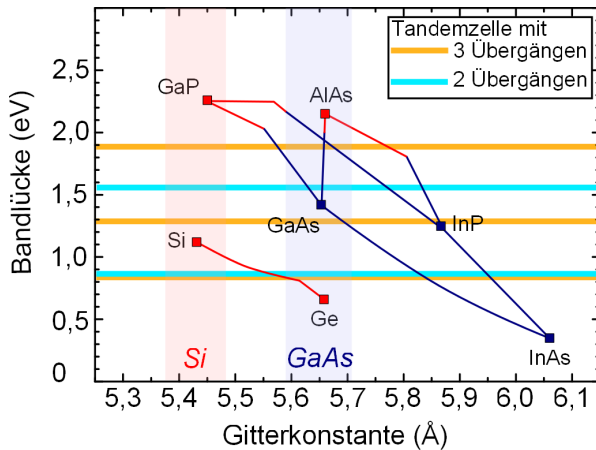


Abb. 1.2: Bandlücke gegen Gitterkonstante aufgetragen für III-V- und Gruppe IV-Materialien. Halbleitermaterialien mit direktem Bandübergang in Blau, mit indirektem in Rot dargestellt. Zusätzlich ist die ideale Bandlücke für eine 2-fach- und 3-fach-Tandemsolarzelle (bei freier Substratwahl) eingezeichnet, basierend auf dem AM1,5-Spektrum. Der rot (für Si-Substrate) bzw. blau (für GaAs-Substrate) hinterlegte Bereich spiegelt den Gitterkonstantenbereich wider, in dem nahezu gitterangepasst (Verspannung $\epsilon_{Gitter} \leq 1\%$) gewachsen werden kann. Gitterkonstanten bei $T = 300\text{ K}$, eigene Darstellung nach [17].

maximal mögliche Wirkungsgrade für eine Tandemzelle bei freier Substratwahl von $\eta = 45\%$ für zwei Übergänge und $\eta = 50,5\%$ für drei Übergänge [8]. Dabei bezeichnet eine Tandemsolarzelle mit zwei Übergängen die Kombination zweier solarzellaktiver Materialien, in denen generierte Ladungsträger durch jeweils einen pn-Übergang getrennt werden. Allerdings lassen sich die gezeigten Solarzellmaterialien nicht beliebig kombinieren, weil sich die Gitterkonstanten der Materialien unterscheiden. Deshalb ist der in Rot (für Si-Substrate) bzw. in Blau (für GaAs-Substrate) hinterlegte Bereich in Abbildung 1.2 eingezeichnet. Dieser stellt den Gitterkonstantenbereich dar, in dem nahezu gitterangepasst (Verspannung $\epsilon_{Gitter} \leq 1\%$) und somit möglichst defektfrei gewachsen werden kann. Folglich ist es nicht verwunderlich, dass überwiegend III-V-Tandemsolarzellen auf Ge- oder GaAs-Substraten hergestellt werden. Ge besitzt eine lediglich um $< 0,1\%$ größere Bandlücke als GaAs und ist hinsichtlich der Bandlücke ($E_{g,Ge} = 0,67 \text{ eV}$) sehr nah an der idealen Bandlücke von $E_{g,ideal} = 0,9 \text{ eV}$ (siehe Abbildung 1.2). Außerdem lässt sich die Bandlücke durch Legierung von III-V-Halbleitern einstellen, was in Abbildung 1.2 durch die Verbindung der einzelnen Materialien mit Linien gekennzeichnet ist. Beispielsweise kann durch Legierung von GaAs mit AlAs die Bandlücke so eingestellt werden, dass bei Kombination mit einer Ge-Solarzelle der optimale Wirkungsgrad η erreicht wird.

Wie ist also eine derzeitige III-V-Tandemsolarzellen aufgebaut, um dem theoretischen Maximum am nächsten zu kommen? Der gegenwärtige Stand der Technik sind gitterangepasste [18, 19, 20] III-V-Tandemsolarzellen auf Ge-Substraten, die insgesamt aus drei pn-Übergängen bestehen. Eine derartige Solarzelle, bestehend aus einer Ge-basierten Solarzelle ($E_{g,Ge} = 0,67 \text{ eV}$), einer GaInAs-basierten Solarzelle ($E_{g,GaInAs} = 1,4 \text{ eV}$) und einer GaInP-basierten Solarzelle ($E_{g,GaInP} = 1,9 \text{ eV}$), wird in in Abbildung 1.3 a) schematisch gezeigt. Mit dieser Tandemsolarzelle kann ein Wirkungsgrad von $\eta \geq 40\%$ erreicht werden [6, 21, 22].

Zwar ist die Herstellung von III-V-Tandemsolarzellen bereits etabliert, da diese bevorzugt für extraterrestrische Anwendungen, aufgrund ihres sehr guten Leistung-pro-Gewicht-Verhältnisses, benutzt werden. Jedoch ist die Herstellung von III-V-Tandemsolarzellen verglichen mit konventionellen Si-Solarzellen sehr teuer. Die derzeitigen Konzepte haben den Nachteil, vergleichsweise teure Ge- oder GaAs-Substrate zu benutzen. Si-Substrate, wie sie in der Solarzellentechnologie für den Massenmarkt verwendet werden, kosten bei einer Größe von $156 \text{ mm} \times 156 \text{ mm}$ etwa 1 € pro Stück [10]. Ge- oder GaAs-Substrate sind um einen Faktor 10-100 [23] teurer. Insbesondere dieser Kostenunterschied hat bisher verhindert, dass III-V-(Tandem-)Solarzellen für den Massenmarkt hergestellt worden sind.

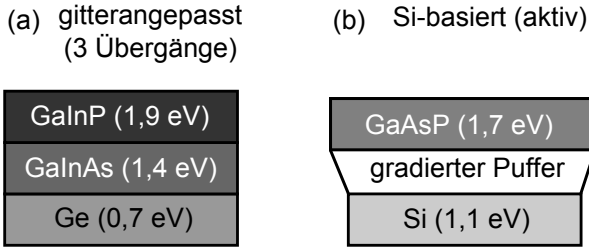


Abb. 1.3: Übersicht über verschiedene Konzepte für Tandemsolarzellen. (a) Gitterangepasste Solarzelle mit 3 Übergängen basierend auf einem Ge-Substrat. (b) Tandemsolarzelle basierend auf einer Si-Solarzelle.

Um das Potential von III-V-Materialien zur Steigerung des Wirkungsgrads trotzdem auszunutzen, wird derzeit die Integration von III-V-Materialien auf Si-Substraten als *“ultimate photovoltaische Lösung”* (aus dem Englischen: *Silicon wafer-based tandem cells: The ultimate photovoltaic solution?* [8]) diskutiert. Gelänge eine Verknüpfung der etablierten und kostengünstigen Großserienproduktion Si-basierter Solarzellen mit der technisch ausgereiften, aber bisher weitaus kostenintensiveren Herstellung von III-V-Tandemsolarzellen, offenbart sich das Potential von Si-basierten III-V-Tandemsolarzellen [8]. Abbildung 1.3 (b) zeigt den schematischen Aufbau einer Si-basierten III-V-Tandemsolarzelle.

Allerdings stellt neben den Herstellungskosten die Integration von III-V-Materialien auf Si-Substraten eine weitere Herausforderung dar. Weil es sich um kristalline Materialien handelt, ist der Unterschied der Gitterkonstanten zwischen Si- und III-V-Materialien (siehe Abbildung 1.2) entscheidend. Ist dieser zu groß (bereits einige Prozent Unterschied reichen), entstehen bei dem Wachstum Kristalldefekte, die die Leistung einer Solarzelle einschränken [24, 25, 26]. Aus diesem Grund ist bisher eine kostengünstige Integration von III-V-Materialien auf Si im Rahmen einer Großserienproduktion nicht gelungen.

1.3 Wie Tandemsolarzellen auf Silizium-Substraten realisiert werden können

Um III-V-Materialien auf Si zu integrieren, ist die Überführung der Gitterkonstanten von Si zu dem III-V-Material durch eine Zwischenschicht notwendig.

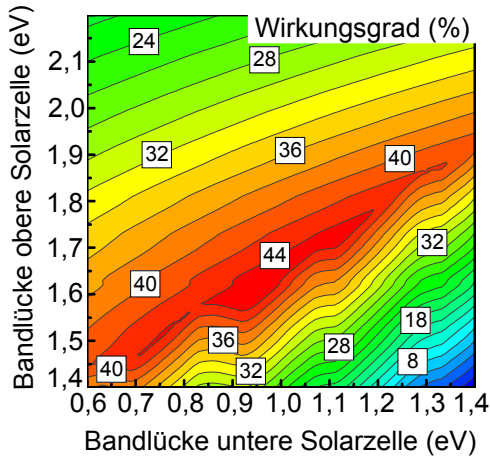


Abb. 1.4: Detaillierter Kontourplot für eine Tandemsolarzelle mit zwei pn-Übergängen unter unkonzentrierter, global terrestrischer Bestrahlung (AM1,5) nach [32]. Bei idealer Kombination der Bandlücken ist ein maximaler Wirkungsgrad von $\eta \approx 44\%$ erreichbar. Bei Verwendung einer Si-Zelle als untere der beiden Solarzellen sind immerhin theoretisch maximale Wirkungsgrade von $\eta = 42,5\%$ (für $E_{g,Si} = 1,12 \text{ eV}$ und $E_{g,GaAsP} = 1,7 \text{ eV}$) möglich.

Durch diese Zwischenschicht kann das Problem der Gitterfehlpassung zwischen Si und GaAs (4,1%) umgangen werden. Diese Zwischenschicht zur Integration kann aus Ge sein, denn der Unterschied der Gitterkonstanten von Ge und GaAs beträgt weniger als 0,1%. Ist die Ge-Schicht vollständig relaxiert, kann GaAs gitterangepasst aufgewachsen werden, ohne dass Versetzungen infolge von Gitterfehlpassung entstehen. Bisher wird die Gitterkonstante durch einen gradierten Puffer, dargestellt in Abbildung 1.3 (b) überführt. Dabei wird über mehrere μm durch eine $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ -Schicht mit sich ändernder Zusammensetzung die Gitterkonstante verändert [27, 28, 29, 30, 31]. Gradierte Puffer werden auch für die Überführung der Gitterkonstanten von Si zu GaAsP [32, 33, 34, 35, 36] angewendet. Gradierte Puffer haben jedoch zwei wesentliche Nachteile. Zum einen können aus gradierten Pufferschichten selbst keine Solarzellen gebaut werden. Zum anderen absorbieren diese aufgrund ihrer Schichtdicke bereits einen großen Anteil des einfallenden Lichts und reduzieren die Effizienz der gesamten Tandemsolarzelle [37].

Deshalb kann die Integration von III-V-Materialien auf Si nur mit sehr dünnen

Ge-Schichten realisiert werden ($d \approx 50 \text{ nm}$) [8, 37]. Bei einer hinreichend kleinen Schichtdicke [8] der Ge-Schicht würde diese wie ein Tunnelübergang zwischen der unteren Si-Solarzelle und der (den) darüber liegenden Solarzelle(n) funktionieren. Solarzellen, bei denen das Ge nicht als aktive Solarzelle genutzt wird, werden als *out-of-the-sequence*-Solarzellen bezeichnet. Denn die kleine Bandlücke Ge liegt (im Schichtstapel) zwischen den zwei größeren Bandlücken von Si und GaAsP. Eine solche *out-of-the-sequence*-Tandemsolarzelle könnte einen theoretisch maximalen Wirkungsgrad (AM1,5) von $\eta = 42,5\%$ für zwei Übergänge ermöglichen. Für eine Tandemsolarzelle mit zwei pn-Übergängen ist der maximal mögliche Wirkungsgrad aufgetragen über der Bandlücke für die untere und obere Solarzelle in Abbildung 1.4 gezeigt. Wird nun als untere Solarzelle eine Si-basierte ($E_{g,Si} = 1,12 \text{ eV}$) gewählt, so ergibt sich der maximale Wirkungsgrad von $\eta = 42,5\%$ für die Kombination mit einer GaAsP-basierten Solarzelle ($E_{g,GaAsP} = 1,7 \text{ eV}$) [32, 38, 39, 40]. Für insgesamt drei Übergänge ergibt sich ein theoretisch maximaler Wirkungsgrad (AM1,5) von $\eta \geq 47,5\%$ für die Kombination aus Si ($E_{g,Si} = 1,12 \text{ eV}$), GaAsP ($E_{g,GaAsP} = 1,5 \text{ eV}$) und GaInP ($E_{g,GaInP} = 2,0 \text{ eV}$) [41]).

Die Herstellung solcher ausreichend dünnen Ge-Schichten auf Si-Substraten wird in der vorliegenden Dissertation untersucht. Diese Ge-Schichten werden im Folgenden als virtuelle Ge-Substrate bezeichnet und sollen für die monolithische Integration von III-V-Materialien auf Si untersucht werden. Durch die Wahl von dünnen ($d \approx 50 \text{ nm}$ [8, 37]) und voll relaxierten Ge-Schichten werden Probleme aufgrund der Gitterfehlpassung zwischen Si und GaAs umgangen. Als Verfahren zur Herstellung dieser Ge-Schichten werden die Surfactant-modifizierte Epitaxie und die Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie hinsichtlich ihrer Eignung zur Herstellung virtueller Ge-Substrate untersucht. Um die Eignung der virtuellen Ge-Substrate zu überprüfen wird GaAs auf diese aufgewachsen.

1.4 Aufbau der Dissertation

Die vorliegende Dissertation gibt zunächst eine Einführung in die Grundlagen der Epitaxie im Allgemeinen. Dazu werden Grundlagen des Wachstums heteroepitaktischer Ge-Schichten auf Si und GaAs-Schichten auf Ge erklärt (Kapitel 2). Die Verfahren, die zur Herstellung virtueller Ge-Substrate benutzt werden (Surfactant-modifizierte Epitaxie und Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie), werden aus Sicht des aktuellen Stands der Technik erläutert (Kapitel 3). Die Charakterisierungsmethoden zur Untersuchung von epitaktisch gewachsenen Schichten werden anschließend vorgestellt (Kapitel 4). Zunächst wird die Herstellung virtueller Ge-Substrate mit den beiden vorgestellten

Verfahren untersucht und optimiert (Kapitel 5). Dann wird die Epitaxie von GaAs auf den im Rahmen der vorliegenden Dissertation hergestellten virtuellen Ge-Substraten durchgeführt (Kapitel 6). Die Ergebnisse werden abschließend zusammengefasst und in den Kontext des gegenwärtigen Stands der Technik eingeordnet (Kapitel 7).

Verweise auf Kapitel, Grafiken und Tabellen, sowie Literaturverweise sind in der PDF-Version verknüpft. Durch Klicken auf den entsprechenden Verweis kann zu dem jeweiligen Kapitel, der Grafik, der Tabelle oder in das Literaturverzeichnis gewechselt werden. Zusätzlich werden im Anhang (Kapitel 7.2) sämtliche vorgestellten Proben hinsichtlich ihrer Herstellung und Charakterisierung aufgeführt.

2 Grundlagen: Epitaxie

Kapitel 2 stellt die allgemeinen Grundlagen der Epitaxie sowie die wachstumsbestimmenden Prozesse kurz vor. Diese werden anschließend auf das Materialsystem Si/Ge bezogen, um die Grundlagen zur Herstellung virtueller Ge-Substrate zu legen. Weiterhin wird das heteroepitaktische Wachstum von GaAs auf Ge vorgestellt. Die Molekularstrahlepitaxie, mit der alle in dieser Arbeit verwendeten Proben hergestellt worden sind, wird abschließend vorgestellt.

2.1 Epitaxie

Die Epitaxie beschreibt eine Form des Kristallwachstums, bei der einzelne Atome geordnet auf einer kristallinen Unterlage, als Substrat bezeichnet, positioniert werden. Dabei leitet sich das Wort Epitaxie von den griechischen Wörtern $\varepsilon\pi\iota$ (epi - “auf”) und $\tau\alpha\xi\iota\alpha$ (taxia - “ausrichten” bzw. “ordnen”) ab und geht auf ROYER [42] und SCHNEIDER [43] zurück. Das Substrat gibt die atomare Ordnung für die aufwachsenden Atome vor, wobei eine gewisse Übereinstimmung in Kristallstruktur und Symmetrie zwischen Substratmaterial und aufwachsendem Material für epitaktisches Wachstum erforderlich ist.

Es wird zwischen Homoepitaxie und Heteroepitaxie unterschieden, für die ein Unterschied der chemischen Potentiale $\mu_s \neq \mu_f$ maßgeblich ist. Dabei bezeichnet μ_s das chemische Potential des Substrats und μ_f das des aufwachsenden Films. Bei der Homoepitaxie wird der Unterschied hauptsächlich durch unterschiedliche Gitterkonstanten verursacht, wie sie beispielsweise zwischen dotiertem und undotiertem Si auftreten, vereinfacht kann von demselben Material bei Substrat und aufwachsendem Film gesprochen werden. Bei der Heteroepitaxie allerdings sind Unterschiede in der Bindungsart und Bindungsstärke zwischen Substratmaterial und dem Material des aufwachsenden Films als hauptursächlich zu nennen. In der Regel wächst ein anderes Material als das Substratmaterial auf.[44] Abbildung 2.1 gibt einen schematischen Überblick über die wachstumsbestimmenden Prozesse bei der Epitaxie nach VOIGTLÄNDER [45]. Nachdem das aufzuwachsende Material zu dem Substrat gelangt ist (beispielsweise durch Gasphasentransport), können auf der Substratoberfläche ankommende Atome oder Moleküle verschiedene Prozesse [45] durchlaufen, die in Abbildung 2.1 gezeigt sind.

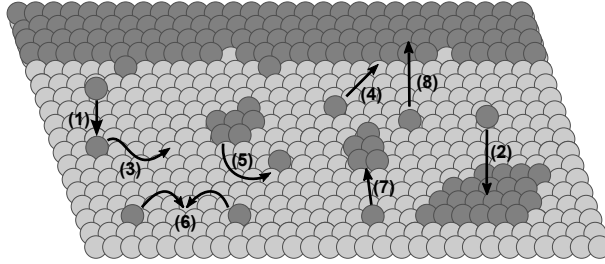


Abb. 2.1: Wachstumsbestimmende Prozesse bei der Epitaxie nach VOIGTLÄNDER, Adsorption (1) durch Chemisorption oder Physisorption auf dem Substrat oder auf Inseln (2); Diffusion auf der Oberfläche: auf einer Terrasse (3), zu einer Stufenkante (4) oder Trennung von einer Insel (5); Nukleation von Inseln (6) sowie Bindung an vorhandene Inseln (7); Desorption (8). [45]

2.1.1 Thermodynamische Beschreibung epitaktischen Wachstums

Die thermodynamische Beschreibung epitaktischen Wachstums berücksichtigt die freien Oberflächenenergien γ^3 von Substrat und Film. Je nach Differenz dieser treten drei verschiedene Wachstumsmodi für das epitaktische Wachstum auf. Der Zusammenhang zwischen Wachstumsmodus und freier Oberflächenenergie wird über das Bauerkriterium beschrieben. [47]

$$\Delta\gamma = \gamma_f - \gamma_s + \gamma_i \quad (2.1)$$

Im Bauerkriterium werden die freien Oberflächenenergien des Substrats γ_s , des aufwachsenden Films γ_f sowie die freie Oberflächenenergie der Grenzfläche γ_i berücksichtigt. Es gibt drei verschiedene Wachstumsmodi, die beispielhaft in Abbildung 2.2 dargestellt sind:

- $\Delta\gamma < 0$: Wenn epitaktische Schichten mit geringerer freier Oberflächenenergie auf einem Substrat mit größerer freier Oberflächenenergie aufwachsen, liegt ein zweidimensionales Schichtwachstum vor, welches als FRANK-VAN-DER-MERWE-Wachstum bezeichnet wird [48].
- $\Delta\gamma > 0$: Verfügt das Substrat über eine, im Vergleich zur aufwachsenden Schicht, geringere Oberflächenenergie, findet dreidimensionales

³In der Originalquelle als σ Oberflächenenthalpie definiert. An dieser Stelle als Oberflächenenergie γ bezeichnet. Unter Annahme, dass sich die Entropie des betrachteten Systems nicht ändert ($T = \text{konstant}$ für den betrachteten Zustand), kann dieses gleichgesetzt werden. [46]

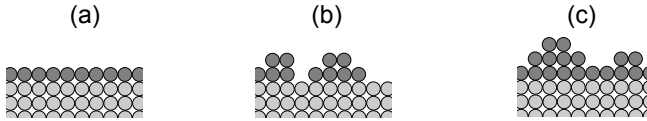


Abb. 2.2: Wachstumsmoden für Heteroepitaxie, (a) FRANK-VAN-DER-MERWE-Wachstum, (b) VOLMER-WEBER-Wachstum und (c) STRANSKI-KRATANOW-Wachstum. Das Substrat ist in Hellgrau, der aufwachsende Film in Dunkelgrau dargestellt.

Inselwachstum statt, das als VOLMER-WEBER-Wachstum bezeichnet wird [49].

- Als STRANSKI-KRATANOW-Wachstum wird eine Mischform bezeichnet. Zunächst bildet sich eine Benetzungsschicht (engl. *wetting layer*) von einer oder mehreren Monolagen (ML) Dicke durch zweidimensionales Schichtwachstum ($\Delta\gamma < 0$) aus. Ab der kritischen Schichtdicke d_c wird die freie Oberflächenenergie der aufwachsenden Schicht so groß, dass Inselwachstum bevorzugt wird ($\Delta\gamma > 0$). Ursächlich dafür sind Spannungen aufgrund von Gitterfehlpasungen, die bei zunehmender Schichtdicke zu einer größeren freien Oberflächenenergie führen, welches insbesondere durch γ_i berücksichtigt werden kann. [50]

2.1.2 Oberflächenrekonstruktion

Während der Epitaxie finden die wachstumsbestimmenden Prozesse an Oberflächen statt, weshalb die Störung der Periodizität der Kristallstruktur an der Oberfläche berücksichtigt werden muss. Durch diese entstehen an der Oberfläche nicht abgesättigte Bindungen. Durch das Absättigen der Bindungen kann die Oberflächenenergie minimiert werden, was mit einer Umordnung der Atome auf der Oberfläche einhergeht. Dabei wird die Anordnung der Atome auf der Oberfläche als Oberflächenrekonstruktion bezeichnet [51]. Sie ist von Temperatur, Material sowie der Kristallausrichtung abhängig und kann während des Wachstumsprozesses durch Beugung von Elektronen sichtbar gemacht werden (siehe Kapitel 4.1). Die Rekonstruktion der Oberfläche ermöglicht eine Bewertung der in dieser Arbeit benutzten Wachstumsprozesse, da sie Informationen über die Präparation einer Oberfläche und das Ergebnis eines Wachstumsprozesses liefert.

2.2 Heteroepitaxie dünner Schichten

Infolge von unterschiedlichen Gitterkonstanten zwischen Substrat und Film kommt es bei der Heteroepitaxie zu einer Gitterfehlpassung f der Elementarzellen des aufwachsenden Films an die Elementarzellen des Substrats. Dabei ist die Gitterfehlpassung definiert als:

$$f = \frac{a_f - a_s}{a_s}, \quad (2.2)$$

wobei a_s die Gitterkonstante des Substrats und a_f die Gitterkonstante des aufwachsenden Films ist. Um die Gitterfehlpassung auszugleichen, findet während des Wachstums Relaxation statt. Die aufwachsende Schicht kann entweder durch elastische Relaxation (Inselbildung) oder plastische Relaxation (Bildung von Versetzungen) ihren Spannungszustand abbauen. Während des Wachstums ergeben sich verschiedene Spannungszustände solcher Heteroschichten, die in Abbildung 2.3 für ein kubisches Gitter dargestellt sind. Diese werden zweidimensional veranschaulicht, besitzen aber bei Erweiterung um eine dritte Raumrichtung ebenfalls Gültigkeit. Zu unterscheiden sind pseudomorphe, teil relaxierte und voll relaxierte Heteroschichten. Abbildung 2.3 (b) zeigt eine mögliche Darstellung von teilrelaxierten Heteroschichten. Die angeführten Spannungszustände gelten auch für andere Kristallgitter. Zur Beschreibung von Verspannungszuständen heteroepitaktischer Schichten wird der Relaxationsgrad [52]

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

benutzt, wobei $a_{s,\parallel}$ die gemessene in-plane Gitterkonstante des Substrats und $a_{f,\parallel}$ die in-plane Gitterkonstante des Films ist. Ein pseudomorph verspannter Film bedeutet $R = 0$, während ein vollrelaxierter Film $R = 1$ bedeutet.

2.2.1 Ge auf Si

Die Heteroepitaxie von Ge auf Si unterliegt dem STRANSKI-KRATANOW-Wachstumsmodus. Die geringere Oberflächenenergie von Ge führt zunächst zu dem beschriebenen zweidimensionalen Wachstum auf Si. Dabei wächst das Ge als pseudomorph verspannte Schicht auf dem Si auf. Mit zunehmender Schichtdicke steigt die Verspannungsenergie E_{el} infolge der Gitterfehlpassung, bis diese so groß ist, dass der Wachstumsmodus in dreidimensionales Inselwachstum umschlägt. Die Verspannungsenergie E_{el} wird in dem Bauerkriterium als ein Faktor der Grenzflächenenergie γ_i berücksichtigt. Aufgrund

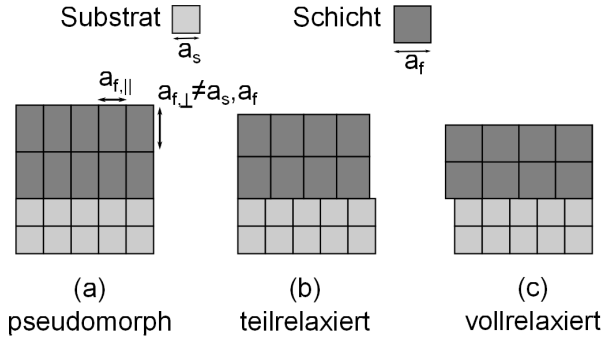


Abb. 2.3: Schematische Darstellung der Verspannung (a) pseudomorpher, (b) teil relaxierter (beispielhaft) und (c) voll relaxierter heteroepitaktischer Schichten. Eigene Darstellung nach SPIESS [52].

von unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Substrat und Film ist die Verspannungsenergie heteroepitaktischer Systeme nicht nur von der Gitterfehlpassung f abhängig, sondern muss um den Einfluss der thermisch induzierten Verspannung ergänzt werden. Es ergibt sich die temperaturabhängige Verspannung [53]

$$\epsilon_0(T) = \epsilon_{Gitter} + \epsilon_{th}(T) \quad (2.4)$$

wobei $\epsilon_0(T)$ die temperaturabhängige Verspannung ist, ϵ_{Gitter} die Verspannung infolge der Gitterfehlpassung und $\epsilon_{th}(T)$ die Verspannung infolge thermischer Ausdehnung ist. Aus den Gitterkonstanten von Si ($a_{Si} = 5,431 \text{ \AA}$) und Ge ($a_{Ge} = 5,658 \text{ \AA}$) [54] lässt sich Verspannungsenergie ϵ_{Gitter} für die Heteroepitaxie von Ge auf Si mit 2.2 berechnen:

$$\epsilon_{Gitter} = \frac{a_{Si} - a_{Ge}}{a_{Ge}} = -0,0401 \quad (2.5)$$

wobei das negative Vorzeichen eine kompressive Verspannung bedeutet.

Die thermische Verspannung ϵ_{th} ist definiert als [53]:

$$\epsilon_{th}(T) = \Delta\alpha(T)\Delta T \quad (2.6)$$

wobei die thermischen Ausdehnungskoeffizienten $\alpha_i(T)$ berücksichtigt werden müssen, die ihrerseits linear von der Temperatur abhängen. Für Si und Ge ergeben sich für die thermischen Ausdehnungskoeffizienten nach [53]:

$$\alpha_{Si}(T) = (2,7 + 0,0026T) \cdot 10^{-6} \frac{1}{K}; \quad (2.7)$$

$$\alpha_{Ge}(T) = (5,9 + 0,0021T) \cdot 10^{-6} \frac{1}{K}. \quad (2.8)$$

2.2.2 GaAs auf Ge

Bei der Heteroepitaxie von GaAs auf Ge handelt es sich um das Wachstum eines polaren Halbleiters auf einem unpolaren. Die Grundlagen der polar/unpolar-Epitaxie sind bei KROEMER [55] ausführlich für das Wachstum von GaAs auf Si diskutiert und werden für die vorliegende Dissertation auf die Epitaxie von GaAs auf Ge erweitert. Aufgrund derselben Kristallstruktur von Si und Ge sind diese Grundlagen ebenfalls für Ge gültig. Die Kristallstruktur von Si und Ge (*Diamantstruktur*, Raumgruppe⁴: $Fd\bar{3}m$) besteht aus zwei kubisch flächenzentrierten Subgittern (fcc, engl. *face-centred cubic*), die um ein Viertel der Raumdiagonale verschoben sind. Innerhalb dieser sind die Gitterplätze beider Subgitter immer mit Si- respektive Ge-Atomen besetzt (unpolarer Kristall). Bei GaAs, liegen ebenfalls zwei flächenzentrierte Subgitter vor (*Zinkblende*, Raumgruppe: $F\bar{4}3m$), bei denen allerdings das eine Subgitter ausschließlich mit Ga-Atomen, das andere ausschließlich mit As-Atomen besetzt ist. Durch diesen Unterschied kann es bei dem Wachstum von GaAs auf Ge zu der Ausbildung von Antiphasengrenzen (APB, engl. *antiphase boundaries*) kommen [23]. Diese können durch monoatomare Stufen verursacht werden, die auf jeder nicht-idealen Oberfläche vorkommen und auf einer Ge-Oberfläche in Abbildung 2.4 (a) schematisch dargestellt sind. Antiphasengrenzen enthalten Ga-Ga- sowie As-As-Bindungen; wenn sich diese abwechseln, veranschaulicht in Abbildung 2.4 (a) entlang der roten Linie, handelt es sich um Antiphasengrenzen in der $\{110\}$ -Ebene. Dieser Typ von Antiphasengrenzen ist energetisch am günstigsten und wird daher bevorzugt ausgebildet [56]. Antiphasengrenzen können jedoch auch in $\{111\}$ -Ebenen verlaufen, wie ebenfalls in Abbildung 2.4 (a) gezeigt. Eine weitere Möglichkeit ist, dass Antiphasengrenzen zunächst in $\{110\}$ -Ebenen verlaufen und dann entweder in $\{112\}$ -oder $\{113\}$ -Ebenen weiterlaufen. Die Ausbildung letzteren Typs von Antiphasengrenzen ist energetisch günstiger als der Typ, bei dem Antiphasengrenzen in $\{111\}$ -Ebenen verlaufen [56]. Treffen sich Antiphasen-

⁴Die Angabe der Raumgruppe ermöglicht eine eindeutige Beschreibung der Kristallstruktur. Diese erfolgt in der Hermann-Mauguin-Notation, die die Beschreibung symmetrischer Elemente wie Punkt-, Flächen- oder Raumgruppen ermöglicht. Dabei wird Symmetrie eines drei-dimensionalen Kristalls als Raumgruppe bezeichnet. [46]

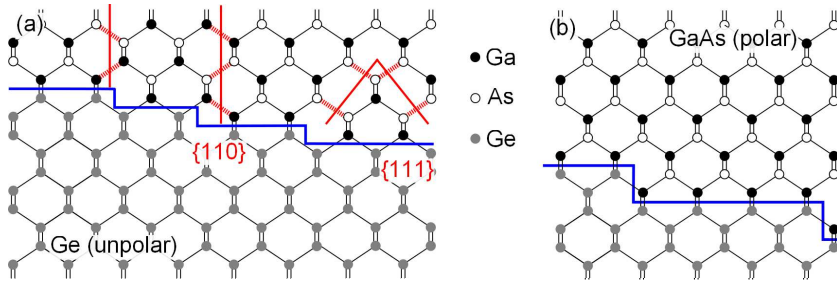


Abb. 2.4: Schematische Darstellung von GaAs gewachsen auf einer vizinalen Ge(001)-Oberfläche. (a) Mono-atomar gestufte Oberfläche, bei der Auftreten von Antiphasengrenzen in Rot für $\{110\}$ - und $\{111\}$ -Ebenen gekennzeichnet wird. (b) Doppel-atomar gestufte Ge-Oberfläche, durch die die Ausbildung von Antiphasengrenzen unterdrückt wird. Eigene Darstellung nach [56].

grenzen, löschen sich diese aus [56, 57, 58, 59], was zu einer Reduzierung der Defektdichte führt. In der Gesamtheit sind Antiphasengrenzen elektrisch neutral, da es im thermodynamischen Gleichgewicht die gleiche Anzahl an Ga-Ga- und As-As-Bindungen gibt, wodurch sich die Ladungen kompensieren. Wenn es allerdings Unordnung gibt (was in jedem realen Kristall vorkommt), entsteht in der $\{110\}$ -Ebene eine Nettoladung, die elektronische Eigenschaften eines Bauteils einschränkt. Daher sind Antiphasengrenzen geladene Defekte (elektrisch aktive Defekte [23, 55, 60]). Außerdem sind Antiphasengrenzen Rekombinationszentren für Ladungsträger [26], was die Funktion einer solchen Schicht für photonische Anwendungen stark einschränken würde [23]. Die Ausbildung doppel-atomarer Stufen auf der Ge-Oberfläche verhindert das Entstehen von Antiphasengrenzen und ist in Abbildung 2.4 (b) gezeigt [61]. Die Ausbildung doppel-atomarer Stufen wird durch einen Fehlschnitt des Substrats energetisch begünstigt. Auf die Notwendigkeit, fehlgeschnittene Substrate zu verwenden, die durch diesen Fehlschnitt eine vizinale Oberfläche aufweisen, wird in Kapitel 3.2.1 ausführlich eingegangen.

Im Gegensatz zum Wachstum von Ge auf Si ist der Unterschied der Gitterkonstanten bei dem Wachstum von GaAs auf Ge kein Problem, weil die Gitterkonstante von GaAs ($a_{GaAs} = 5,653 \text{ \AA}$) fast identisch mit der von Ge ($a_{Ge} = 5,658 \text{ \AA}$) ist. Durch die geringe Gitterfehlpassung ($f < 0,1\%$) zwischen Ge und GaAs ist das Auftreten von Kristalldefekten infolge plastischer Relaxation deutlich reduziert, verglichen mit dem Wachstum von GaAs auf Si. Daher bieten voll relaxierte Ge-Schichten auf Si (virtuelle Ge-Substrate)

die Möglichkeit, GaAs auf Si-Substraten zu integrieren.

2.3 Molekularstrahlepitaxie

Die Molekularstrahlepitaxie (MBE, engl. *molecular beam epitaxy*) [62, 63] gehört zu den Verfahren der Gasphasenepitaxie. Da an dieser Stelle lediglich eine kurze Einführung in die Methode gegeben werden kann, wird für die Bedeutung der Methode in Forschung an Halbleitermaterialien an MCCRAY [64] verwiesen. Ferner sind umfassende Grundlagen bei HERMAN und SITTER [65] sowie bei POHL [66] dargestellt.

Unter Ultrahochvakuum-Bedingungen ($p < 10^{-7} \text{ mbar}$) wird zur Erzeugung epitaktischer Schichten ein gerichteter Teilchenstrom aus einzelnen Atomen oder Molekülen benutzt. Verglichen mit den Dimensionen der Wachstumskammer ist aufgrund des herrschenden Drucks die mittlere freie Weglänge λ_{imfp} (eng. *inelastic mean free path*), also die Weglänge, bevor zwei Atome oder Moleküle aufeinandertreffen, um mehrere Größenordnungen erhöht [67]. Mittlere freie Weglängen von $\lambda_{imfp} > 10^3 \text{ m}$ implizieren einen vernachlässigbaren Einfluss der Restgasatmosphäre auf den Teilchenstrom und die Schichtabscheidung selbst. Unter diesen Bedingungen wird von molekularer Strömung gesprochen. Bei der Molekularstrahlepitaxie ist es möglich, die Substrattemperatur unabhängig von den Temperaturen der aufzuwachsenden Materialien zu steuern. Dadurch kann die Oberfläche thermisch präpariert werden, wie es beispielsweise bei vizinalen Substraten (siehe Kapitel 3.2.1) notwendig ist. Die wachstumsbestimmenden Prozesse auf der Oberfläche sind folglich auch durch die Substrattemperatur einstellbar und unabhängig von den Wachstumsraten der aufzuwachsenden Materialien. Dieses ist insbesondere bei der Surfactant-modifizierten Epitaxie von Bedeutung, da über die Substrattemperatur die Sb-Menge auf der Oberfläche gesteuert werden kann, ohne dabei die Ge-Wachstumsrate zu beeinflussen.

3 Grundlagen: Stand der Technik

In diesem Kapitel wird der Stand der Technik zum Wachstum virtueller Ge-Substrate und zum Wachstum von GaAs auf diesen dargestellt. Um die Anwendung epitaktischer Verfahren zur Herstellung virtueller Ge-Substrate zu verstehen, wird der Relaxationsprozess während des Wachstums von Ge auf Si im Detail erklärt. Nachfolgend wird sowohl die Surfactant-modifizierte Epitaxie mit Antimon (Sb) als auch die Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie erklärt. Abschließend wird auf das Wachstum von GaAs auf (virtuellen) Ge-Substraten eingegangen und dabei die Bedeutung von vizinalen Oberflächen bei der Epitaxie von Ge auf GaAs erklärt.

3.1 Epitaxie von relaxierten Ge-Schichten auf Silizium

Die Epitaxie von Ge auf Si ist bestimmt durch den Stranski-Krastanov-Wachstumsmodus [68, 69, 70]. Die auftretende Inselbildung, sobald die kritische Schichtdicke d_c einiger Monolagen (ML) überschritten ist, verhindert, dass dünne Ge-Schichten auf Si aufgewachsen werden können, die glatt sind (siehe Kapitel 2.1.1).

Mit zunehmender Schichtdicke steigt die Verspannungsenergie, bis diese ab der kritischen Schichtdicke so groß ist, dass der Relaxationsprozess einsetzt. Während elastische Relaxation durch Inselbildung voranschreitet, entsteht plastische Relaxation durch die Einführung von Versetzungen. Diese Versetzungen werden als Misfit-Versetzungen (MD, engl. *misfit dislocations*) bezeichnet und gleiten durch die Schicht an die Oberfläche. Dabei bildet sich ein Versetzungsnetzwerk aus, das parallel zur Ge/Si-Grenzfläche liegt und aus kurzen Misfit-Versetzungselementen besteht. Die Misfit-Versetzungselemente besitzen Versetzungsarme, die mit der Oberfläche verbunden sind und somit die Ge-Schicht durchstoßen. Diese werden als Durchstoßversetzungen (TD, engl. *threading dislocations*) bezeichnet. Um glatte Ge-Schichten beliebiger Schichtdicke auf Si herstellen zu können, muss also die Inselbildung von Ge während des Wachstums auf Si verhindert [71] und die Entstehung von Versetzungen kontrolliert werden. Denn diese Versetzungen beeinträchtigen die Funktionalität einer solchen Schicht, beispielsweise sind diese TD Rekombinationszentren für Ladungsträger und verringern die Ladungsträgerlebensdauern in Solarzellen [25].

Vorbereitend auf die Fragestellungen der vorliegenden Dissertation ist der Relaxationsprozess von Ge auf Si während der Startphase untersucht worden. Dazu ist das Ge-Wachstum auf Si(111) durch RHEED (siehe Kapitel 4.1) untersucht worden [72]. Die erzielten Ergebnisse werden mit Untersuchungen

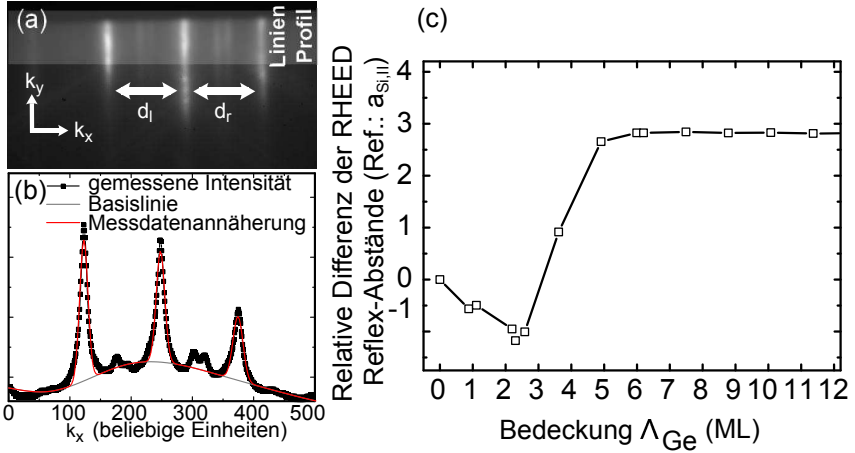


Abb. 3.1: In situ Analyse des Relaxationsprozesses durch RHEED-Untersuchungen von Ge auf Si(111) [72]. (a) RHEED-Aufnahme unter $\langle 110 \rangle$ -Azimut und eingezeichnetes Linienprofil. (b) Extrahiertes Linienprofil und Annäherung der Messdaten. (c) Verlauf des relativen Abstands zwischen den Intensitätsschwerpunkten als Maß für die Entwicklung der in-plane Gitterkonstanten $a_{||}$ aufgetragen über der Ge-Bedeckung Λ_{Ge} .

vergleichbarer Fragestellungen bei höheren Wachstumstemperaturen verglichen [73, 74, 75]. Im Folgenden wird der Relaxationsprozess basierend auf den Ergebnissen von Grimm [72] qualitativ vorgestellt. Das Wachstum ist auf Si(111)-orientierten Substraten durchgeführt worden, da die (111)-Ebene gleichzeitig Gleitebene für Versetzungen ist [76]. Außerdem kann der Einfluss der Oberflächenrekonstruktion auf den Relaxationsprozess auf der umfassend untersuchten Si(111)- 7×7 -Rekonstruktion [77, 78, 79] charakterisiert werden.

Durch Betrachtung des spekularen Reflexes und einer Intensitätsanalyse [73, 80] bei RHEED-Untersuchungen ist der Stranski-Krastanov-Wachstumsmodus untersucht worden. Zusätzlich kann RHEED dazu benutzt werden, eine in situ Analyse des Relaxationsprozesses vorzunehmen [74, 81, 82, 83], indem die in-plane Gitterkonstante $a_{||}$ während des Wachstums aufgezeichnet wird. Das zur Analyse des Wachstums durchgeführte Vorgehen ist exemplarisch in Abbildung 3.1 gezeigt. Zunächst ist aus einer RHEED-Aufnahme (unter $\langle 110 \rangle$ -Azimut) während des Wachstums die Intensität in Abhängigkeit der Position k_x durch einen Linienscan extrahiert worden (Abbildung 3.1 (a)).

Anschließend ist das Intensitätsprofil entsprechend angenähert worden, um die Intensitätsschwerpunkte und den Abstand zwischen diesen zu bestimmen (Abbildung 3.1 (b)). Der Verlauf des relativen Abstands zwischen den Intensitätsschwerpunkten ist ein Maß für die Entwicklung der in-plane Gitterkonstante a_{\parallel} . In Abbildung 3.1 (c) wird der Verlauf des relativen Abstands zwischen den Intensitätsschwerpunkten über der Ge-Bedeckung Λ_{Ge} aufgetragen gezeigt. Dabei ist die gemessene in-plane Gitterkonstante $a_{Si_{i,\parallel}}$ der Si(111)-7x7-rekonstruierten Oberfläche als Referenzwert definiert worden.

Während der Ausbildung der Benetzungsschicht wird die gemessene in-plane Gitterkonstante a_{\parallel} kleiner als der vor dem Wachstum gesetzte Referenzwert. Als Referenzwert für $a_{Si_{i,\parallel}}$ ist der Abstand der Intensitätsschwerpunkte einer 7x7-rekonstruierten Si(111)-Oberfläche genommen worden. Dass der gemessene Wert für a_{\parallel} sogar kleiner als der Referenzwert ist, kann durch die Umwandlung der Oberflächenrekonstruktion erklärt werden, denn adsorbierte Ge-Atome führen zunächst zu einer Si(111)-1x1-rekonstruierten Oberfläche [84]. Bei der Umwandlung einer 7x7-rekonstruierten Oberfläche in eine 1x1-rekonstruierte Oberfläche wird eine Verspannungsenergie von $\varepsilon = 1,6 \frac{J}{m^2}$ frei, sodass eine 7x7-rekonstruierte Oberfläche zugverspannt ist [85]. Mit zunehmender Benetzungsschichtdicke bildet sich dann eine Ge(111)-5x5-rekonstruierte Oberfläche bei $\Lambda_{Ge} = 2.2 ML$ aus [86, 87]. Die Inselbildung setzt bei $d \approx 3 ML$ ein.

Es könnte angenommen werden, dass der Relaxationsprozess erst ab der kritischen Schichtdicke d_c durch Inselbildung beginnt. Daher würde, bis d_c erreicht ist, Ge verspannt auf Si aufwachsen, sodass die gemessene in-plane Gitterkonstante der von Si ($a_{Si_{i,\parallel}}$) entspräche. Entgegen dieser Annahme startet der Relaxationsprozess jedoch bereits, bevor die kritische Schichtdicke d_c erreicht ist. Die vorliegenden RHEED-Untersuchungen [72] zeigen, dass der Relaxationsprozess bereits während des Wachstums der dritten Monolage einsetzt, noch bevor es zur Inselbildung bei $d \approx 3 ML$ kommt. Der Relaxationsprozess endet bei einer Bedeckung $\Lambda_{Ge} \approx 5 ML$. Bei Ende des Relaxationsprozesses ist die gemessene in-plane Gitterkonstante $\approx 4\%$ größer als die der unverspannten 1x1-rekonstruierten Oberfläche (siehe Minimum in Abbildung 3.1 (c)). Durch die RHEED-Untersuchungen konnte gezeigt werden, dass die Oberflächenrekonstruktion einen Einfluss auf den Relaxationsprozess bei dem Wachstum von Ge auf Si(111) hat.

Die Startphase des Wachstums von Ge auf Si(001)-2x1-rekonstruierten Oberflächen zeigt ebenfalls, dass der Relaxationsprozess bereits vor der Inselbildung beginnt [75]. Jedoch ist die 2x1-rekonstruierte Si(001)-Oberfläche nicht zugverspannt, sodass die gemessene in-plane Gitterkonstante a_{\parallel} nicht kleiner als die zu Beginn des Wachstums wird [75].

3.1.1 Surfactant-modifizierte Epitaxie

Im Folgenden wird erklärt, wie die Inselbildung durch die Surfactant-modifizierte Epitaxie (SME, engl. *surfactant modified epitaxy*) unterdrückt werden kann. Bei der SME wird während des Wachstums durch eine weitere Spezies, den Surfactant, die Inselbildung verhindert. Der Surfactant (engl. *surface active agent*) beeinflusst die Wachstumskinetik und verhindert dadurch die Inselbildung [88]. In der vorliegenden Dissertation wird Sb als Surfactant eingesetzt [89], um glatte Ge-Schichten mit mehreren 100 nm Schichtdicke herzustellen. Dabei liegt folgender Mechanismus zugrunde: Sb, das bereits vor dem eigentlichen Wachstum des Ge auf der Si-Oberfläche adsorbiert ($\approx 1 ML$), bedeckt die Si-Oberfläche komplett. Ankommende Ge-Atome adsorbieren und tauschen mit den Sb-Atomen den Platz, dieser Prozess wiederholt sich mit den weiterhin ankommenden Ge-Atomen. Das Sb "schwimmt" also immer auf der Oberfläche und verringert effektiv die Diffusionsgeschwindigkeit der ankommenden Ge-Atome, wodurch die Inselbildung unterdrückt wird [71, 90]. Das Wachstum von Ge-Schichten auf Si mit Sb als Surfactant ist detailliert von WIETLER [91] zusammengefasst und untersucht worden. Es kann in vier Phasen unterteilt werden [91]:

Während der ersten drei bis vier ML ($d \leq 4 ML$) tritt pseudomorphes Wachstum auf (Phase I), das, sobald die Schicht dicker wird, in ein Aufrauen der Oberfläche umschlägt (Phase II). Dieses Aufrauen bedeutet, dass zunächst durch elastische Relaxation die Gitterfehlpassung (siehe Gleichung 2.2) ausgeglichen wird. Dabei hat die Wachstumstemperatur einen Einfluss auf die Oberflächenmorphologie. Bei niedrigen Temperaturen ($T = 420 \text{ }^\circ\text{C}$) ist die Aufrauung ungeordnet, während mit zunehmender Temperatur ($T \leq 700 \text{ }^\circ\text{C}$) eine Facettierung der Oberfläche eintritt [92]. Versetzungen entstehen erst als Teil des plastischen Relaxationsprozesses, der ab einer Schichtdicke von $d > 18 ML$ (Phase III) einsetzt. Allerdings ist das Einsetzen der plastischen Relaxation wiederum abhängig von der Wachstumstemperatur und der Wachstumsrate [93]. Das Einsetzen der plastischen Relaxation beginnt bei höheren Wachstumstemperaturen früher, sodass das Erreichen der vollständigen Relaxation (Phase IV) ebenfalls stark temperaturabhängig ist.

Zunächst ist angenommen worden, dass mit SME nur auf Si(111)-Substraten defektarme Ge-Schichten hergestellt werden können und selbiges für Si(001)-Substrate unwahrscheinlich ist [93]. Annahme dafür war der zugrunde liegende Mechanismus der Versetzungsbildung, der wie folgt beschrieben werden kann [94]. Bei Si(111)-Substraten können Versetzungen in der Grenzfläche gleiten⁵ und ein regelmäßiges Netzwerk ausbilden, ohne dass dabei eine große Anzahl

⁵{111}-Ebenen sind Haupt-Gleitebenen im Materialsystem Si/Ge.

an Durchstoßversetzungen auftritt. Gründe für diesen Mechanismus im System Ge/Si(111) sind die höhere Stufenbildungsenergie verglichen mit {001}-Ebenen [95] und die Möglichkeit für Versetzungen, in der Grenzflächenebene zu gleiten ({111}-Ebene). Bei Si(001)-Substraten ist die Oberfläche nun eben nicht diese bevorzugte Gleitebene, jedoch konnte von WIETLER [89] gezeigt werden, dass in einem definierten Parameterraum Ge-Schichten auf Si(001)-Substraten relaxiert unter Ausbildung eines in der Grenzfläche liegenden Versetzungsnetzwerks hergestellt werden können. Dieses Versetzungsnetzwerk ist periodisch (quadratisch) und besteht aus vollständigen Stufenversetzungen. Ein derartiges Versetzungsnetzwerk trägt zu 100% zur Relaxation bei, da der Burgersvektor⁶ der Versetzung in der Grenzfläche liegt [96].

Diese Schichten können hergestellt werden, indem bei Temperaturen um $T = 670^\circ\text{C}$ eine Mikro-Rauigkeit entsteht, die von der Sb-Bedeckung abhängig ist. Durch die vergleichsweise hohe Temperatur entsteht eine hohe Dichte an Nukleationszentren für Versetzungen (Gräben auf der Ge-Oberfläche), sodass innerhalb weniger Monolagen die Spannung infolge der Gitterfehlpassung abgebaut werden kann und sich ein Lage-für-Lage-Wachstum einstellt.[91]

Ein maßgebliches Problem für die Nutzung von Ge-Schichten, die mit der SME hergestellt werden, ist die Hintergrunddotierung durch den Surfactant. Da der beschriebene Platzwechselmechanismus von Ge mit Sb auf der Oberfläche nicht perfekt funktioniert, wird ein gewisser Anteil an Sb in die Ge-Schicht eingebaut und führt zu einer Hintergrunddotierung. Bei Wachstumstemperaturen um $T \approx 500^\circ\text{C}$ entsteht so eine n-Dotierung von $c_{\text{Sb}} = 10^{19}\text{ cm}^{-3}$, die einer Verwendung als Bauelement oder Solarzelle im Weg steht. Bei Erhöhung der Wachstumstemperatur auf $550^\circ\text{C} \leq T \leq 650^\circ\text{C}$ nimmt die Segregation von Sb so stark zu, dass die Hintergrunddotierung bis auf $c_{\text{Sb}} = 5 \cdot 10^{16}\text{ cm}^{-3}$ reduziert werden kann [97]. Dieses ist ebenfalls für die SME auf Si(001)-Substraten von WIETLER gezeigt worden, sodass eine vergleichsweise niedrige Hintergrunddotierung ($c_{\text{Sb}} \leq 4 \cdot 10^{16}\text{ cm}^{-3}$) erreicht werden kann [89].

3.1.2 Parameterraum für die Herstellung virtueller Ge-Substrate mit SME

Für die Herstellung virtueller Ge-Substrate durch die SME gibt es mehrere Anforderungen, sollen diese für Tandemsolarzellen eingesetzt werden. Einerseits soll eine möglichst dünne Ge-Schicht ($d \approx 50\text{ nm}$) gewachsen werden,

⁶Der Vektor, der nötig ist, um den Umlauf im ungestörten Kristall zu schließen, wird als Burgersvektor \vec{b} definiert. Der Burgersvektor \vec{b} erlaubt Rückschlüsse auf den vorliegenden Versetzungstyp und kann durch einen Burgersumlauf ermittelt werden. Dazu wird in dem gestörten Kristallgitter ein Umlauf um die Versetzung gebildet und anschließend dasselbe in einem ungestörten Kristall durchgeführt. [46]

damit diese in einer späteren Solarzelle als Tunnelübergang verwendet werden kann [8]. Als Tunnelübergang zwischen einer Si-Solarzelle und einer III-V-Solarzelle (beispielsweise GaAs) darf die Ge-Schichtdicke nicht zu groß sein, ansonsten wird der Wirkungsgrad der unteren Si-Solarzelle eingeschränkt. Bereits eine Ge-Schicht mit $d = 150 \text{ nm}$ würde so viel Licht absorbieren, dass der generierte Strom einer GaAs/Ge/Si - Tandemsolarzelle um $26,3\%$ ⁷ reduziert wird [37]. Andererseits muss die Ge-Schicht vollständig relaxiert sein, um möglichst wenig Gitterfehlpassung zu GaAs für ein defektfreies Wachstum zu gewährleisten.

Also ist eine möglichst dünne und vollständig relaxierte Ge-Schicht, die eine geringe Defektdichte n_d aufweist, das Ziel. Jedoch sind Schichtdicke und Defektdichte gegenläufig, da sich mit zunehmender Schichtdicke Versetzungen auslösen können [98]. Die Forderung nach möglichst dünnen Schichten ist also widersprüchlich zur Anforderung nach möglichst defektarmen Schichten. Insbesondere Durchstoßversetzungen müssen betrachtet werden, da diese sich aus der Ge-Schicht in die GaAs-Schicht fortsetzen können. Um Verluste infolge nichtstrahlender Rekombination im GaAs zu begrenzen, sind Versetzungsdichten kleiner $n_d \leq 10^6 \text{ cm}^{-2}$ (in der GaAs-Schicht) nötig [25]. Derartig geringe Defektdichten sollten folglich auch das Ziel für die Ge-Schicht sein, konnten bisher aber nicht mit SME-hergestellten Ge-Schichten erzielt werden. Ein weiterer Aspekt ist die Verunreinigung durch Sb, welches sich nach Abschluss des Wachstums an der Oberfläche befindet. So kann Sb zu Verunreinigungen bzw. einer Legierung in einer GaAs-Schicht führen, weshalb eine intrinsische Ge-Schicht auf der SME-Schicht benötigt wird, um mit einer Sb-freien Ge-Oberfläche zu enden.

Folglich soll in der vorliegenden Dissertation der SME-Prozess zur Herstellung virtueller Ge-Substrate für die Epitaxie von GaAs optimiert werden. Dazu werden zunächst Ge-Schichten mit SME hergestellt (Kapitel 5.2), die bei $600 \text{ °C} \leq T \leq 670 \text{ °C}$ unter ausreichend großem Sb-Fluss ($R_{Sb} \approx 2 \text{ MLmin}^{-1}$) gewachsen werden. Nach dem Abschluss der SME wird verbliebenes Sb desorbiert und intrinsisches Ge bei $T \approx 350 \text{ °C}$ aufgewachsen. Zunächst werden Ge-Schichten mit einer Gesamtdicke von $d = 500 \text{ nm}$ hergestellt, bei denen $d_{SME} = 300 \text{ nm}$ auf die durch SME hergestellte Schicht entfallen, um zu gewährleisten, dass die Schicht vollständig relaxiert ist.

⁷Dabei wird ausschließlich die Auswirkung der Absorption in der Ge-Schicht auf den Photostrom untersucht. Ausgehend von einer GaAs/Si-Tandemsolarzelle, in der die Ge-Schicht als Tunnelübergang benutzt wird. [37]

3.1.3 Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie

Eine Alternative zur SME ist die Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie (CME, engl. *carbon-mediated epitaxy*), die als Festphasenepitaxie durchgeführt wird. Dabei wird zunächst Ge amorph oder teilkristallin abgeschieden. Anschließend wird die Oberfläche mit Kohlenstoff beschichtet und die Ge-Schicht durch einen Tempervorgang rekristallisiert. So besteht die Möglichkeit, durch CME dünne Ge-Schichten (15-35 nm) auf Si(001) aufzuwachsen, die vollständig relaxiert sind [82, 99]. Verglichen mit Ge-Schichten, die durch Surfactant-modifizierte Epitaxie [100] (Kapitel 5.2) hergestellt werden, entsteht keine Hintergrunddotierung mit Sb. Bisher ist nicht untersucht worden, ob sich diese CME-hergestellten Ge-Schichten für die Epitaxie von III-V-Materialien wie GaAs eignen. Außerdem ist gezeigt worden, dass bei mehrstufigen CME-Prozessen Durchstoßversetzungen zum Teil an der Ge/Kohlenstoff-Grenzfläche enden. Kann dieser Mechanismus gezielt eingesetzt werden, können Durchstoßversetzungen reduziert und deutlich geringere Defektdichten erreicht werden [99].

Folglich sollen in dieser Arbeit zunächst Ge-Schichten durch CME hergestellt werden, die eine Schichtdicke von $d \leq 50 \text{ nm}$ aufweisen und hinsichtlich ihrer Eignung als virtuelles Ge-Substrat für die Epitaxie von GaAs untersucht werden.

3.2 Epitaxie von GaAs auf (virtuellen) Ge-Substraten

Während die Gitterfehlpassung von Si zu GaAs $f = 4,1\%$ beträgt (siehe Tabelle 3.1), ist die Gitterfehlpassung zwischen Ge und GaAs so gering ($f < 0,1\%$), dass GaAs auf Ge gewachsen werden kann, ohne dass Versetzungen infolge von Gitterfehlpassung entstehen. Durch die geringe Gitterfehlpassung kommt es bei dem Schichtwachstum nicht zu plastischer Relaxation (Versetzungsbildung), die die Schichtqualität beeinflusst. Außerdem sind die thermische Leitfähigkeit und der thermische Ausdehnungskoeffizient von Ge und GaAs sehr ähnlich. Allerdings ist der Unterschied der thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Si und Ge/GaAs größer als 100%. Die thermische Fehlpassung führt bei Abkühlprozessen (nach dem Schichtwachstum), zu einer doppelt so starken Kontraktion des Ge/GaAs gegenüber dem Si. Die daraus resultierende tensile Spannung kann zu einem Aufreißen der Schicht führen und als Nukleationszentrum für elektrisch aktive Defekte dienen [101].

Um die Ausbildung von Antiphasengrenzen (siehe Kapitel 2.2.2) zu verhindern, können Substrate mit einem Fehlschnitt ($\delta_{kip} \approx 6^\circ$ zur nächsten (111)-Ebene) verwendet werden, die bei ausreichender Temperatur zur Ausbildung einer

Materialparameter	Si	Ge	GaAs
Dichte ρ ($\frac{g}{cm^3}$)	2,33	5,32	5,32
therm. Leitfähigkeit σ ($\frac{W}{cm \cdot K}$)	1,3	0,58	0,55
Gitterkonstante a (\AA)	5,431	5,658	5,653
Gitterfehlpassung f zu Si	-	4,18%	4,09%
therm. Ausdehnungskoeffiz. α ($\frac{1}{^\circ C}$)	$2,6 \cdot 10^6$	$5,9 \cdot 10^6$	$5,7 \cdot 10^6$

 Tab. 3.1: Materialparameter von Si, Ge und GaAs bei $T = 23^\circ C$. [23]

doppel-atomar gestuften Ge-Oberfläche führen [61]. Im Folgenden wird die Notwendigkeit, fehlgeschnittene Substrate für das Wachstum von GaAs auf Ge zu verwenden, erklärt.

3.2.1 Vizinale Oberflächen

Sobald ein Festkörper unter einem flachen Winkel (gemessen zu seinen kristallographischen Achsen) geschnitten wird, entsteht eine neue Oberfläche mit unregelmäßigen Stufen, die eine überwiegend mono-atomare Höhe haben. Eine derartige Oberfläche wird als vizinale Oberfläche bezeichnet. Soll GaAs ohne Ausbildung von Antiphasengrenzen (siehe Kapitel 2.2.2) auf Ge aufgewachsen werden, muss eine doppel-atomar gestufte Ge-Oberfläche vorliegen [61], die in Abbildung 3.2 gezeigt ist. Für Si-Substrate ist zwar gezeigt worden, dass eine doppel-atomar gestufte Oberfläche mit geringem Fehlschnitt ($\delta_{kippe} < 0,5^\circ$) erreicht werden kann. Dafür werden aber ausreichend hohe Temperaturen ($800^\circ C \leq T \leq 1100^\circ C$) oder lange Wartezeiten ($10 \text{ min} \leq t \leq 30 \text{ min}$) benötigt [44, 102, 103, 104]. Werden Substrate mit einem Fehlschnitt von $\delta_{kippe} \approx 6^\circ$ zur nächsten (111)-Ebene (äquivalent zu 6° Fehlschnitt zur nächsten [110]-Richtung) verwendet, so reicht für Ge-Oberflächen eine abschließende Temperung bei $T \approx 640^\circ C$ für $t = 5 \text{ min}$ [105, 106, 107] zur Ausbildung der doppel-atomar gestuften Oberfläche.

Die Ausbildung einer doppel-atomar gestuften Oberfläche wird ausführlich bei CHADI [108] für eine vizinale Si(001)-Oberfläche erklärt; an dieser Stelle werden die Bezeichnungen von CHADI eingeführt (siehe Abbildung 3.3). Liegt eine mono-atomar gestufte (mit der Stufenhöhe $H_{ES} = \frac{a_0}{4}$) (001)-orientierte Oberfläche vor, so gibt es zwei verschiedene Stufentypen, die aufgrund der Anordnung der Dimerreihen auf den Terrassen unterschieden werden. Da die Oberfläche (sowohl für Si(001) und Ge(001)) eine 2x1-Rekonstruktion (siehe Oberflächenrekonstruktion in Kapitel 2.1.2) ausbildet, können diese Dimer-

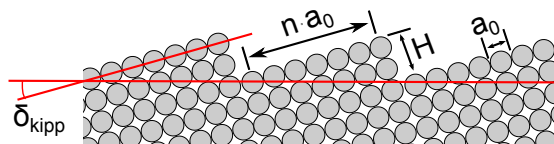


Abb. 3.2: Schematische Darstellung einer vızinalen Oberfläche mit doppelatomarer Stufung.

reihen entweder orthogonal zur Stufenkante (S_B -Konfiguration) oder parallel zu den Stufenkanten (S_A -Konfiguration) verlaufen (siehe Abbildung 3.3 (a)) [108, 109]. Liegt eine Stufe mit einer doppelatomaren Höhe ($H_{DS} = \frac{a_0}{2}$) vor, wird diese als D_B bezeichnet (siehe Abbildung 3.3 (b)). Die Stufen des Typs D_B dominieren, da die Orientierung der Dimerreihen orthogonal zur Stufenkante energetisch günstiger ist als die entsprechende parallele Ausrichtung (D_A). Liegt eine solche doppelatomar gestufte Oberfläche mit ausschließlich D_B -Stufen vor, wird auch von einer eindomänigen Oberfläche gesprochen [108].

Eine einfache Überlegung (nach KROEMER [55]) zeigt, dass die Ausbildung von Doppelstufen nicht nur über energetische Bevorzugung erklärt werden kann. Denn eine monoatomare Stufe würde sich (zur Ausbildung einer doppelatomaren Stufe) entweder mit einer Stufe links oder einer rechts paaren. Das macht je 50% Wahrscheinlichkeit für die Ausbildung einer doppelatomaren Stufe durch Paarung mit einer Stufe links oder rechts. Allerdings ist aber für eine Stufe rechts die Wahrscheinlichkeit zur Paarung mit einer Stufe rechts von dieser ebenfalls 50%, sodass es eine 25%-Wahrscheinlichkeit gibt, dass die Stufe sich weder mit einer Stufe links noch einer rechts paaren kann. In diesem Fall würde sich an jeder vierten Stufe eine Antiphasengrenze bilden, weil dort keine Doppelstufe ausgebildet werden kann. Da sich für einen höheren Fehlschnitt ebenfalls die Anzahl der Stufen erhöht, müsste sich auch die Anzahl der Antiphasengrenzen in diesem Modell erhöhen. Wie kann es also sein, dass mit zunehmendem Fehlschnitt die Ausbildung von Doppelstufen begünstigt wird?

Da das Si-Gitter (genauso wie das Ge-Gitter) aus zwei kubisch flächenzentrierten Subgittern, die um ein Viertel der Raumdiagonale verschoben sind (siehe Kapitel 2.2.2), besteht, ist es entscheidend, zu welchem Subgitter die Oberflächenatome (auf den Stufen) gehören. Es gibt zwei verschiedene Konfigurationen, die durch die oben beschriebene Ausrichtung der Dimerreihen zur

Stufenkante veranschaulicht werden: S_A -Konfiguration mit Dimerreihen parallel zu den Stufenkanten und S_B -Konfiguration mit Dimerreihen orthogonal zu den Stufenkanten. [102, 55]

Wenn nun zusätzlich eine energetische Bevorzugung eines Stufentyps vorliegt [44], führt diese dazu, dass Atome auf Terrassen des *Typ A* (analog zu S_A -Stufenkanten) zu *Typ B*-Stufenkanten (S_B) diffundieren, bis die *Typ A*-Stufen verschwunden sind. Dieses geschieht so lange, bis ausschließlich doppelatomare Stufen (D_B) auf der Oberfläche existieren [108]. Dabei gilt, je größer der Fehlschnitt ist, desto kürzer wird die Terrassenlänge wodurch sich die Diffusionszeit bis zur nächsten Stufenkante verringert.

Die Ausbildung einer doppel-atomar gestuften Oberfläche für (001)-orientierte Ge-Oberflächen hängt von dem Fehlschnitt des verwendeten Substrats ab. Der Fehlschnitt kann durch Messung von Rockingkurven mit einem Röntgendiffraktometer (siehe Kapitel 4.2.2) bestimmt werden [110]. Für Ge-Schichten auf Si(001)-Substraten mit einem Fehlschnitt von $\delta_{\text{kip}} \approx 6^\circ$ zur nächsten (111)-Ebene ist gezeigt worden, dass der azimutale Fehlschnitt ϕ_{mis} (siehe Abbildung 4.6) nicht mehr als 26° von der [110]-Richtung abweichen darf. Ansonsten kommt es nicht zur Ausbildung einer doppel-atomar gestuften Oberfläche, sondern zu einer unregelmäßig angeordneten, mono-atomar gestuften Oberfläche [111, 112, 113, 114]. In situ kann die Anordnung der Oberfläche durch Beugung hochenergetischer Elektronen in Reflexion (RHEED, engl. *reflection high energy electron diffraction*) (siehe Abbildung 4.3 in Kapitel 4.1) sichtbar gemacht werden und als Kontrolle der Oberflächenpräparation vor und nach dem jeweiligen Wachstum verwendet werden [115].

3.2.2 Epitaxie von GaAs auf Ge

Die Epitaxie von GaAs auf Ge soll aus Sicht einer möglichst defektfreien GaAs-Schicht geführt werden. Wie bereits in Kapitel 2.2.2 gezeigt, handelt es sich um das Wachstum eines polaren (GaAs) auf einem unpolarem (Ge) Material. Dadurch können Antiphasengrenzen entstehen, die durch geeignete Substratwahl (mit 6° Fehlschnitt zur nächsten (111)-Ebene, siehe Kapitel 3.2.1, verhindert werden können. Dafür muss allerdings gewährleistet sein, dass vor dem Wachstum die Substrate mit einer ausreichend hohen Temperatur getempert werden, sodass sich eine doppel-atomar gestufte Ge-Oberfläche ausbilden kann ($T \approx 640^\circ\text{C}$) [105, 116, 117]. Über diese Voraussetzungen gibt es in der Literatur eine einheitliche Meinung, sobald allerdings die Wachstumsbedingungen von GaAs selber betrachtet werden, gibt es verschiedene Ansätze, eine antiphasengrenzenfreie GaAs-Schicht zu wachsen. Die Diskussion in der Literatur wird an dieser Stelle nur für Schichten, die mit dem

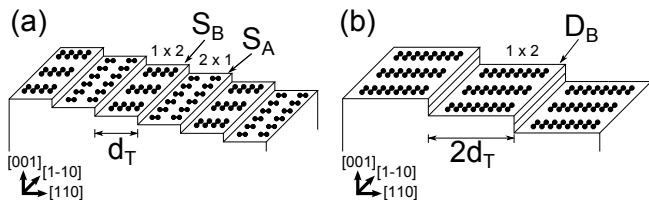


Abb. 3.3: Vizinale 2×1 -rekonstruierte Oberfläche (gültig für Si(001) und Ge(001)). (a) Mono-atomar gestufte Oberfläche, Stufentyp ausgehend von der Orientierung der Dimerreihen. In S_B -Konfiguration, verlaufen die Dimerreihen orthogonal zu den Stufenkanten. In S_A -Konfiguration verlaufen die Dimerreihen parallel zu den Stufenkanten. (b) Stufen mit einer doppel-atomaren Höhe werden als D_B bezeichnet. Die Orientierung der Dimerreihen ist orthogonal zur Stufenkante. Eigene Darstellung nach CHADI [108].

Verfahren der Molekularstrahlepitaxie hergestellt worden sind, vorgestellt. Für eine Betrachtung der GaAs-Schichten, die durch (metall-organische) Gasphasenabscheidung ((MO)CVD engl. *metal organic chemical vapour deposition*) ([107, 118, 119, 120]) hergestellt worden sind, wird auf die Literatur verwiesen. In (MO)CVD-Prozessen werden Trägergase verwendet, die einen zusätzlichen Einfluss auf die Ausbildung einer doppel-atomar gestuften Ge-Oberfläche haben können.

Einerseits besteht die Möglichkeit, in einer As-gesättigten Umgebung mit dem Wachstum zu starten, wobei zwischen As_2 - und As_4 -Partialdruck [61, 115, 121, 122] unterschieden werden muss. Während andererseits genauso für den Beginn des Wachstums mit Ga [117] gezeigt worden ist, dass defektfreie GaAs-Schichten auf Ge-Substraten möglich sind, gibt es Nachweise, dass Ga die doppel-atomare Stufung einer Ge(001)-Oberfläche aufhebt [123]. Typischerweise wird GaAs bei Temperaturen um $T \approx 600^\circ\text{C}$ und einer Wachstumsrate um $R \approx 1 \frac{\mu\text{m}}{\text{h}}$ auf Ge- oder Si-Substraten (Ge/ $Si_{1-x}Ge_x$ /Si, mit einem gradierten Puffer) gewachsen. Außerdem sind in jüngerer Vergangenheit GaAs-Schichten mit Migrations-unterstützter Epitaxie (MEE, engl. *migration enhanced epitaxy* [25]) hergestellt worden [105, 106, 116, 124, 125, 126]. Dieser Ansatz basiert auf einem MBE-Verfahren, bei dem zunächst Monolage für Monolage alternierend As und Ga gewachsen werden ($T \approx 300^\circ\text{C}$ für bis zu 20 ML). Anschließend wird die Wachstumstemperatur auf $T \approx 600^\circ\text{C}$ erhöht und beide Materialien gleichzeitig gewachsen. Allerdings kommt es bei diesem Ansatz zu einem weiteren Typ an Defekten in den GaAs-Schichten,

den pyramidenförmigen Stapelfehlern [126]. Obwohl diese keine Ga-Ga- oder As-As-Bindungen aufweisen, sind sie dennoch nichtstrahlende Rekombinationszentren für Ladungsträger [24]. Typischerweise werden GaAs-Schichten mit mehreren μm Dicke gewachsen, da es mit zunehmender Schichtdicke zu einer Auslöschung von Antiphasengrenzen kommt [57, 58, 59, 122].

4 Charakterisierungsmethoden

Die hergestellten heteroepitaktischen GaAs- und Ge-Schichten erfordern genauso wie die Si-Substrate eine umfassende Charakterisierung. Mit den vorgestellten Charakterisierungsmethoden kann die Herstellung virtueller Ge-Substrate und das nachfolgende heteroepitaktische Wachstum von GaAs untersucht, verstanden und optimiert werden. Dazu werden die verwendeten Charakterisierungsmethoden grundlegend erklärt und auf die Anwendung an Halbleitermaterialien (Si/Ge/GaAs) sowie deren Oberflächen bezogen. Darüber hinaus werden die verwendeten Geräte am Institut für Materialien und Bauelemente der Elektronik sowie des Laboratoriums für Nano- und Quantenengineering der Leibniz Universität Hannover genannt.

4.1 Elektronenbeugung (RHEED)

Die Beugung hochenergetischer Elektronen in Reflexion (RHEED, engl. *reflection high energy electron diffraction*) ist eine in situ Analysemethode zur Charakterisierung dünner Schichten, insbesondere zur zerstörungsfreien Beobachtung von Wachstumsprozessen, während der Molekularstrahlepitaxie eingesetzt wird. BRAUN [127] und INO [128] stellen die theoretischen Grundlagen für diesen Abschnitt dar. Hochenergetische Elektronen (Beschleunigungsspannung $10 \text{ keV} < U < 50 \text{ keV}$) werden unter einem flachen Winkel β (typischerweise $0^\circ < \beta < 4^\circ$) auf die zu untersuchende Probe eingestrahlt und aufgrund ihrer Welleneigenschaften an der Oberfläche gestreut [127]. Der reflektierte und gebeugte Elektronenstrahl wird auf einem Fluoreszenzschirm sichtbar gemacht und erzeugt ein charakteristisches Beugungsmuster der zu untersuchenden Probe. Dieses wird von einer CCD-Kamera erfasst und auf einen Computer übertragen. Anhand dessen können Rückschlüsse über Prozesse auf der Oberfläche während des Wachstums gewonnen werden. In Abbildung 4.1 kann der schematische Grundaufbau für die Beugung hochenergetischer Elektronen bei Reflexion nachvollzogen werden.

Aufgrund des flachen Einstrahlwinkels und der verwendeten Beschleunigungsspannung dringen die Elektronen nur in die obersten Atomlagen der Oberfläche ein [129]. Diese Oberflächensensitivität von RHEED erlaubt eine genaue Charakterisierung der ersten Netzebenen des Kristallgitters. So können neben der charakteristischen Oberflächenrekonstruktion (siehe Kapitel 2.1.2) beispielsweise Relaxationsprozesse während epitaktischen Wachstums [72, 130] sichtbar gemacht werden oder die Wachstumsrate durch die Beobachtung periodischer RHEED-Oszillationen, aufgrund von Intensitätsänderungen des spekularen Reflexes, bestimmt werden [131, 132]. Als spekulärer Reflex wird

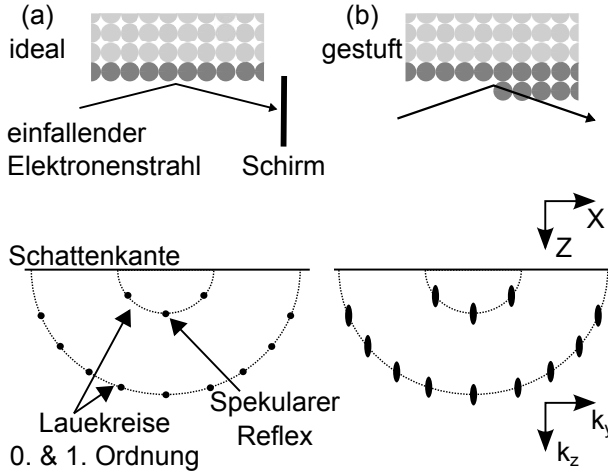


Abb. 4.1: Oberflächenstrukturen und entsprechende RHEED-Beugungsbilder. Das Substrat ist in Hellgrau, der aufwachsende Film in Dunkelgrau nach HENZLER und GÖPEL [129] dargestellt.

das Abbild des auf der untersuchten Oberfläche reflektierten Strahls auf dem Fluoreszenzschirm bezeichnet.

Streutheorie an Oberflächen für RHEED-Analysen

Die Streutheorie an Oberflächen ist ein Spezialfall der allgemeinen Streutheorie für Festkörpermateriale, die auf das oberflächensensitive Analyseverfahren RHEED zutrifft. Aus Sicht einer Anwendung von RHEED wird eine kurze Zusammenfassung der relevanten Inhalte, die sich an DEMTRÖDER [133] und HUNKLINGER [134] orientieren, gegeben. Die allgemeine Streutheorie für Festkörper wird beispielsweise bei KITTEL [135] oder ASHCROFT und MERMIN [136] beschrieben.

Auf die Probe einfallende Elektronen können aufgrund des Welle-Teilchen-Dualismus als Wellen mit dem Wellenvektor \vec{k}_0 beschrieben werden. Der Wellencharakter von Teilchen ist erstmals von DE BROGLIE im Jahr 1924 [137] postuliert worden, mit dessen Hilfe die Streuung von Elektronen an einem Kristallgitter beschrieben werden kann. Die Elektronenbeugung ist ein Spezialfall der Streuung, bei dem Materiewellen (Elektronen) an Materie (Gitteratome) gebeugt werden. Zur Beschreibung der Beugung an einem Kristall wird der reziproke Raum [138], der von reziproken Gittervektoren

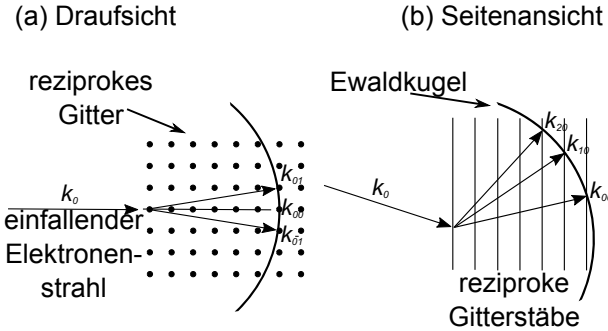


Abb. 4.2: Schematische Konstruktion der Ewaldkugel [139] in einem reziproken kubischen Gitter, Draufsicht (a) und Seitenansicht (b) nach BRAUN [127].

aufgespannt wird, verwendet. Reziproke Gittervektoren haben die Dimension einer inversen Länge. Ferner wird angenommen, dass die einfallenden Elektronen elastisch an den Gitteratomen gestreut werden, sodass gilt: $|\vec{k}_0| = |\vec{k}|$. Einfallende Elektronen mit dem Wellenvektor \vec{k}_0 werden an der Probenoberfläche gebeugt und unter Erfüllung der Streubedingung $\vec{K} = \vec{G}$ treten Beugungsreflexe auf. Dabei ist $\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}_0$ der Streuvektor und \vec{G} der reziproke Gittervektor. Zusätzlich ist die Reflexion der einfallenden Elektronen auf dem Fluoreszenzschirm zu sehen und wird als spekularer Reflex bezeichnet. Die Orientierungen der Probe zum einfallenden Elektronenstrahl, bei der die Streubedingung erfüllt ist, lässt sich mithilfe der Ewaldkugel [139] geometrisch finden und wird in Abbildung 4.2 (a) gezeigt. Der Wellenvektor \vec{k}_0 wird in der Mitte des reziproken Gitters eingezeichnet und ein Kreisbogen bzw. eine Kugel im dreidimensionalen Fall mit dem Radius k_0 um den Anfangspunkt geschlagen. In den Punkten, in denen die Ewaldkugel das reziproke Gitter berührt bzw. schneidet, ist die Streubedingung erfüllt und ein gebeugter Strahl in die jeweilige Richtung \vec{k}_{ij} tritt auf. Da bei der Beugung hochenergetischer Elektronen bei Reflexion unter einem flachen Winkel β eingestrahlt wird, findet die Streuung der einfallenden Elektronen ausschließlich an der Oberfläche der Probe statt. Die reziproken Gitterpunkte eines zweidimensionalen Netzes lassen sich im dreidimensionalen als unendlich lange Stäbe (reziproke Stäbe), die senkrecht auf der Oberfläche stehen, darstellen. Abbildung 4.2 (b) zeigt die schematische Konstruktion der Ewaldkugel in Seitenansicht. Bei jedem Schnittpunkt der Ewaldkugel mit einem Stab des reziproken Netzes tritt ein Beugungsreflex auf, der, sofern es sich um

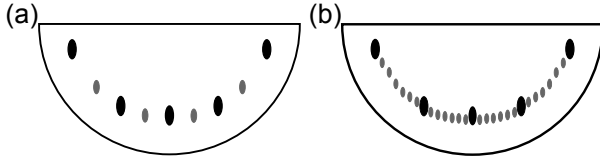


Abb. 4.3: Schematisches RHEED-Beugungsbild einer vızinalen Ge oder Si (001)-orientierten Oberfläche. (a) 2x1- bzw. 1x2-rekonstruierte Oberfläche. (b) In [-110]- bzw. [1-10]-Richtung (der einfallende Elektronenstrahl ist parallel zu den Stufenkanten) tritt eine Aufspaltung der Hauptreflexe auf. Zwischen den Hauptreflexen der 2x1-Rekonstruktion sind 6 (meistens schwach [129]) erkennbare Nebenreflexe zu erkennen. Diese entstehen bei einer doppel-atomar gestuften Oberfläche (D_B).

eine ideale Oberfläche handelt, als Beugungsbild ein Muster aus auf einem Kreisbogen angeordneten Punkten hat. In der Praxis werden häufig jedoch statt punktförmiger Reflexe senkrechte Striche beobachtet, die auf nicht ideale Oberflächen zurückzuführen sind. In der Streutheorie von Oberflächen bedeutet das, dass endlich dicke reziproke Stäbe die Ewaldkugel schneiden. Nicht ideale Oberflächen werden beispielsweise durch eine Verkippung der Probe (engl. *Miscut*), durch Unebenheiten auf der Oberfläche wie atomare Stufen oder durch Kristallfehler verursacht. Abbildung 4.1 zeigt schematisch, wie die Oberflächenstruktur das RHEED-Beugungsbild beeinflusst. [129] Eine raue Oberfläche führt beispielsweise zu abnehmendem Kontrast, eine facettierte Oberfläche zu einer Aufspaltung der Beugungsreflexe. Deswegen kann die Beugung hochenergetischer Elektronen bei Reflexion eingesetzt werden, um die Präparation der Oberfläche vor und das Ergebnis nach einem Wachstumsprozess zu überprüfen.

Die im Rahmen dieser Dissertation verwendeten fehlgeschnittenen Substrate ($\delta_{kip} \approx 6^\circ$ zur nächsten (111)-Ebene) sollen bei entsprechender Präparation eine doppel-atomar gestufte Oberfläche aufweisen (siehe Kapitel 5.1.3), die zu einer Aufspaltung der einzelnen Hauptreflexe führt [115]. Liegt also eine doppel-atomar gestufte Oberfläche (D_B) vor, ist in [110]- bzw. [-1-10]-Richtung (der einfallende Elektronenstrahl ist orthogonal zu den Stufenkanten) eine 2x1-rekonstruierte Oberfläche zu erkennen (siehe Abbildung 4.3(a)), während in [-110]- bzw. [1-10]-Richtung eine Aufspaltung der Hauptreflexe auftritt, dargestellt in Abbildung 4.3 (b). Das bedeutet, dass die Hauptreflexe der 2x1-Rekonstruktion zu erkennen sind und zwischen diesen 6 (meistens schwach [129]) erkennbare Nebenreflexe auftreten (siehe Kapitel 5.4 für Si(001)

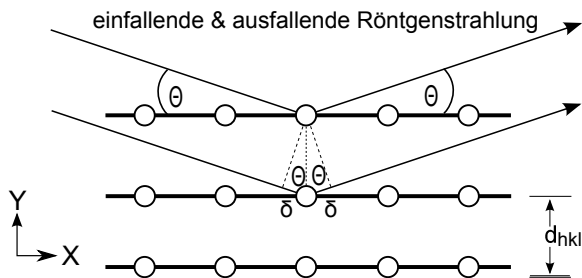


Abb. 4.4: Schematische Darstellung der BRAGG-Bedingung.

und Kapitel 5.10 für Ge(001)). Dabei gilt, dass die Periodizität der Terrassen der $\frac{1}{n}$ -fache atomare Abstand der Terrassen ist. Bei 6 Nebenreflexen bedeutet dies einen atomaren Abstand von $\frac{1}{7}$ zwischen den Reflexen und einer Terrassenbreite von ≈ 7 Atomen [140]. Diese Terrassenbreite entspricht genau der einer Ge(001)-Oberfläche mit einem Fehlschnitt von $\delta_{kipf} \approx 6^\circ$. In der Literatur ist dieses für Si und Ge vorwiegend mithilfe der Beugung niederenergetischer Elektronen (LEED, engl. *low energy electron diffraction*) untersucht [102, 103, 111, 141] worden, welches sich hauptsächlich in der Geometrie zur Probenuntersuchung von RHEED unterscheidet. Für die Untersuchungen der vorliegenden Dissertation stehen an den MBE-Anlagen ausschließlich RHEED-Systeme⁸ zur Verfügung.

4.2 Röntgenbeugung (XRD)

Zur strukturellen Untersuchung kristalliner Materialien wird die Röntgenbeugung (XRD, engl. *X-ray diffraction*) verwendet. Die Beugung von Photonen an regelmäßigen Strukturen geht auf VON LAUE zurück, der im Jahr 1912 die Wechselwirkung von Photonen mit regelmäßiger Materie postulierte [142, 143]. Dabei wechselwirken die Röntgenstrahlen mit Elektronen der Gitteratome in einem kristallinen Material. Dieses Verfahren kann angewendet werden, um ex situ durch charakteristische Beugungserscheinungen Rückschlüsse auf strukturelle Eigenschaften heteroepitaktischer Schichten zu ziehen. Die Grundlagen der Röntgenbeugung und weiterführende Einblicke in die Untersuchung dünner heteroepitaktischer Schichten werden bei SPIESS [52] beschrieben. Die BRAGG-Bedingung bildet die Grundlage für die

⁸Die verwendeten RHEED-Systeme sind Teil der Anlagenbeschreibung in Kapitel 5.1.1

Beschreibung der Röntgenbeugung [144]:

$$n\lambda = 2d_{hkl}\sin(\theta), (n\in\mathbb{N}) \quad (4.1)$$

und wird in Abbildung 4.4 schematisch dargestellt. Einfallende Röntgenstrahlung (unter dem Winkel Θ) der Wellenlänge λ wird an unterschiedlichen Netzebenen mit dem Abstand d gebeugt. Dabei kommt es zu konstruktiver Interferenz der ausfallenden Strahlen, wenn der Gangunterschied δ ein ganzzahliges Vielfaches ($n\in\mathbb{N}$) der Wellenlänge λ ist. Über die geometrische Beziehung $2\delta = 2d_{hkl}\sin(\Theta)$ kann folglich der Netzebenenabstand d_{hkl} aus einem Röntgendiffraktogramm abgeleitet werden. Der Netzebenenabstand d_{hkl} lässt sich durch die Millerschen Indizes (hkl ($h, k, l\in\mathbb{N}$)) mit der Gitterkonstante a verknüpfen zu:

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

Die in der vorliegenden Dissertationen gezeigten Röntgenmessungen sind mit einem D8 DISCOVER der Firma BRUKER durchgeführt worden. Das verwendete Diffraktometer ist mit einer Euler-Wiege ausgestattet, die gewährleistet, dass sich während der Messung bei variierendem Winkel die Abstände von Röntgenröhre und Detektor zur Probe nicht ändern. Durch eine kippbare Röntgenröhre mit Kupferanode und Strichfokus sind auch Messungen unter streifendem Einfall zur Bestimmung der in-plane Gitterkonstante möglich. Durch einen Göbelspiegel werden die Röntgenstrahlung parallelisiert und die Strahlungsanteile der K_{β} -Linie entfernt. Die Reduzierung auf den $K_{\alpha 1}$ -Anteil erfolgt durch einen Monochromator (wahlweise symmetrisch oder asymmetrisch). Details zu dem Monochromator sowie weiterführende Informationen zum verwendeten Messaufbau können bei TETZLAFF [99] nachgelesen werden. Für Reflektometriemessungen steht eine Schneidblende (engl. *knife-edge*) zur Verfügung.

Nachfolgend werden die im Rahmen dieser Dissertation verwendeten Messtypen beschrieben, siehe Abbildung 4.5. Zur anschaulichen Darstellung wird eine schematische Übersicht im reziproken Raum [138] benutzt, die erstmals für die Beschreibung von Röntgenreflexen von EWALD [139] eingesetzt worden und vergleichbar mit der Darstellung in Kapitel 4.1 ist.

4.2.1 Theta-2Theta-Messung

Um die kristalline Struktur der virtuellen Ge-Substrate zu untersuchen, werden $\Theta - 2\Theta$ -Messungen durchgeführt. Mithilfe dieser hochauflösenden

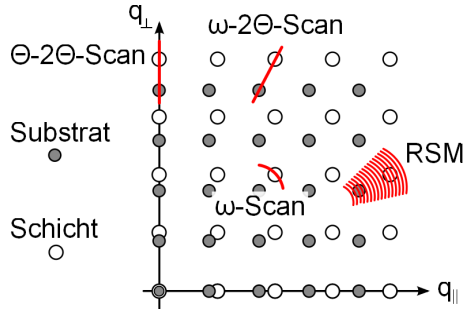


Abb. 4.5: Verwendete Messtypen zur Röntgenbeugung (XRD). Schematisch dargestellt sind $\Theta - 2\Theta$ -, $\omega - 2\Theta$ -, ω -Messung sowie die Aufnahme einer reziproken Gitterkarte anhand des reziproken Raums.

Messungen kann die out-of-plane Gitterkonstante a_{\perp} der Ge-Schichten sowie der Relaxationsgrad (siehe Kapitel 2.2 bestimmt werden. Abbildung 4.5 zeigt die $\Theta - 2\Theta$ -Messung im reziproken Raum schematisch, die entlang der G_{\perp} -Achse verläuft.

Typischerweise wird bei dem Materialsystem Si/Ge der symmetrische (004)-Reflex untersucht. Abweichend davon kann es auch sinnvoll sein, den (002)-Reflex zu untersuchen, wenn zusätzlich GaAs untersucht werden soll, da für GaAs der (002)-Reflex im Gegensatz zu Si und Ge nicht verboten⁹ ist [145]. Je nach zu untersuchendem Reflex werden die Proben automatisiert kristallographisch so ausgerichtet, dass die Netzebenennormale die Beugungsbedingung des zu untersuchenden Reflexes erfüllt. Im Falle tetragonaler Verzerrung kann beispielsweise für Ge-Schichten aus solchen Messungen mit den von BRANTLEY [146] bestimmten elastischen Konstanten für Ge die in-plane Gitterkonstante a_{\parallel} bestimmt werden [52]:

$$\frac{\Delta a_{\parallel}}{a_{Si,\parallel}} = \frac{1}{\frac{C_{11}+2C_{12}}{C_{11}} - 1} \left(\frac{C_{11} + 2C_{12}}{C_{11}} \cdot f - \frac{\Delta a_{\perp}}{a_{Si,\perp}} \right) \quad (4.3)$$

wobei $\Delta a_{\parallel} = a_{Ge,\parallel} - a_{Si,\parallel}$ und $\Delta a_{\perp} = a_{Ge,\perp} - a_{Si,\perp}$ mit den Werten für die elastischen Konstanten $C_{11} = 129,2 \cdot 10^9 Pa$, $C_{12} = 47,9 \cdot 10^9 Pa$, $C_{44} = 67 \cdot 10^9 Pa$ sind. Sofern das Substrat unverspannt bleibt, gilt, dass die Si in-plane Gitterkonstante gleich dem Volumenwert der Si-Gitterkonstante

⁹Verbotene Reflexe sind abhängig von der Kristallstruktur des untersuchten Materials, die entsprechenden Auslöschungsregeln können beispielsweise bei WILLIAMS [145] nachgelesen werden.

ist ($a_{Si_i,||} = a_{Si}$). Anschließend lässt sich der Relaxationsgrad (Kapitel 2.2) für epitaktische Ge-Schichten auf Si durch folgende Formel berechnen:

$$R = \frac{1}{0,0418} \cdot \frac{\Delta a_{||}}{a_{Si_i,||}}. \quad (4.4)$$

4.2.2 Omega-Messung

Bei ω -Messungen (auch Rockingkurve genannt) wird die Probe zunächst wie bei $\Theta - 2\Theta$ -Messungen automatisiert kristallographisch ausgerichtet. Anschließend wird jedoch lediglich der ω -Winkel variiert, während der 2Θ -Winkel auf dem Beugungswinkel der zu untersuchenden Netzebenenchar festgehalten wird. In Abbildung 4.5 wird die ω -Messung im reziproken Raum schematisch dargestellt. Anhand der resultierenden gaußförmigen Messkurve können Aussagen zur kristallinen Perfektion der untersuchten Schicht getroffen werden. Dazu wird die Halbwertsbreite ι_{mess} (FWHM, engl. *full width at half maximum*) herangezogen. Allerdings müssen einige Annahmen bezüglich der zu untersuchenden Probe und des Messaufbaus getroffen werden, sodass sich die gemessene Halbwertsbreite wie folgt zusammensetzt [147]:

$$\iota_{mess}^2 = \iota_{intr}^2 + \iota_{mono}^2 + \iota_{kip}^2 + \iota_{zerr}^2 + \iota_{dicke}^2 + \iota_{kr}^2. \quad (4.5)$$

Dabei sind ι_{intr} der intrinsische Beitrag der Rockingkurve, ι_{mono} der Beitrag des verwendeten Monochromators, ι_{kip} der Beitrag durch Gitterverkipfung, ι_{zerr} der Beitrag durch Gitterverzerrung, ι_{dicke} der schichtdickenabhängige Beitrag und ι_{kr} der Beitrag durch Krümmung der Probe. Bei TETZLAFF [99] können die zu treffenden Annahmen und Abschätzungen für den verwendeten Messaufbau detailliert nachgelesen werden, die kurz im Anhang auf Seite 128 aufgeführt sind. Aus diesen Vereinfachungen ergibt sich für die Versetzungsdichte n_d folgender Ausdruck [99]:

$$n_d = \frac{\iota_{mess}^2 - \frac{17090}{d_{Schicht}}}{2,2\pi \cdot \ln 2 \cdot b^2}. \quad (4.6)$$

Diese Formel ist gültig für die Charakterisierung von epitaktischen Ge-Schichten hinsichtlich ihrer Defektdichte um den (004-Reflex). Hierbei ist b der Betrag des Burgersvektor \vec{b}^{10} , der abhängig vom vorliegenden Versetzungstyp ist. Sollen epitaktische GaAs-Schichten hinsichtlich ihrer Defektdichte charakterisiert werden, kann die hier vorgestellte Näherung ebenfalls verwendet

¹⁰siehe Fußnote 6 in Kapitel 3.1.1

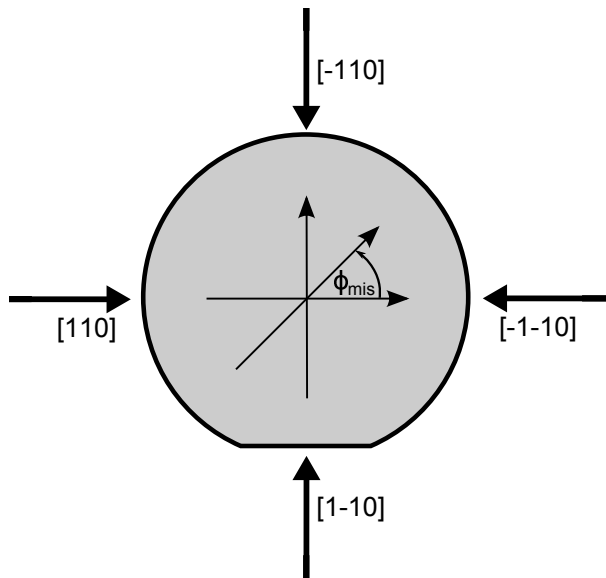


Abb. 4.6: Bestimmung der azimutalen Orientierung des Fehlschnitts ϕ_{mis} .

werden. Zum einen ist der kristallographische Aufbau der Diamantstruktur und der Zinkblendestruktur identisch, beide bestehen aus zwei kubisch flächenzentrierten Subgittern (fcc), die um ein Viertel der Raumdiagonale verschoben sind. Zum anderen sind die untersuchten GaAs-Schichten alle dünner als $d_{GaAs} < 1 \mu\text{m}$, sodass die verwendete Näherung ([148], siehe Anhang auf Seite 128) benutzt werden kann. Für die Bestimmung der Defektdichte der GaAs-Schichten wird der GaAs(002)-Reflex verwendet, da für GaAs der (002)-Reflex im Gegensatz zu Si und Ge nicht verboten¹¹ ist [145].

Für das Wachstum von GaAs auf virtuellen Ge-Substraten werden wie in Kapitel 3.2 beschrieben verkippte Substrate benötigt. Ausgangspunkt sind also verkippte Si-Substrate ($\delta_{kippp} = 6^\circ$ zur nächsten (111)-Ebene), auf denen zunächst Ge aufgewachsen wird. Um die Substratverkippfung δ_{kippp} zu bestimmen, können ω -Messungen benutzt werden. DOUCETTE [110] beschreibt das Vorgehen, das aus acht einzelnen ω -Messungen bei unterschiedlicher azimutaler Ausrichtung ϕ des Substrats besteht. Durch Bestimmung der Winkelpositionen ω_i bei variierender azimutaler Ausrichtung ($\omega_1, \phi = 0^\circ$; $\omega_2, \phi = 90^\circ$; $\omega_3, \phi = 180^\circ$; $\omega_4, \phi = 270^\circ$) kann die Orientierung der unter-

¹¹siehe Fußnote 9

suchten Netzebenenschar zur Substratoberfläche mit einer Genauigkeit von $\pm = 0,01^\circ$ bestimmt werden. Um einen Fehler durch die Probenaufgabe selbst auszuschließen, werden die ω -Messungen nach azimuthaler Drehung der Probe um 180° wiederholt ($\omega_{1,t}-\omega_{4,t}$). Für die Verkipplungskomponente $\delta_{1,2}$, die die Verkipplung parallel zur Flat beschreibt, gilt:

$$\delta_{1,2} = \frac{1}{4}(\omega_1 - \omega_2 + \omega_{2,t} - \omega_{1,t}). \quad (4.7)$$

Mit der Verkipplung orthogonal zur Flat, die analog zu ermitteln ist, ergibt sich die maximale Verkipplung δ_{kippl} aus:

$$(\tan\delta)^2 = (\tan\delta_{1,2})^2 + (\tan\delta_{3,4})^2. \quad (4.8)$$

Die azimuthale Orientierung des Fehlschnitts ϕ_{mis} ergibt sich aus:

$$\phi_{mis} = \arctan(\cot\delta_{1,2} + \tan\delta_{3,4}) \quad (4.9)$$

und wird zur [110]-Richtung angegeben.

Die in der vorliegenden Dissertation benutzten Si-Substrate sind hinsichtlich ihres Fehlschnitts anhand des (004)-Reflexes charakterisiert worden.

4.2.3 Omega-2Theta-Messungen und reziproke Gitterkarten

Im Gegensatz zu $\Theta - 2\Theta$ -Messungen entspricht bei $\omega - 2\Theta$ -Messungen der Detektorwinkel nicht dem doppelten Einfallswinkel, weil bei dieser Messung asymmetrische Reflexe untersucht werden. Bei asymmetrischen Reflexen sind die untersuchten Netzebenen nicht parallel zur Oberfläche, weshalb sich bei einer solchen Messung die out-of-plane Gitterkonstante a_\perp als auch die in-plane Gitterkonstante a_\parallel bestimmen lassen. Durch Kenntnis beider Gitterkonstanten kann der Relaxationsgrad, ohne den Umweg über die Elastizitätstheorie gehen zu müssen (Kapitel 4.2.1), bestimmt werden.

Durch die wiederholte Aufnahme von $\omega - 2\Theta$ -Messungen können auch reziproke Gitterkarten (RSM, engl. *reciprocal space maps*) erstellt werden. Es handelt sich bei RSM um zweidimensionale Diffraktogramme, die durch einzelne $\omega - 2\Theta$ -Messungen erzeugt werden. Abbildung 4.5 zeigt schematisch die Erstellung einer RSM im reziproken Raum. Allerdings sind RSM zeitintensiver als einzelne $\Theta - 2\Theta$ -Messungen.

4.2.4 Röntgenreflektometrie (XRR)

Die Röntgenreflektometrie (XRR, engl. *X-ray reflectivity*) ist erstmals von PARRAT 1954 eingesetzt worden, um Mehrschichtsysteme zu charakterisieren [149]. XRR erlaubt eine einfache Bestimmung von Dicken amorpher und kristalliner Schichten. Dabei werden Röntgenstrahlen in einem flachen Einfallswinkel Θ (für die vorliegende Dissertation gilt $0^\circ \leq \Theta \leq 2,5^\circ$) auf die Probe eingestrahlt und die Intensität des reflektierten Röntgenstrahls als Funktion des Winkels 2Θ aufgetragen. Durch einen Unterschied im Brechungsindex der Schichten [52] werden die Röntgenstrahlen an der Oberfläche und inneren Grenzflächen reflektiert. Im Vergleich zur Röntgenbeugung werden keine Netzebenen durch Beugung der einfallenden Röntgenstrahlen an diesen aufgelöst, sondern einzelne Schichten von Mehrschichtsystemen durch Interferenz an dünnen Schichten [134] dargestellt. Ferner ist es durch Simulation des Schichtsystems und Vergleich mit den Messdaten möglich, Ober- sowie Grenzflächenrauheiten zu bestimmen. Eine einfache Abschätzung der Schichtdicke $d_{Schicht}$ ist über das Verhältnis der Wellenlänge λ zur Differenz der Oszillationsmaxima gegeben [150]:

$$d_{Schicht} \approx \frac{\lambda}{2\Delta\Theta}. \quad (4.10)$$

In der vorliegenden Dissertation sind die Dicken von Kalibrationsschichten durch XRR bestimmt worden. Dieses ist mit dem Programm LEPTOS der Firma BRUKER durchgeführt worden, indem anhand eines Schichtmodells eine Simulationskurve erstellt worden ist. Diese Simulationskurve ist mit der Messkurve verglichen (durch das Programm) und schrittweise angenähert worden, wodurch die Parameter Schichtdicke und Rauheit indirekt bestimmt werden konnten.

4.3 Elektronenmikroskopie (SEM/TEM)

Die klassische Lichtmikroskopie reicht aufgrund der Wellenlängen von sichtbarem Licht ($380 \text{ nm} < \lambda < 780 \text{ nm}$) und der beugungsbedingten Auflösungsgrenze [133]

$$\Delta x \geq \frac{\lambda}{2} \quad (4.11)$$

nicht aus, um Strukturen kleiner als 100 nm zu analysieren. Unter Verwendung von beschleunigten Elektronen anstelle sichtbaren Lichts können solche Strukturen untersucht werden. Die Wellenlänge der beschleunigten Elektronen berechnet sich unter Verwendung der DE-BROGLIE-Beziehung

[137] zu

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meU}}. \quad (4.12)$$

In diesem Fall ist m die Masse eines Elektrons, h das Planck'sche Wirkungsquantum und e die Elementarladung. Gemäß Gleichung 4.12 besitzen Elektronen, die durch thermische Emission oder durch Feldemission erzeugt werden, bei einer Beschleunigungsspannung $U_b = 10 \text{ kV}$ eine Wellenlänge von $\lambda_e \approx 4 \text{ pm}$ [133]. Diese Form der Mikroskopie, die als Elektronenmikroskopie bezeichnet wird, geht auf RUSKA [151] zurück. Es können je nach Methode sowohl Informationen über die Probenoberfläche als auch über das Volumenmaterial gewonnen werden. Zu unterscheiden sind Messungen bei statischem Bild (beispielsweise: Transmissionselektronenmikroskopie) von Messungen, bei denen die Probenoberfläche abgerastert wird (beispielsweise Rasterelektronenmikroskopie). Voraussetzung für eine Untersuchung ist, dass die Probenoberfläche elektrisch leitend oder zumindest halbleitend ist, um elektrostatische Aufladung zu vermeiden. Mithilfe der Rasterelektronenmikroskopie können Aussagen über die Oberfläche gewonnen werden, während die Transmissionselektronenmikroskopie Rückschlüsse auf die kristallinen Eigenschaften einer Probe zulässt.

4.3.1 Rasterelektronenmikroskopie (SEM)

Die Rasterelektronenmikroskopie (SEM, engl. *scanning electron microscopy*) ist ein bildgebendes Verfahren, bei dem beschleunigte Elektronen über die Probenoberfläche geleitet werden. Der Elektronenstrahl wird anschließend auf der Probenoberfläche bewegt und rastert diese ab. Mit einem Detektor können rückgestreute Elektronen gemessen und aus ihnen Informationen über die Probenoberfläche gewonnen werden. Das beschriebene Messprinzip geht auf ARDENNE [152] zurück und wird schematisch in Abbildung 4.7 (a) dargestellt. Der erzeugte Elektronenstrahl wird durch elektrische Felder auf Energien von $1 \text{ kV} < U_b < 50 \text{ kV}$ beschleunigt. Bevor die Elektronen auf die Probe treffen, werden sie durch ein Linsensystem, bestehend aus Elektromagneten und Spulen, gelenkt und zu einem Strahl gebündelt. Die Qualität der Fokussierung entscheidet über das Auflösungsvermögen des SEM. Der fokussierte Elektronenstrahl kann nun mithilfe einer Ablenkspule über die Probenoberfläche gerastert werden. Es werden zwei unterschiedliche Informationen ausgewertet. Rückgestreute Elektronen sind maßgeblich für Kontrast und Helligkeit verantwortlich, weil die Intensität der rückgestreuten Elektronen von der Masse der streuenden Atome beeinflusst wird. Während die Sekundärelektronen Rückschlüsse auf die Topographie zulassen. Aufgrund der Wechselwirkung

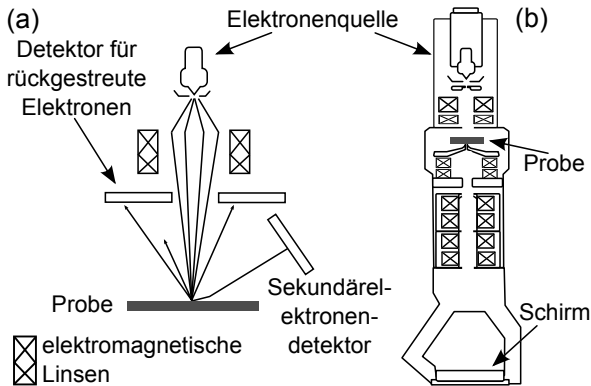


Abb. 4.7: Schematischer Aufbau zur Elektronenmikroskopie. (a) Aufbau zur Rasterelektronenmikroskopie. (b) Aufbau zur Transmissionselektronenmikroskopie.

(Stoßionisation) des Elektronenstrahls (Primärelektronen) mit den Elektronen in äußeren Schalen der oberflächennahen Atome kommt es zu einer Freisetzung dieser. Freiwerdende Elektronen werden als Sekundärelektronen bezeichnet, die durch einen Detektor registriert werden. Über die gemessene Intensität in Kombination mit der Positionsinformation des Elektronenstrahls auf der Probe lässt sich ein Abbild der Oberflächentopographie erstellen. Die SEM-Untersuchungen der vorliegenden Dissertation sind mit einem ZEISS LEO DSM 982 GEMINI durchgeführt worden.

4.3.2 Transmissionselektronenmikroskopie (TEM)

Die Transmissionselektronenmikroskopie (TEM, engl. *transmission electron microscopy*) ermöglicht die strukturelle Analyse von Proben unter Verwendung beschleunigter Elektronen. Während an dieser Stelle das grundlegende Funktionsprinzip erklärt wird, können umfassende Grundlagen bei WILLIAMS [145] entnommen werden. Beschleunigte Elektronen durchstrahlen die Probe und erzeugen ein Abbild auf einem Fluoreszenzschirm gemäß dem in 4.7 (b) gezeigten schematischen Aufbau. Der erzeugte Elektronenstrahl wird durch elektrische Felder auf Energien von $50 \text{ kV} < U_b < 300 \text{ kV}$ [145, 153] beschleunigt. Dieser soll möglichst ohne Wechselwirkung mit Luftatomen auf die Probe geleitet werden, weshalb die TEM-Kammer evakuiert wird (typischerweise UHV-Bereich [153]). Bevor der Elektronenstrahl auf die Probe trifft, wird er in einem elektromagnetischen Linsensystem fokussiert (Kon-

densorlinsen). Aufgrund von Streuprozessen des Elektronenstrahls an den Atomkernen der Probe werden die eintreffenden Elektronen in Abhängigkeit der Kristallstruktur der Probe abgelenkt. Die transmittierten, gestreuten und gebeugten Elektronen werden durch ein weiteres Linsensystem auf den Fluoreszenzschirm geleitet. Ein Abrastern der Probe ist möglich, indem entweder die Probe selbst bewegt wird oder die Probe durch eine Ablenkung des Elektronenstrahls untersucht wird. Dieser Modus wird als Scanning-Modus (STEM, engl. *scanning transmission electron microscopy*) bezeichnet. Anhand der verschiedenen Detektoren, die transmittierte, gestreute oder gebeugte Elektronen registrieren, lassen sich die Betriebsmodi eines TEM erklären. In Abhängigkeit des Beugungswinkels φ ergeben sich der Hellfeldmodus, der Dunkelfeldmodus, der HAADF-Modus (HAADF, engl. *high-angle annular dark-field*) und der weakbeam-Modus [145]. Der Wechsel zwischen verschiedenen Betriebsmodi ermöglicht beispielsweise die Identifizierung von Versetzungstypen.

Im Hellfeldmodus dienen lediglich die direkt transmittierten und gebeugten Elektronen zur Erzeugung eines Abbilds der kristallinen Struktur der Probe. Dahingegen werden im Dunkelfeldmodus ausschließlich in einem Winkel von $\varphi \leq 3^\circ$ gebeugte Elektronen von einem Detektor registriert. Elektronen, die einen Beugungswinkel $\varphi > 3^\circ$ aufweisen, werden im HAADF-Modus von einem separaten Ringdetektor aufgezeichnet. Durch Verkippung der Probe wird der weakbeam-Modus erreicht, bei dem schwach angeregte Elektronen detektiert werden, um insbesondere Aussagen über Kristalldefekte machen zu können. [145]

Bei TEM-Untersuchungen werden spezielle Anforderungen an die Proben gestellt, um sie mit Elektronen zu durchstrahlen. An dieser Stelle soll die Präparation der Proben für die vorliegenden TEM-Untersuchungen erläutert werden, eine Übersicht der möglichen Präparationsverfahren ist ebenfalls WILLIAMS [145] zu entnehmen. Für eine Durchstrahlung der Probe mit Elektronen ist es erforderlich, die jeweils zu untersuchende Probe auf eine Dicke von $10 \text{ nm} < d < 100 \text{ nm}$ abzdünnen. Dazu wird die Probe gebrochen und durch Schleifen auf eine Dicke von $d \approx 50 \text{ }\mu\text{m}$ abgedünnt. Mittels Ionendünnen wird anschließend ein Loch (Radius: $5 \text{ }\mu\text{m} < d < 50 \text{ }\mu\text{m}$) in der Probenmitte erzeugt. In den Randbereichen des erzeugten Lochs ist die Probe ausreichend dünn, um von Elektronen durchstrahlt zu werden.

Die TEM-Untersuchungen der vorliegenden Dissertation sind mit einem FEI TECNAI F20 bei $U_b = 200 \text{ kV}$ von Dr. Dominic Tetzlaff am Laboratorium für Nano- und Quantenengineering der Leibniz Universität Hannover durchgeführt worden.

4.4 Rastersondenmethoden (STM/AFM)

Rastersondenmethoden wie die Rastertunnelmikroskopie (STM, engl. *scanning tunneling microscopy*) und die Rasterkraftmikroskopie (AFM, engl. *atomic force microscopy*) ermöglichen eine dreidimensionale Abbildung von Oberflächen. Bei diesen Verfahren wird eine definierte Messspitze über die Probenoberfläche geführt und rastert diese in x- und y-Richtung relativ zur Probenoberfläche ab, um die Wechselwirkung der Probenoberfläche mit der Spitze aufzuzeichnen (z-Richtung). Während bei der Rastertunnelmikroskopie Informationen über die elektronische Struktur der Oberfläche erhalten werden (atomare Auflösung), können bei der Rasterkraftmikroskopie Informationen über die Topographie der Oberfläche mit einer Auflösung im Nanometerbereich gewonnen werden.

4.4.1 Rastertunnelmikroskopie (STM)

Die Rastertunnelmikroskopie geht auf BINNIG [154] zurück und ermöglicht es, die Anordnung einzelner Atome auf metallischen und halbmetallischen Oberflächen sichtbar zu machen. Eine einatomare Spitze wird in einem definierten Abstand an die Probenoberfläche gebracht, in die zusätzlich eine Spannung zwischen Spitze und Probe eingepreßt wird. Grundlage der Rastertunnelmikroskopie ist der quantenmechanische Tunneleffekt. Im Gegensatz zu einem klassischen Teilchen kann ein quantenmechanisches Teilchen nicht vollständig durch eine Potentialbarriere beschränkt werden. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit (Quadrat der Wellenfunktion) eines quantenmechanischen Teilchens nimmt außerhalb eines definierten Potentials exponentiell ab. Bei ausreichend geringem Abstand zwischen Spitze und Probe ist es Elektronen also möglich, in die Probe zu "tunneln". Der zwischen Spitze und Probe fließende Strom (*Tunnelstrom*) wird dabei über einen geeigneten Messaufbau aufgenommen. Durch Bewegung der Spitze relativ zur Probe können Abstandsänderungen infolge der Oberflächenstruktur der Probe über die Änderung des Tunnelstroms detektiert werden. Dabei werden allerdings nicht einzelne Atome sichtbar gemacht, sondern die elektronische Struktur der einzelnen Atome in der Oberfläche. [155]. Durch die Abbildung der elektronischen Struktur der Oberfläche ist es möglich, die Rekonstruktion einer Oberfläche sichtbar zu machen. NEDDERMEYER [156] fasst Forschungsergebnisse für Si- und Ge-Oberflächen sowie für GaAs-Oberflächen zusammen (für (001)- und (111)-orientierte Oberflächen).

Die Rastertunnelmikroskopie wird im Rahmen der vorliegenden Dissertation dazu verwendet, die topographische Struktur sowie die Rekonstruktion der vizinalen Ge-Oberflächen zu überprüfen. Dabei wird zum einen

die atomare Doppelstufung der Oberfläche sichtbar und zum anderen die Oberflächenrekonstruktion, die ausschließlich aus orthogonal zur Stufenkante orientierten Dimerreihen [108] besteht (siehe Kapitel 3.2.1). Durch die Überprüfung der Proben mithilfe der Rastertunnelmikroskopie können während des Wachstums mit RHEED gewonnene Erkenntnisse über die Präparation der Oberfläche verifiziert werden. Die STM-Untersuchungen der vorliegenden Dissertation sind am Institut für Festkörperphysik der Leibniz Universität Hannover von Christian Brand und Monika Jäger bei konstantem Strom durchgeführt worden.

4.4.2 Rasterkraftmikroskopie (AFM)

Die Entwicklung der Rasterkraftmikroskopie ist eng mit der des Rastertunnelmikroskops verknüpft [157] und stellt eine Weiterentwicklung des Messprinzips dar. Eine detaillierte Beschreibung der theoretischen Grundlagen und die Anwendung des Verfahrens für halbleitende Materialien können bei WIESENDANGER [158], EATON [159] und BOWEN [160] nachgelesen werden. Im Vergleich zum STM kann das AFM auch atomare Oberflächen nichtleitender Proben abbilden, da das Messprinzip bei der Rasterkraftmikroskopie auf den zwischen Spitze und Probenoberfläche herrschenden, interatomaren Wechselwirkungen beruht (siehe Abbildung 4.8(a)). Die Messspitze besteht aus einer Blattfeder (engl. *cantilever*) und einer Spitze (typischerweise aus Siliziumnitrid (Si_3N_4) oder Si hergestellt), die die Messauflösung bestimmt: je geringer der Spitzendurchmesser (einige nm), desto besser die Auflösung der Abbildung der Probenoberfläche. Typischerweise werden in der Literatur eine laterale Auflösung von einigen Nanometern [157, 159] und eine vertikale Auslösung von 1 \AA angegeben [157].

Die Spitze wird relativ zur Probenoberfläche über piezoelektrische Elemente bewegt, während Auslenkungen der Blattfeder als Folge von elektrostatischer und Van-der-Waals-Wechselwirkung registriert werden. Ferner können magnetische und kapillare Kräfte einen Einfluss auf die Auslenkung der Blattfeder haben. Die Auslenkungen in Richtung der Probenormalen (z-Richtung) werden als Funktion der lateralen Auslenkung aufgezeichnet und anschließend durch eine entsprechende Software in ein Bild umgewandelt. Ursprünglich ist die Auslenkung der Blattfeder mithilfe eines STM, das direkt über der Blattfeder befestigt ist, gemessen worden [157]. In der Praxis werden die Auslenkungen heute mithilfe eines Laserstrahls gemessen, welcher direkt oder über einen Spiegel auf die Blattfeder gelenkt wird, um dann von diesem auf eine lichtempfindliche Photodiode reflektiert zu werden (Abbildung 4.8 (a)). [159, 160]

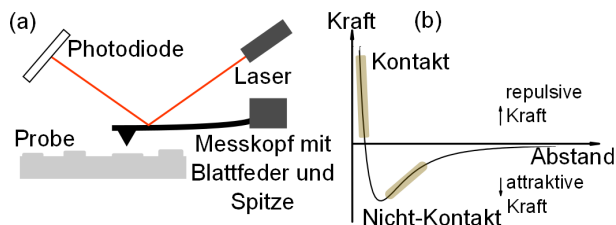


Abb. 4.8: Rasterkraftmikroskopie. (a) Schematischer Messaufbau. (b) Lennard-Jones-Potential, das die Wechselwirkung zwischen Probenoberfläche und Messspitze in Abhängigkeit des Abstands beschreibt.

Zwei Betriebsmodi des AFM werden vorgestellt: Der Kontakt-Modus (C-AFM) und der Nichtkontakt-Modus (NC-AFM) können durch den Abstand der Spitze zu der Probenoberfläche unterschieden werden. Diese beiden Modi können aufgrund der herrschenden Wechselwirkung von Spitze und Probenoberfläche unterschieden und durch das Lennard-Jones-Potential beschrieben werden. Abbildung 4.8 (b) veranschaulicht den Zusammenhang zwischen den Betriebsmodi und Lennard-Jones-Potential. Bei kleinen Abständen sorgen im C-AFM Modus ionische Wechselwirkungen für die repulsiven Kräfte (Kontakt-Modus), wohingegen im NC-AFM (Nichtkontakt-Modus) vor allem elektrostatische (permanente Dipol-Dipol-Wechselwirkungen) und Van-der-Waals-Wechselwirkungen für attraktive Kräfte verantwortlich sind [134]. Für die AFM-Aufnahmen der vorliegenden Dissertation ist ein AUTOPROBE 5 von PARK SCIENTIFIC INSTRUMENTS im C-AFM-Modus verwendet worden.

4.5 Spektroskopische Verfahren

Durch spektroskopische Verfahren können detaillierte Einblicke in die elektronische Struktur von Halbleitern gewonnen werden. In diesem Kapitel werden zwei spektroskopische Verfahren vorgestellt, die nach Anregung der Probe mit Licht ein charakteristisches Spektrum emittieren. Zum einen wird die Röntgenphotoelektronenspektroskopie (XPS, engl. *X-ray photoelectron spectroscopy*) vorgestellt, mit der Oberflächen charakterisiert werden können. Bei XPS-Untersuchungen werden charakteristische Photoelektronen detektiert. Zum anderen wird die Photolumineszenz-Spektroskopie (PL, engl. *photoluminescence spectroscopy*) vorgestellt, bei der Elektronen durch Licht in energetisch höhere Zustände angeregt werden. Aufgrund spontaner Emission (Fluoreszenz oder Phosphoreszenz) rekombinieren diese Ladungsträger

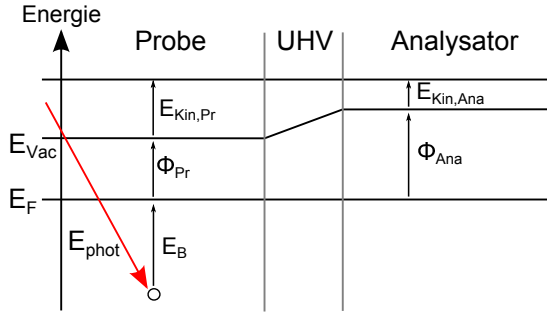


Abb. 4.9: Anregungsprozess bei der Röntgenphotoelektronenspektroskopie. Eigene Darstellung des Energieniveauschemas nach [162].

innerhalb kurzer Zeit, wodurch Photonen emittiert werden.

4.5.1 Röntgenphotoelektronenspektroskopie (XPS)

Die Röntgenphotoelektronenspektroskopie (XPS, engl. *X-ray photoelectron spectroscopy*) ist ein Verfahren zur Charakterisierung von Oberflächen nach Primäranregung mit Photonen [155, 161]. Grundlage der Röntgenphotoelektronenspektroskopie ist der 1905 von EINSTEIN beschriebene photoelektrische Effekt [5]. Die Emission von Photoelektronen lässt sich vereinfacht als Einteilchenprozess veranschaulichen: einfallende Photonen geben ihre Energie E_{phot} an Rumpfelektronen des zu untersuchenden Materials ab, die dadurch aus der Probenoberfläche ausgelöst und als Photoelektronen bezeichnet werden. Die ausgelösten Photoelektronen können aufgrund ihrer kinetischen Energie E_{kin} mit einem energiewahlweisen Analysator nachgewiesen werden. Sowohl die Energie E_{kin} als auch die Anzahl der ausgelösten Photoelektronen lässt Rückschlüsse auf die Zusammensetzung der Oberfläche und die elektronische Struktur der Probe zu. Die kinetische Energie E_{kin} der herausgelösten Photoelektronen ist dabei charakteristisch für die untersuchten Atome in der Probenoberfläche, wodurch die Röntgenphotoelektronenspektroskopie auch Aussagen über den Bindungszustand der untersuchten Atome zulässt. Der beschriebene Prozess, schematisch anhand einer energetischen Betrachtung in Abbildung 4.9 dargestellt, lässt sich durch Gleichung 4.13 ausdrücken:

$$E_{kin} = h\nu - E_B \quad (4.13)$$

bei der sich die kinetische Energie E_{kin} der Photoelektronen nach dem Auslösen durch eingestrahelte Photonen der Energie E_{phot} beschreiben lässt. Diese ist aus dem Planckschen Wirkungsquantum h und der Frequenz ν zusammengesetzt, E_B beschreibt die Bindungsenergie, mit der ein Elektron im Festkörper gebunden ist. Es wird angenommen, dass während des Emissionsprozesses die elektronische Struktur des Festkörpers unverändert bleibt (Koopmannsches Theorem) [129]. Außerdem ist es gebräuchlich, die Bindungsenergie E_B bei einem Festkörper nicht auf das Vakuumniveau, sondern auf das Fermi-niveau E_F zu beziehen (es gilt $E_B = E - E_F$). Unter Berücksichtigung der Austrittsarbeit Φ_{Pr} des zu untersuchenden Materials gilt:

$$E_{kin} = h\nu - E_B - \Phi_{Pr}. \quad (4.14)$$

Bei dem verwendeten Aufbau zur Röntgenphotoelektronenspektroskopie wird die Probe leitend mit dem Analysator verbunden, dadurch gleichen sich die Fermi-niveaus von Probe ($E_{F,Pr}$) und Analysator ($E_{F,Ana}$) an (es gilt $E_F = E_{F,Pr} - E_{F,Ana}$). Während einer Messung gilt folglich für die kinetische Energie im Analysator:

$$E_{kin,Ana} = h\nu - E_B - \Phi_{Ana} \quad (4.15)$$

mit der Austrittsarbeit Φ_{Ana} des Analysators. Durch die Messung der kinetischen Energie im Analysator $E_{kin,Ana}$ mit bekannter Anregungsenergie kann also die Bindungsenergie E_B bestimmt werden. Die Informationstiefe bei der Röntgenphotoelektronenspektroskopie wird durch die mittlere freie Weglänge λ_{imfp} (eng. *inelastic mean free path*) bestimmt. Diese Weglänge ist die Strecke, die Elektronen innerhalb eines Festkörpers zurücklegen, bevor sie kinetische Energie infolge inelastischer Streuung verlieren. Abbildung 4.10 zeigt die mittlere freie Weglänge von Elektronen in einem Festkörper nach der universellen Theorie von SEAH UND DENCH [163]. Zusätzlich sind theoretische Werte für Si und Ge nach TANUMA [164] gezeigt. Die theoretische Kurve zeigt, dass für kinetische Energien $40 \text{ eV} \leq E_{kin} \leq 70 \text{ eV}$ ein breites Minimum vorliegt, bei dem die mittlere freie Weglänge lediglich $\lambda_{imfp} \approx 5 \text{ \AA}$ beträgt und die Information also aus den obersten Monolagen des untersuchten Materials kommt. Für Si und Ge finden sich theoretische Werte lediglich für kinetische Energien $E_{kin} \geq 50 \text{ eV}$, zeigen aber ebenfalls die Übereinstimmung mit der universellen Theorie von SEAH UND DENCH [163]. Da bei der Röntgenphotoelektronenspektroskopie Anregungsenergien (typischerweise $\text{AlK}\alpha$ - oder $\text{MgK}\alpha$ -Linie [129]) bis zu $E_{phot} \approx 1 \text{ keV}$ benutzt werden, kann die Probenoberfläche bis in eine Tiefe von mehreren Nanometern untersucht werden. Neben den charakteristischen Intensitäten von Photo-

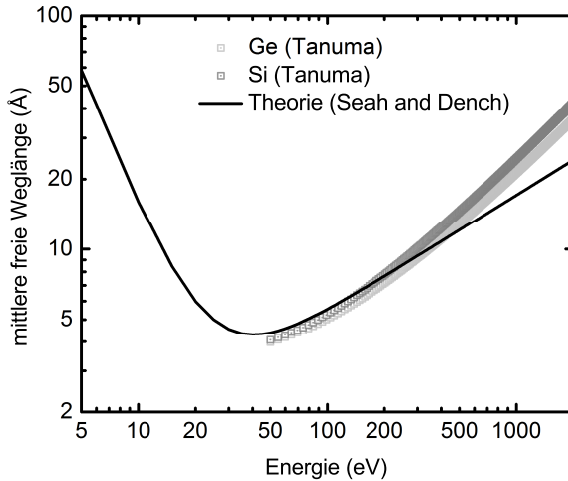


Abb. 4.10: Mittlere freie Weglänge (IMFP) von Elektronen in einem Festkörper. Theorie nach SEAH UND DENCH [163], theoretische Werte für Si und Ge nach TANUMA. [164].

Elektronen einzelner Atome der untersuchten Probe treten in Messungen der Röntgenphotoelektronenspektroskopie noch weitere charakteristische Signale auf, die durch Augerelektronen hervorgerufen werden. Im Gegensatz zu den Intensitäten verursacht von Photoelektronen sind die der Augerelektronen nicht von der Anregungsenergie abhängig. Bei der Photoemission erzeugte Löcher (mit der Energie E_i) im Bereich der Rumpfelektronen werden durch Elektronen aus energetisch höheren Niveaus (mit der Energie E_k) besetzt. Die dabei frei werdende Relaxationsenergie ($E_i - E_k$) kann auf ein weiteres Elektron übertragen werden, welches das Atom als Augerelektron verlässt. Die kinetische Energie E_{kin} des emittierten Augerelektrons ist folglich von den Energieniveaus des beteiligten Atoms abhängig und kann am Analysator gemessen werden [133]:

$$E_{kin} = E_i - E_k - E_B - \Phi_{Pr}. \quad (4.16)$$

Die XPS-Untersuchungen der vorliegenden Dissertation sind mit einem SPECS PHOIBOS 100 Halbkugelanalysator (5x Channeltron) durchgeführt worden.

4.5.2 Photolumineszenz-Spektroskopie

Die Photolumineszenz-Spektroskopie (PL, engl. *photoluminescence spectroscopy*) ist ein Verfahren zur Charakterisierung von Materialien hinsichtlich ihrer elektronischen Struktur [165]. Elektronen werden durch eingestrahktes und absorbiertes Licht in energetisch höhere Zustände angeregt. Rekombinieren diese Ladungsträger unter Aussendung von Photonen (strahlende Rekombination), wird eine charakteristische Energie frei, die von einem Detektor intensitätsabhängig aufgezeichnet wird.

In Halbleitern können Elektronen durch eingestrahktes und absorbiertes Licht mit $h\nu > E_g$ von dem Valenzband E_V in das energetisch höher liegende Leitungsband E_L angeregt werden. Durch Thermalisierung (nichtstrahlend, Phononen) fallen die angeregten Ladungsträger zunächst bis auf das energetische Niveau der Leitungsbandkante E_L (für Elektronen) bzw. das der Valenzbandkante E_V (für Löcher). Von den Energiebandkanten können diese freien Ladungsträger dann auf verschiedene Arten rekombinieren. Entweder sie rekombinieren direkt als Elektronen-Loch-Paare (Exzitonen) oder sie fallen zunächst in tiefer liegende Zustände, von denen aus sie rekombinieren. So kann bei Halbleitern unter anderem die Rekombination freier Exzitonen, an Störstellen gebundener Exzitonen und von Donator-Akzeptor-Paaren nachgewiesen werden. Störstellen können dabei beispielsweise durch Fremdatome infolge von Diffusion oder von Versetzungen erzeugt werden. Dadurch kann nicht nur die elektronische Struktur einer Probe untersucht werden, sondern es können auch Aussagen über die kristalline Qualität und Verspannungszustände gemacht werden. Daher eignet sich die PL zur Charakterisierung von heteroepitaktischen Schichten und wird zur Beurteilung der GaAs-Schichten auf virtuellen Ge-Substraten eingesetzt.

Die Photolumineszenz-Untersuchung der vorliegenden Dissertation sind am Institut für Festkörperphysik der Leibniz Universität Hannover von Pavel Sterin und Magnus Neumann durchgeführt worden. Die Untersuchung ist mit einem gepulsten Ti: Saphir Laser bei $\lambda = 780 \text{ nm}$ durchgeführt worden. Die Spektren sind mit einem 2D-CCD-Detektor mit Monochromator aufgenommen worden.

5 Herstellung virtueller Substrate für die III-V-Epitaxie

In diesem Kapitel wird auf die Optimierung der Surfactant-modifizierten Epitaxie von Ge genauso eingegangen wie auf die Untersuchung zur Eignung der Kohlenstoff-unterstützten Epitaxie zur Herstellung virtueller Ge-Substrate. Für beide Verfahren, die am Institut für Materialien und Bauelemente der Elektronik durchgeführt werden, werden die verwendeten Anlagen beschrieben, die Probenherstellung erklärt und die experimentellen Ergebnisse diskutiert.

5.1 Probenpräparation

Im Folgenden wird eine Übersicht über die verwendeten MBE-Systeme zur Herstellung virtueller Ge-Substrate gegeben. Virtuelle Ge-Substrate werden in der VG 80 S durch Surfactant-modifizierte Epitaxie und in der DCA S 1000 durch Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie hergestellt. Gleichmaßen wird auf die Kalibration der Temperatur und der Wachstumsraten an den beiden verwendeten MBE-Systemen eingegangen. Die verwendeten Substrate (*ohne* und *mit Fehlschnitt*) werden beschrieben und der nasschemische Reinigungsprozess für die Substrate erklärt. Abschließend wird die in situ Oberflächenpräparation direkt vor dem jeweiligen Wachstum anhand von RHEED-Aufnahmen erklärt.

5.1.1 MBE-Systeme

Da für diese Dissertation virtuelle Ge-Substrate mit zwei unterschiedlichen Wachstumsmethoden (Surfactant-modifizierte Epitaxie und Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie) hergestellt werden, werden beide zur Schichtherstellung benutzten Anlagen kurz beschrieben. Zur Herstellung virtueller Substrate basierend auf der Surfactant-modifizierten Epitaxie wird eine VG 80 S Molekularstrahlepitaxieanlage benutzt, während für die Herstellung der virtuellen Substrate basierend auf der Kohlenstoff-unterstützten Epitaxie eine DCA S 1000 Molekularstrahlepitaxieanlage verwendet wird. Beide Anlagen stehen im Institut für Materialien und Bauelemente der Elektronik der Leibniz Universität Hannover und sind Si/Ge-basierte MBE-Systeme. Die GaAs-Epitaxie auf den hergestellten virtuellen Ge-Substraten wird in einer Riber C21T III-V Molekularstrahlepitaxieanlage im Laboratorium für Nano- und Quantenengineering der Leibniz Universität Hannover durchgeführt (siehe Kapitel 6.1.1). Es ist zu beachten, dass Si und Ge als Dotierstoffe bei der Epitaxie von

GaAs verwendet werden, weshalb in der Regel verschiedene MBE-Systeme für Gruppe IV- (Si/Ge) und III-V-Epitaxie (GaAs) benutzt werden. Außerdem können sowohl Sb, welches während der Surfactant-modifizierten Epitaxie verwendet wird, als auch Kohlenstoff, eingesetzt bei der Kohlenstoff-unterstützten Epitaxie, zu Verunreinigungen in einem III-V-MBE-System führen.

VG 80 S Die VG 80 S (VG) wird für die Herstellung virtueller Substrate mithilfe der Surfactant-modifizierten Epitaxie verwendet. Dieses UHV-MBE-System (siehe Abbildung 5.1) besitzt eine Wachstumskammer, eine Präparationskammer sowie eine Schleusenkammer und kann Proben bis zu einer Größe von 150 mm prozessieren. Die Wachstumskammer wird durch eine Kombination aus Kryopumpe, Ionengetterpumpe und Titansublimationspumpe auf einen Basisdruck von $p \approx 1 \cdot 10^{10}$ mbar gebracht, welcher durch das Einkühlen des Kryoschilds mit flüssigem Stickstoff noch auf einen Druck $p < 1 \cdot 10^{10}$ mbar reduziert werden kann. In der Wachstumskammer werden die Proben mittels Strahlungsheizung auf bis zu $T_{Sub} = 900$ °C geheizt, während die Temperatur über ein PtRh/Pt-Thermoelement bestimmt und geregelt werden kann. Zusätzlich steht für Substrattemperaturen $T_{Sub} > 500$ °C ein Pyrometer (Infrarot) zur Verfügung. Sowohl Si als auch Ge werden in der Wachstumskammer in Elektronenstrahlverdampfern der Firma TEMESCAL verdampft. Die Wachstumsraten von Si und Ge können über Elektronenstoß-Emissionsspektroskopie (EIES, SENTINEL III bzw. GUARDIAN) der Firma LEYBOLD INFICON bestimmt und gesteuert werden. Sb steht in einer Knudsenzelle der Firma VG SEMICON für die Wachstumsprozesse bereit, während Bor in einer Hochtemperaturzelle von DR. KARL EBERL MBE KOMPONENTEN zur Verfügung steht. Wachstumsprozesse können durch das integrierte RHEED-System (STAIB INSTRUMENTE) in situ überprüft werden.

Die Präparationskammer verfügt über eine Analyseeinheit (Beugung niederenergetischer Elektronen (LEED) und Augerelektronenspektroskopie (AES)), die jedoch aufgrund technischer Probleme derzeit nicht zur Verfügung steht.

DCA S 1000 Die DCA S 1000 (DCA INSTRUMENTS) wird für die Herstellung virtueller Substrate mithilfe der Kohlenstoff-unterstützten Epitaxie verwendet. Dieses UHV-MBE-System (siehe Abbildung 5.2) besteht aus insgesamt 5 Kammern, die durch einen automatisierten Zentralhandler verbunden sind. Es können Proben bis zu einer Größe von 200 mm in diesem MBE-System prozessiert werden.

Die Wachstumskammer wird durch eine Turbomolekularpumpe und eine Ionengetterpumpe auf einen Basisdruck von $p \approx 5 \cdot 10^{10}$ mbar gebracht. Durch

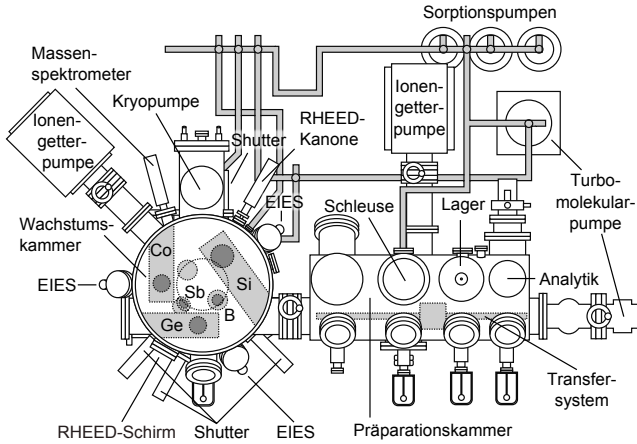


Abb. 5.1: VG 80 S Molekularstrahlepitaxie-System. Aufbau und Beschriftung der einzelnen Kammern. [99]

das Einkühlen des Kryoschildes mit flüssigem Stickstoff kann dieser auf einen Druck $p < 5 \cdot 10^{10}$ mbar reduziert werden. Durch eine Strahlungsheizung kann eine Substrattemperatur von bis zu $T_{Sub} = 900$ °C erreicht werden, die über ein Thermoelement gemessen und geregelt werden kann. Si und Ge liegen in Elektronenstrahlverdampfern der Firma TEMESCAL vor, genauso wie Gd_2O_3 und Nd_2O_3 , die allerdings im Rahmen der vorliegenden Dissertation nicht verwendet werden. Bor kann über Hochtemperaturzelle (DCA Instruments) angeboten werden, während Kohlenstoff durch eine Sublimationsquelle (SUKO-65, DR. KARL EBERL MBE KOMPONENTEN) zur Verfügung steht. Eine in situ Prozesskontrolle kann mithilfe des installierten RHEED-Systems (RHEED 35) der Firma STAIB INSTRUMENTE vorgenommen werden. *In vacuo* besteht die Möglichkeit zur Charakterisierung gewachsener Proben mittels Röntgenphotoelektronenspektroskopie (vgl. Kapitel 4.5.1) sowie Ultraviolettphotoelektronenspektroskopie in der Analyse-kammer. Ferner können in der Präparationskammer unter Gasfluss Temperaturversuche durchgeführt werden und in der Metallisierungskammer gewachsene Proben metallisiert werden. Da sowohl die Präparationskammer als auch die Metallisierungskammer in dieser Dissertation nicht verwendet worden sind, wird an dieser Stelle auf eine detaillierte Beschreibung verzichtet.

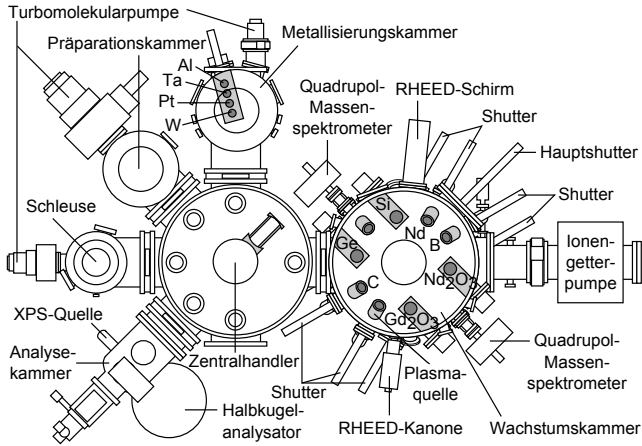


Abb. 5.2: DCA S 1000 Molekularstrahlepitaxie-System. Aufbau und Beschriftung der einzelnen Kammern. [99]

5.1.2 Kalibration

VG 80 S In der VG 80 S werden virtuelle Ge-Substrate durch die Surfactant-modifizierte Epitaxie hergestellt. Die dazu benutzten Si- und Ge-Elektronenstrahlverdampfer werden mit einem Ratensteuersystem (der Emissionsstrom I_E ist die Regelgröße) betrieben, um eine definierte Schichtdicke zu gewährleisten. Um die Ge-Wachstumsrate zu kalibrieren, sind Ge-Schichten mit Sb als Surfactant bei $T_{Sub} = 670^\circ\text{C}$ gewachsen worden [91]. Die Zielschichtdicke von $d = 150\text{ nm}$ ist anschließend mit spektroskopischer Ellipsometrie überprüft, die Abweichung der Ist- zur Soll-Schichtdicke bestimmt und der Kalibrationsfaktor der Regeleinheit angepasst worden. Für die Kalibration der Si-Wachstumsrate ist bei $T_{Sub} < 60^\circ\text{C}$ Si auf ein mit Si_3N_4 beschichtetes Si-Substrat (3") abgeschieden worden. Die Abweichung von der Zielschichtdicke ($d = 20\text{ nm}$) ist mit Röntgenreflektometrie (siehe Kapitel 4.2.4) bestimmt worden. Der Kalibrationsfaktor ist ebenso wie für Ge in der Regeleinheit anschließend angepasst worden. Sofern das Wachstum stattfindet, während das Substrat rotiert, kann eine Uniformität der Schichtdicke angenommen werden, da die Abweichung der Schichtdicke weniger als 0,2% für ein 100 mm Substrat beträgt¹² [91]. Während der Erstellung dieser Arbeit musste das zunächst verwendete SENTINEL III-System (LEYBOLD

¹²Schichtdicke bestimmt durch spektroskopische Ellipsometrie, 25-Punkt-Messung einer 137 nm dicken Ge-Schicht, gewachsen mit Sb als Surfactant [91].

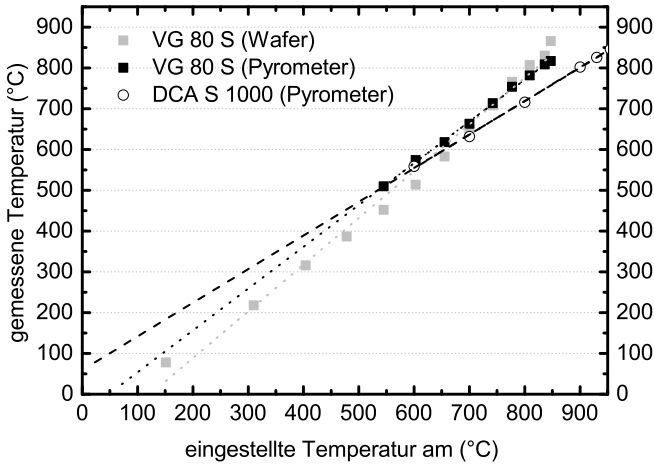


Abb. 5.3: Temperaturkalibration der verwendeten MBE-Systeme zur Herstellung virtueller Ge-Substrate. Für beide Systeme liegt eine Pyrometer-basierte Kalibration vor, die jeweils für Temperaturen $T_{Substrat} < 500^\circ\text{C}$ extrapoliert worden ist. Für die VG 80 S liegt zusätzlich eine Kalibration mit einem Thermoelement auf der Substratoberfläche vor (dargestellt in Hellgrau). Die Annäherung mit linearen Funktionen ist in der jeweiligen Farbe gepunktet (VG 80 S) bzw. gestrichelt (DCA S 1000) dargestellt.

INFICON) zur Wachstumsratensteuerung nach einem Defekt ersetzt werden. Das anschließend installierte GUARDIAN-System (LEYBOLD INFICON) basiert auf demselben Funktionsprinzip. Allerdings konnte das defekte SENTINEL III-System nicht umgehend ersetzt werden, sodass einige Proben manuell bei konstantem Emissionsstrom gewachsen werden mussten.

Die Kalibration der Sb-Rate erfolgt über eine Änderung der Oberflächenrekonstruktion. Durch das Abscheiden von Sb auf einer Si(111)- 7×7 rekonstruierten Oberfläche ändert sich die Oberflächenrekonstruktion ab einer Bedeckung von etwa 1 Monolage zu einer Si(111)- $\sqrt{3}x\sqrt{3}R30^\circ$ [166, 167]. Dabei entspricht $1\text{ ML Sb}_{\text{Si}(111)} = 7.85 \cdot 10^{14} \frac{\text{Atomen}}{\text{cm}^2}$, definiert als Anzahl der Atome in der Si(111)-Oberfläche [167]. Dabei ist die Menge an verdampftem Sb abhängig von der Temperatur der Effusionszelle und für die Surfactant-modifizierte Epitaxie so einzustellen, dass eine ausreichende Menge Sb an der

Oberfläche des Substrats ankommt. Vor dem Beginn des Ge-Wachstums soll 1 Monolage Sb auf der Substrat-Oberfläche sein, um eine möglichst glatte Schicht zu wachsen [91]. Bei Wachstumstemperaturen um $T_{Subs} = 670^\circ\text{C}$ reicht es aus, wenn sich die beschriebene Rekonstruktionsänderung auf Si(111) innerhalb von 30 s vollzieht, was einer Sb-Rate von $R_{Sb} \approx 2 \text{ MLmin}^{-1}$ für Si(111) und einem Sb-Fluss von $2,6 \cdot 10^{13} \frac{\text{Atomen}}{\text{cm}^2\text{s}}$ entspricht. Bei diesen Wachstumstemperaturen wird überschüssiges Sb desorbiert, da die Energie bei $T_{Substrat} = 670^\circ\text{C}$ ausreicht, um Sb-Sb-Bindungen, aber nicht Si-Sb- bzw. Ge-Sb-Bindungen aufzubrechen [168]. Die Bestimmung der Sb-Rate ist nach jedem Befüllen der Effusionszelle zu wiederholen, da die Sb-Rate nicht nur von der Zelltemperatur, sondern auch von der Füllhöhe des Materials im Tiegel abhängig ist.

Unmittelbar vor Beginn dieser Dissertation ist eine Temperaturkalibration an der VG 80 S durchgeführt worden, die in Abbildung 5.3 dargestellt ist. Dazu ist die am Substratmanipulator gemessene Temperatur (T_{Mani}) (PtRh/Pt-Thermoelement) mit einem Pyrometer (gerichtet auf die Substratoberfläche) und einem auf dem Substrat aufgeklebten NiCr/Ni-Thermoelement gemessen worden. Für die Herstellung von virtuellen Ge-Substraten mit der Surfactant-modifizierten Epitaxie kann die Temperatur mit einer Genauigkeit von $\pm 30^\circ\text{C}$ angegeben werden [99].

DCA S 1000 In der DCA S 1000 werden virtuelle Ge-Substrate durch Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie hergestellt. Die Wachstumsraten der benutzten Si- und Ge-Elektronenstrahlverdampfer werden manuell durch die Leistung der Elektronenstrahlverdampfer geregelt. Aus diesem Grund ist vor jeder Versuchsreihe eine Kalibrationsschicht bei entsprechender Leistung gewachsen und hinsichtlich der Schichtdicke charakterisiert worden. Die Kalibrationsschichten an der DCA S 1000 sind von SLAWIG im Rahmen ihrer Masterarbeit durchgeführt worden [169]. Für die Kalibration der Si-Wachstumsrate ist bei $T_{Sub} < 60^\circ\text{C}$ Si auf ein mit HfO_2 beschichtetes Si-Substrat (3") abgeschieden worden. Die Abweichung von der Zielschichtdicke ($d = 20 \text{ nm}$) ist mit Röntgenreflektometrie (siehe Kapitel 4.2.4) bestimmt worden. Die Wachstumsrate von Si ist auf $R_{Si} \approx 1 \frac{\text{nm}}{\text{min}}$ eingestellt worden. Um die Ge-Rate zu kalibrieren, ist Ge amorph auf Si-Substraten abgeschieden worden (bei $T_{Sub} < 60^\circ\text{C}$) und die Schichtdicke durch Röntgenreflektometrie (siehe Kapitel 4.2.4) bestimmt worden. Für die virtuellen Ge-Substrate durch Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie ist eine Wachstumsrate von $R_{Ge} \approx 1 \frac{\text{nm}}{\text{min}}$ verwendet worden.

Für die Kalibration der Kohlenstoffrate R_C kann der Wechsel einer Si(111)-7x7-rekonstruierten Oberfläche infolge von Kohlenstoff zu einer Si(111)-

$\sqrt{3}x\sqrt{3}R30^\circ$ -rekonstruierten Oberfläche genutzt werden. Für den Wechsel der Rekonstruktion wird eine Menge von $\frac{1}{3} ML$ - $1 ML$ Kohlenstoff benötigt [170, 171]. Durch RHEED kann dieser Rekonstruktionswechsel beobachtet werden, so können in $[112]$ -Richtung zusätzliche Reflexe beobachtet werden. Allerdings konnte die Bestimmung der Kohlenstoffrate R_C mit RHEED nicht zuverlässig durchgeführt werden, sodass in der Masterarbeit von D. SLAWIG zusätzlich versucht worden ist, die Kohlenstoffrate R_C durch andere Verfahren zu bestimmen. So sind weiterhin XPS-Untersuchungen zur Bedeckung und das Wachstum amorpher Kohlenstoffschichten, die mit XRR untersucht worden sind, durchgeführt worden. Jedoch gelang keine eindeutige Bestimmung der Kohlenstoffrate R_C , deshalb wird die Zeit der Kohlenstoffabscheidung bei festem Emissionsstrom $I_E = 101,5 A$ als Prozessparameter angegeben. Durch den Vergleich mit Ergebnissen von TETZLAFF [99, 130] kann für die Versuche der vorliegenden Dissertation eine Kohlenstoffmenge von $\frac{1}{3} ML$ - $1 ML$ angenommen werden.

An der DCA S 1000 ist im Rahmen dieser Dissertation keine Temperaturkalibration durchgeführt worden. Deshalb wird an dieser Stelle auf die vorhandene Temperaturkalibration (siehe Abbildung 5.3), die die Messung der Substrattemperatur oberhalb von $T_{Sub} = 500^\circ C$ umfasst, verwiesen. Durch Extrapolation der Werte kann somit auch für geringere Wachstumstemperaturen eine Angabe der tatsächlichen Temperatur gemacht werden, wengleich die Genauigkeit weniger als $\pm 50^\circ C$ beträgt [99].

5.1.3 Substrate

Für die Herstellung virtueller Ge-Substrate werden ausschließlich (001)-orientierte Si-Substrate mit einem Durchmesser von 100 mm benutzt. Es werden zwei verschiedene Typen von Substraten benutzt, *mit Fehlschnitt* ($\delta_{kip} \approx 6^\circ$ zur nächsten (111)-Ebene) und *ohne Fehlschnitt* ($\delta_{kip} < 0,2^\circ$). Der Fehlschnitt der verwendeten Substrate ist mit der in Kapitel 4.2.2 beschriebenen Methode [110] bestimmt worden. Beide Substrattypen sind p-Bor-dotiert; während die Substrate *mit Fehlschnitt* $\delta_{kip} \approx 6^\circ$ zur nächsten (111)-Ebene einen spezifischen Widerstand $1 \Omega cm < \rho_{Dot.} < 20 \Omega cm$ aufweisen, haben die Substrate *ohne Fehlschnitt* einen spezifischen Widerstand von $10 \Omega cm < \rho_{Dot.} < 20 \Omega cm$. In der Bezeichnung der Proben steht hinter der Herstellungsmethode (SME oder CME), ob für die jeweiligen Untersuchungen ein Substrat *mit Fehlschnitt* ($\delta_{kip} \approx 6^\circ$ zur nächsten (111)-Ebene), Probenname ergänzt um ein F, oder *ohne Fehlschnitt* benutzt worden ist. Außerdem sind für die Kalibration von Wachstumsraten zum Teil (111)-orientierte Si-Substrate verwendet worden.

Schritt	T_{Mani} (°C)	P_{Max} (%)	Dauer (min)
1	300	12	10
2	450	25	10
3	600	35	10
4	800	45	5

Tab. 5.1: Parameter der thermischen Reinigung in der VG 80 S.

5.1.4 Reinigung

Alle in dieser Dissertation verwendeten Substrate zu Herstellung virtueller Ge-Substrate sind vor dem Einschleusen in das jeweilige MBE-System nasschemisch gereinigt worden. Die Reinigung am Institut für Materialien und Bauelemente der Elektronik ist eine kombinierte HF-Ozon-Reinigung [91, 99].

Zunächst wird das Substrat mit 0,175-prozentiger Flußsäure behandelt, um das natürliche Oxid (SiO_2) zu entfernen. Durch die Behandlung mit Flußsäure führt dieser Reinigungsschritt zu einer Wasserstoff-terminierten Oberfläche, an der SiH_2 - und SiH -Verbindungen vorliegen [172]. Anschließend wird das Substrat einer UV-Ozon-Behandlung unterzogen. Diese wird durchgeführt, um Kohlenstoff-Reste ($Si-CH_x$) von der Substratoberfläche zu entfernen, die bei der Behandlung mit Flußsäure entstehen können. Im UHV kann aus $Si-CH_x$ bereits bei Temperaturen von $230\text{ °C} \leq T_{Sub} \leq 430\text{ °C}$ durch Dehydrierung SiC entstehen [173]. Zum einen können diese $Si-CH_x$ -Verbindungen durch Bestrahlung mit UV-Licht in Sauerstoffatmosphäre (O_3) aufgebrochen werden und zum anderen kann dadurch auch die Anzahl an F -Verbindungen reduziert werden [174]. Weiterhin führt die Behandlung mit UV-Ozon zur Bildung von H_2O , das die Wasserstoff-Terminierung auflöst und die Si-Oberfläche gleichzeitig oxidiert [175]. Unmittelbar vor dem Einschleusen wird das Substrat einer weiteren Behandlung mit 0,175-prozentiger Flußsäure unterzogen, um das in der UV-Ozon-Behandlung entstandene Oxid zu entfernen und das Substrat mit einer Wasserstoff-terminierten Oberfläche einzuschleusen. Da die nasschemische Reinigung in einem separaten Labor durchgeführt wird, wird das Substrat unmittelbar nach der letzten Behandlung mit Flußsäure im Wasserbad zu dem jeweiligen MBE-System gebracht und eingeschleust.

5.1.5 Oberflächenpräparation

Nach dem Einschleusen werden die Si-Substrate einer thermischen Reinigung unterzogen, die in situ direkt vor dem jeweiligen Wachstumsprozess durchgeführt wird. Da die Substrate nach der nasschemischen Reinigung mit einer Wasserstoff-terminierten Oberfläche eingeschleust werden, muss die thermische Reinigung eine Mindesttemperatur von $T_{Sub} > 600^\circ\text{C}$ erreichen. Oberhalb dieser Temperatur können $Si-H$ -Bindungen aufgebrochen werden und verbleibender Wasserstoff desorbieren [173].

Tabelle 5.1 gibt einen Überblick über den vier-stufigen Prozess zur thermischen Reinigung in der VG 80 S, der nach [91] durchgeführt wird. Die Manipulator Temperatur T_{Mani} ist dabei höher gewählt, als mit der maximalen Leistung P_{Max} erreichbar wäre. Der vierte und letzte Schritt endet bei einer realen Temperatur von (pyrometer-bestimmt) $T_{Pyro} \approx 680^\circ\text{C}$. Anschließend wird Si mit einer Rate von $0,1 \frac{\text{Å}}{\text{s}} \leq R_{Si} \leq 0,2 \frac{\text{Å}}{\text{s}}$ für 2 min bei $T_{Pyro} \approx 670^\circ\text{C}$ angeboten, um an der Oberfläche verbliebenen Sauerstoff durch Bildung von flüchtigem SiO zu desorbieren [176]. Die thermische Reinigung in der DCA verläuft abweichend. Das eingeschleuste Substrat wird für 10 min bei einer Temperatur von $T_{Mani} \approx 700^\circ\text{C}$ thermisch gereinigt, um anschließend ebenfalls Si bei geringer Rate $R_{Si} \leq 0,2 \frac{\text{Å}}{\text{s}}$ für 10 min anzubieten.

Durch RHEED-Aufnahmen kann die Konfiguration der Oberfläche anhand der Oberflächenrekonstruktion abgeleitet werden. Abbildung 5.4 zeigt die Oberflächenrekonstruktion für jeweils eine Probe *ohne* und *mit Fehlschnitt* aus orthogonal zueinander liegenden Richtungen nach der in situ Oberflächenpräparation. Die Probe *ohne Fehlschnitt* zeigt nach Abschluss der Präparation in beiden orthogonal zueinander liegenden Richtungen ($[-110]$ bzw. $[1-10]$ und $[110]$ bzw. $[-1-10]$ ¹³) eine 2×1 -rekonstruierte Si(001)-Oberfläche. Es liegt also eine einzel-atomar gestufte Oberfläche mit Dimerreihen auf den Terrassen sowohl orthogonal (S_B -Konfiguration) als auch parallel zu den Stufenkanten (S_A -Konfiguration) vor (siehe Kapitel 3.2.1). Bei der Probe *mit Fehlschnitt* liegt eine doppel-atomar gestufte Oberfläche (D_B -Konfiguration) vor, da in $[110]$ - bzw. $[-1-10]$ -Richtung eine 2×1 -rekonstruierte Si(001)-Oberfläche vorliegt, während in $[-110]$ - und $[1-10]$ -Richtung eine Aufspaltung der Hauptreflexe auftritt. Es ist erkennbar, dass zwischen den Hauptreflexen 6 schwache Nebenreflexe auftreten, was auf eine regelmäßige Stufenanordnung bestehend aus Doppelstufen mit einer durchschnittlichen

¹³In $[-110]$ - bzw. $[1-10]$ -Richtung fällt der Elektronenstrahl parallel zu den Stufenkanten ein, während in $[-1-10]$ - und $[110]$ -Richtung der Elektronenstrahl orthogonal zu den Stufenkanten einfällt.

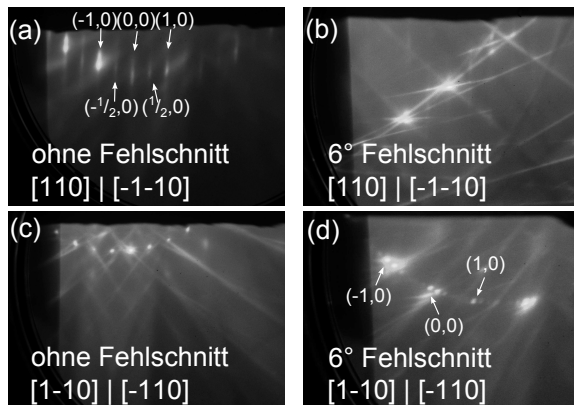


Abb. 5.4: Ergebnis der Oberflächenpräparation für Substrate *ohne* und *mit Fehlschnitt*, aufgenommen mit RHEED ($U = 26 \text{ kV}$, $I = 2, 6 \text{ A}$). Dargestellt sind jeweils die äquivalenten $[110]$ - bzw. $[-1-10]$ -Richtungen (a) und (b) und die $[-110]$ - bzw. $[1-10]$ - (c) und (d). Bei der Probe *mit Fehlschnitt* liegt eine doppel-atomar gestufte Oberfläche (D_B -Konfiguration) vor, da in $[110]$ - bzw. $[-1-10]$ -Richtung eine 2×1 -rekonstruierte $\text{Si}(001)$ -Oberfläche vorliegt (c), während in $[1-10]$ - und $[110]$ -Richtung eine Aufspaltung der Hauptreflexe auftritt (d). Zwischen den Hauptreflexen treten 6 schwache Nebenreflexe auf, die auf eine regelmäßige Stufenanordnung bestehend aus Doppelstufen mit einer durchschnittlichen Terrassenlänge von etwa 7 Atomen hindeutet [140]. Exemplarisch sind die Reflexe in Abbildung (a) und (d) indiziert.

Terrassenlänge von etwa 7 Atomen (Terrassenbreite von $d_{T, \text{Si}} \approx 26 \text{ \AA}$ für Si) deutet [140].

Die Überprüfung der Oberflächenpräparation stellt sicher, in welchem Zustand (Rekonstruktion) die Oberfläche ist und ob für die Substrate *mit Fehlschnitt* die benötigte atomare Doppelstufung der Oberfläche vorliegt. Diese Kontrolle wird bei allen zu wachsenden Proben vor dem Beginn des eigentlichen Ge-Wachstums durchgeführt.

5.2 Surfactant-modifizierte Epitaxie mit Sb

In diesem Kapitel werden die Wachstumsbedingungen zur Herstellung virtueller Ge-Substrate für die Epitaxie von III-V-Materialien optimiert. Dazu wird die Surfactant-modifizierte Epitaxie mit Sb, die in Kapitel 3.1.1 basierend auf dem derzeitigen Stand der Technik vorgestellt worden ist, verwendet. Damit die virtuellen Ge-Substrate für das anschließende Wachstum von GaAs verwendet werden können, müssen im Wesentlichen zwei Aspekte berücksichtigt werden. Zum einen darf kein Sb auf der Ge-Oberfläche verbleiben, da es zu Verunreinigungen in einem III-V-MBE-System führen kann, und zum anderen muss beachtet werden, dass für die Epitaxie von GaAs eine doppel-atomar gestufte Oberfläche benötigt wird. Im Folgenden werden die optimierten Wachstumsbedingungen vorgestellt und durch XPS-Untersuchungen gezeigt, dass kein Sb an der Oberfläche verbleibt, wenn ein zweistufiger Wachstumsprozess benutzt wird. Durch STM-Untersuchungen wird überprüft, dass nach der Herstellung der virtuellen Substrate eine doppel-atomar gestufte Ge-Oberfläche (siehe Kapitel 3.2.1) vorliegt. Abschließend werden die virtuellen Ge-Substrate hergestellt, auf die GaAs aufgewachsen worden ist (siehe Kapitel 6).

5.2.1 Probenherstellung

An allen verwendeten Substraten ist die in Kapitel 5.1.3 beschriebene Reinigung mit anschließender Oberflächenpräparation durchgeführt worden. Die Substrate haben unmittelbar vor dem Wachstum eine doppel-atomar gestufte Oberfläche im RHEED aufgewiesen, der Nachweis, dass RHEED zur Identifizierung einer doppel-atomar gestuften Oberfläche geeignet ist, wird in Kapitel 5.2.4 geführt. Diesem Kapitel liegen zwei verschiedene Wachstumsprozesse zu Grunde, die in Tabelle 5.2 zusammengefasst werden. Zum einen wird der bei WIETLER [91] vorgestellte Ansatz benutzt, der das Ge-Wachstum bei $T_{P_{yro}} \approx 670^\circ\text{C}$ unter kontinuierlichem Sb-Fluss umfasst, bis die Zielschichtdicke von $d_{SME,Ge} = 500\text{ nm}$ erreicht wird. Vor dem Wachstum wird die Oberfläche bereits bei $T_{P_{yro}} \approx 670^\circ\text{C}$ mit einer ML Sb beschichtet. Dieser Prozess wird im Folgenden als *durchgängig Sb* bezeichnet. Verglichen wird dieser Wachstumsprozess mit einem *zweistufigen* Wachstumsprozess. Bei diesem wird nach $d_{SME,Ge} = 300\text{ nm}$ das Wachstum unterbrochen und Sb für $t = 5\text{ min}$ von der Oberfläche desorbiert. Anschließend wird die Temperatur auf $T_{Mani} = 430^\circ\text{C}$ reduziert und weiteres Ge ($d_{Ge} = 200\text{ nm}$) ohne Sb aufgewachsen. Letzterer Prozess wird im Folgenden als *zweistufiges* Wachstum bezeichnet. Tabelle 5.2 fasst beide vorgestellten Wachstumsvarianten und die Prozessschritte zusammen. Die Wachstumstemperatur ist zwischen

#	Schritt	Variante 1 <i>durchgängig Sb</i>	Variante 2 <i>zweistufig</i>
1	Sb-Angebot vor dem Wachstum	1 ML	1 ML
2	SME-Ge unter Sb-Fluss ($2,6 \cdot 10^{13} \frac{\text{Atomen}}{\text{cm}^2 \text{s}}$)	500 nm	300 nm
3	Sb-Desorption bei T_{Wachstum}	-	5 min
4	Ge-Wachstum bei $T_{\text{Mani}} = 430 \text{ }^\circ\text{C}$	-	200 nm

Tab. 5.2: Schematischer Prozessablauf zur Herstellung der untersuchten Ge-Schichten. Variante 1 umfasst eine durchgängig mit Sb gewachsene Ge-Schicht, während bei Variante 2 nach einer Sb-Desorption Ge bei reduzierter Temperatur ohne Sb aufgewachsen wird.

$600 \text{ }^\circ\text{C} \leq T_{\text{Pyro}} \leq 670 \text{ }^\circ\text{C}$ variiert worden, da eine niedrigere Wachstumstemperatur zu einer erhöhten Hintergrunddotierung führen würde, während oberhalb von $700 \text{ }^\circ\text{C}$ eine verstärkte Diffusion von Si in die Ge-Schicht eintritt [91]. Außerdem sind sowohl Substrate mit einem Fehlschnitt ($\delta_{\text{kippe}} \approx 6^\circ$) also auch ohne Fehlschnitt ($\delta_{\text{kippe}} \approx 0^\circ$) untersucht worden. Alle in diesem Kapitel behandelten Proben sind im Anhang auf Seite 130 zu finden.

5.2.2 Optimierung des SME-Wachstumsprozesses für die III-V-Epitaxie

Für die Optimierung des SME-Wachstumsprozesses zur Herstellung virtueller Ge-Substrate müssen zwei Aspekte beachtet werden. Zum einen muss getestet werden, ob die Wachstumsunterbrechung mit Sb-Desorption und anschließendem Wachstum bei reduzierter Temperatur einen Einfluss auf die kristalline Qualität der Proben hat. Zum anderen muss überprüft werden welchen Einfluss der Fehlschnitt der verwendeten Substrate ($\delta_{\text{kippe}} \approx 6^\circ$) hat und ob die Präparation einer doppel-atomar gestuften Oberfläche gelingt.

Als Vergleichsmöglichkeit im gewählten Temperaturbereich (zwischen $600 \text{ }^\circ\text{C} \leq T_{\text{Pyro}} \leq 670 \text{ }^\circ\text{C}$) für den ersten Wachstumsschritt (siehe Tabelle 5.2) die-

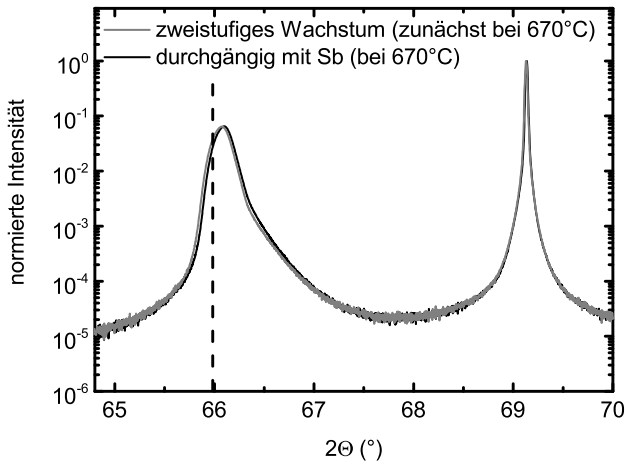


Abb. 5.5: $\Theta - 2\Theta$ -Messung zweier bei Ge-Schichten, die ohne Fehlschnitt ($d_{Schicht} = 500 \text{ nm}$) bei $T_{Pyro} \approx 670^\circ\text{C}$ gewachsen worden sind. In Schwarz dargestellt unter *durchgängigem* Sb-Fluss, in Grau als *zweistufiges* Wachstum mit Sb-Desorption. Der Volumenwert von a_{Ge} ist als gestrichelte Linie dargestellt. Die Intensität ist normiert und die Messkurven sind auf den Si(004)-Reflex normiert worden.

nen der Relaxationsgrad und die Defektdichte. Ersterer wird aus $\Theta - 2\Theta$ -Messungen nach Gleichung 4.4 berechnet. Für alle in diesem Kapitel untersuchten Proben beträgt der Relaxationsgrad unabhängig von der Wachstumstemperatur $99\% \leq R \leq 100\%$ nach Korrektur um Verspannung infolge unterschiedlicher thermischer Ausdehnungskoeffizienten (siehe Kapitel 2.2). Folglich führt der zweistufige Wachstumsprozess genauso zu voll relaxierten Ge-Schichten, wie es bisher für durchgängig mit Sb gewachsene Ge-Schichten gezeigt worden ist [89]. Dieses Verhalten war allerdings erwartbar, da die Versetzungsbildung bereits nach 18 ML eintritt [91]. Der Relaxationsgrad wird daher an dieser Stelle nicht weiter behandelt und kann für die entsprechenden Proben im Anhang auf Seite 130 nachgelesen werden. Exemplarisch gezeigt ist in Abbildung 5.5 die $\Theta - 2\Theta$ -Messung um den Si(004)-Reflex für zweier Proben ohne Fehlschnitt ($d_{\text{Schicht}} = 500 \text{ nm}$): in Schwarz dargestellt unter *durchgängigem* Sb-Fluss, in Grau als *zweistufiges* Wachstum. Der Volumenwert von a_{Ge} ist als gestrichelte Linie dargestellt, nach Korrektur um Verspannung infolge unterschiedlicher thermischer Ausdehnungskoeffizienten beträgt der Relaxationsgrad für die durchgängig unter Sb-Fluss gewachsene Probe (schwarz) $R = 100\%$, der der zweistufig gewachsenen Probe (grau) $R = 99,4\%$. Anhand dieser Untersuchung lässt sich kein Unterschied zwischen den beiden Wachstumsvarianten feststellen, eine Variation der Wachstumstemperatur im angegebenen Bereich führte ebenfalls zu dem Ergebnis, dass die zweistufig hergestellten Proben dieselben strukturellen Eigenschaften aufweisen.

Ferner zeigt auch die Überprüfung, ob der Substratfehlschnitt einen Einfluss auf die strukturellen Eigenschaften hat, dasselbe Ergebnis. Der Fehlschnitt von $\delta_{\text{kipp}} \approx 6^\circ$ hat keinen Einfluss auf die strukturellen Eigenschaften der hergestellten Ge-Schichten. Exemplarisch dafür werden zwei Proben in Abbildung 5.6 verglichen, die mit dem zweistufigen Wachstum (siehe Tabelle 5.2) bei $T_{\text{Pyro}} \approx 630^\circ\text{C}$ im ersten Schritt hergestellt worden sind. Die Probe, bei der der Fehlschnitt $\delta_{\text{kipp}} \approx 6^\circ$ beträgt, ist in Schwarz dargestellt, die Probe ohne Fehlschnitt ($\delta_{\text{kipp}} \approx 0^\circ$) in Grau. Auch hier beträgt nach Korrektur um Verspannung infolge unterschiedlicher thermischer Ausdehnungskoeffizienten der Relaxationsgrad $R = 98,5\%$ ($\delta_{\text{kipp}} \approx 6^\circ$) respektive $R = 99,7\%$ ($\delta_{\text{kipp}} \approx 0^\circ$).

Als weitere Möglichkeit zur Bewertung und Optimierung der strukturellen Eigenschaften des zweistufigen Wachstumsprozesses sind an allen hergestellten Proben Rockingkurven um den Ge(004)-Reflex aufgenommen worden. Anschließend sind die resultierenden Rockingkurven mit Gaussfunktionen angenähert worden und aus den Halbwertsbreiten Defektdichten bestimmt worden (siehe Formel 4.6 aus Kapitel 4.2.2 und Anhang auf Seite 128). Abbil-

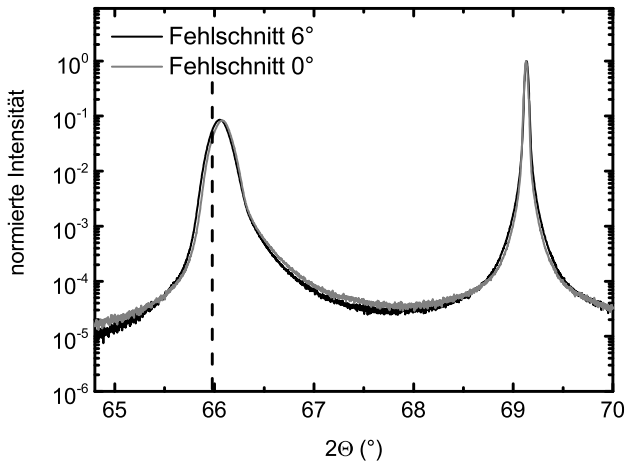


Abb. 5.6: $\Theta - 2\Theta$ -Messung zweier bei Ge-Schichten, die mit dem *zweistufigen* Wachstumsprozess ($d_{Schicht} = 500 \text{ nm}$) hergestellt worden sind. Das SME-Ge ist bei $T_{Pyro} \approx 630^\circ \text{C}$ gewachsen worden. In Schwarz auf einem Substrat mit einem Fehlschnitt von $\delta_{kippe} \approx 6^\circ$, in Grau auf einem Substrat ohne Fehlschnitt ($\delta_{kippe} \approx 0^\circ$). Der Volumenwert von a_{Ge} ist als gestrichelte Linie dargestellt. Intensität normiert und auf den Si(004)-Reflex normiert.

Abbildung 5.7 zeigt die Defektdichte, ausgehend von 60°- bzw. 90°-Versetzungen für die untersuchten Proben. Bei WIETLER [91] ist gezeigt worden, dass in Ge-Schichten, die mit SME gewachsen werden, typischerweise ein Versetzungsnetzwerk an der Grenzfläche bestehend aus 90°-Versetzungen vorliegt. 60°-Versetzungen können zwar auch identifiziert werden, weisen jedoch denselben Betrag des Burgersvektors wie 90°-Versetzungen auf. Daher hat letztendlich der vorliegende Versetzungstyp nur einen schwachen Einfluss auf die Halbwertsbreite und somit auf die Defektdichte [91]. Da der verwendeten Formel Vereinfachungen zu Grunde liegen, müssen diese für eine Fehlerabschätzung berücksichtigt werden. So trägt der vorliegende Versetzungstyp zum Fehler bei, da anstelle von 60°- bzw. 90°-Versetzungen auch Versetzungen mit Schraubencharakter auftreten können. Zusätzlich ist der Fehler ausgehend von der Ungenauigkeit der Schichtdickenbestimmung berechnet worden. Für alle Proben sind Querbrüche in einem REM hinsichtlich Schichtdicke untersucht und der Mittelwert aller Messungen bestimmt worden.

Insgesamt liegen alle in Abbildung 5.7 gezeigten Proben in einem Bereich von $479 \text{ nm} \leq d \leq 548 \text{ nm}$. Zusätzlich ist mit Ausnahme von 4 Proben die rms-Rauigkeit angegeben. In Schwarz dargestellt sind die Proben, die durchgängig mit Sb-Fluss auf Substraten ohne Fehlschnitt ($\delta_{kipp} \approx 0^\circ$) gewachsen worden sind. Während für das zweistufige Wachstum die Ge-Schichten auf Substraten ohne Fehlschnitt ($\delta_{kipp} \approx 0^\circ$) in Rot dargestellt sind, werden die auf fehlgeschnittenen Substraten ($\delta_{kipp} \approx 6^\circ$) in Blau dargestellt. Anhand der Defektdichten ist zu erkennen, dass weder zwischen den Wachstumsvarianten noch zwischen den Substraten ein Unterschied besteht. Die Defektdichten für $T_{Pyro} \approx 670^\circ\text{C}$ liegen in dem von WIETLER gezeigten Bereich [89]. Allerdings konnten Oberflächenrauigkeiten von $R_{rms} \leq 1 \text{ nm}$, wie sie für durchgängig mit Sb-Fluss gewachsene Ge-Schichten bei dieser Wachstumstemperatur bereits gezeigt worden sind [91], nicht erzielt werden. Eine Erhöhung der Wachstumstemperatur auf $T_{Pyro} \approx 700^\circ\text{C}$ führt nicht nur zu einer erhöhten Diffusion von Si in die Ge-Schicht [91], sondern auch zu einer deutlich erhöhten Oberflächenrauigkeit. Durch Reduzierung der Wachstumstemperatur auf $T_{Pyro} \approx 630^\circ\text{C}$ kann sowohl die Defektdichte als auch die Oberflächenrauigkeit reduziert werden. Unabhängig davon, ob das verwendete Substrat einen Fehlschnitt von $\delta_{kipp} \approx 6^\circ$ oder $\delta_{kipp} \approx 0^\circ$ aufweist und unabhängig davon, welche Wachstumsvariante verwendet worden ist, kann die Defektdichte durchschnittlich reduziert werden. Defektdichten im Bereich von $n_d < 8 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-3}$ sind allerdings aus Sicht einer späteren photovoltaischen Anwendung zu hoch. So sind Versetzungsdichten kleiner $n_d \leq 10^6 \text{ cm}^{-2}$ nötig, um Verluste infolge nichtstrahlender Rekombination in Solarzellen zu begrenzen [25]. Allerdings geht diese Abschätzung von einer aktiven Ge-Schicht aus,

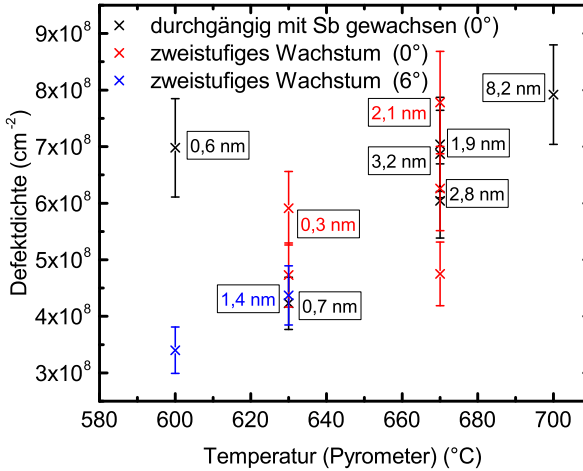


Abb. 5.7: Defektdichte (berechnet aus Halbwertsbreiten der jeweiligen Rockingkurven um den Ge(004)-Reflex) ausgehend von 60°- bzw. 90°-Versetzungen für die in diesem Kapitel untersuchten Proben. In Schwarz dargestellt sind die *durchgängig* mit Sb-Fluss auf Substraten ohne Fehlschnitt ($\delta_{kip} \approx 0^\circ$) gewachsenen Proben. Für das *zweistufige* Wachstum sind Ge-Schichten auf Substraten ohne Fehlschnitt ($\delta_{kip} \approx 0^\circ$) in Rot dargestellt, die auf fehlgeschnittenen Substraten ($\delta_{kip} \approx 6^\circ$) sind in Blau dargestellt. Zusätzlich ist mit Ausnahme von 4 Proben die rms-Rauigkeit angegeben.

während die in dieser Dissertation vorgestellten Ge-Schichten ausreichend dünn sind, um als inaktiver Tunnelübergang zwischen einer III-V- und einer Si-Solarzelle zu fungieren [8]. Dennoch bleibt zu überprüfen, inwieweit die gemessenen Defektdichten einen Einfluss auf eine spätere Tandemsolarzelle haben und inwieweit die Defektdichte der Ge-Schicht Auswirkungen auf die strukturelle Perfektion der GaAs-Schichten hat.

Weiterhin muss beachtet werden, dass eine Reduzierung der Wachstumstemperatur zu einer erhöhten Hintergrunddotierung führt. So ist gezeigt worden, dass die Reduzierung der Wachstumstemperatur auf $T_{Pyro} \approx 600^\circ\text{C}$ auf eine Verdoppelung der Hintergrunddotierung hinausläuft [177] (bei $T_{Pyro} \approx 670^\circ\text{C}$ ist von einer Dotierung von $c_{Sb} \approx 5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ auszugehen [89]).

5.2.3 Sb an der Oberfläche

Durch den zweistufigen Wachstumsprozess zur Herstellung virtueller Ge-Substrate, der in Tabelle 5.2 vorgestellt worden ist, soll kein Sb nach dem Ende des Wachstums an der Oberfläche verbleiben. Um zu überprüfen, inwieweit der zweistufige Wachstumsprozess bestehend aus Sb-Desorption bei $T_{P_{yro}} \approx 670^\circ\text{C}$ und anschließendem Ge-Wachstum bei $T_{Mani} = 430^\circ\text{C}$ zu einer Sb-freien Oberfläche führt, sind XPS-Untersuchungen durchgeführt worden. Ergänzend sind Dotierprofile der untersuchten Proben mit Sekundärionen-Massenspektrometrie (SIMS, engl. *secondary ion mass spectrometry*) von dem CIS FORSCHUNGSINSTITUT FÜR MIKROSENSORIK¹⁴ durchgeführt worden.

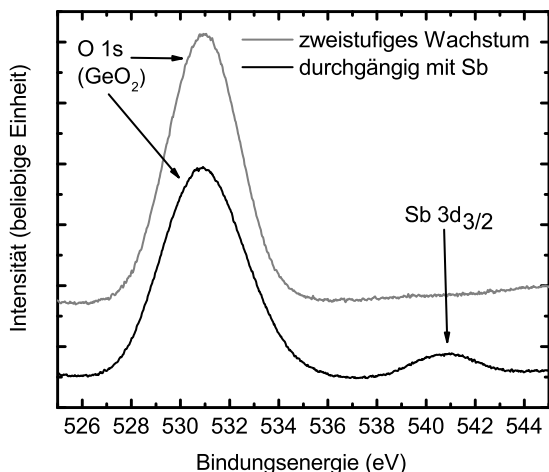


Abb. 5.8: XPS-Untersuchung des *zweistufigen* Wachstums zur Herstellung virtueller Ge-Substrate. Gezeigt ist die Region um das $O\ 1s$ -Orbital, aufgenommen mit $MgK\alpha$ -Anregung und $E_{pass} = 80\text{ eV}$. Die Messdaten sind angenähert (Voigt-Profil) und auf $C\ 1s$ normiert (nicht gezeigt) worden. In Schwarz ist eine *durchgängig* mit Sb gewachsene 500 nm dicke Ge-Schicht gezeigt. In Grau eine *zweistufig* gewachsene, bei der nach $d_{SME,Ge} = 300\text{ nm}$ Sb desorbiert worden ist und anschließend Ge ohne Sb-Fluss bei reduzierter Temperatur aufgewachsen worden ist ($d_{Ge} = 200\text{ nm}$).

¹⁴Konrad-Zuse-Straße 14, 99099 Erfurt, Deutschland

XPS Zuerst muss betrachtet werden, wie viel Sb bei dem klassischen SME-Prozess, der bei $T_{Pyro} \approx 670^\circ\text{C}$ unter kontinuierlichem Sb-Fluss ($2,6 \cdot 10^{13} \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^2\text{s}}$) durchgeführt wird, an der Oberfläche bleibt und ob diese Menge mit XPS nachweisbar ist. Für XPS wird eine Informationstiefe von etwa 5 nm angegeben [129], wodurch eine ausreichend hohe Oberflächensensitivität gewährleistet ist. Außerdem beträgt die Nachweisgrenze von XPS-Untersuchungen etwa $N = 3 \cdot 10^3\text{ ppm}$ [129], was $0,3\%$ entspricht. Wird nun eine (001)-orientierte Ge-Oberfläche¹⁵ betrachtet, so kann die Zusammensetzung der ersten 35 ML untersucht werden. Eine vollständige mit Sb abgesättigte 2×1 -rekonstruierte Ge(001)-Oberfläche wird mit $\Lambda_{Sb} \approx 0,8\text{ ML}$ Sb angegeben [91, 178]. Ausgehend von dieser Sb-Bedeckung der Oberfläche macht das verbliebene Sb etwa $2,2\%$ des untersuchten Volumens aus und liegt damit deutlich oberhalb der Nachweisgrenze von $N = 0,3\%$. Eine derartige einfache Abschätzung entspricht einer maximalen Menge an verbliebenem Sb, denn die Informationstiefe von XPS nimmt exponentiell mit der Tiefe ab.

Zur Untersuchung wird der Bereich um das $O\ 1s$ -Orbital betrachtet, da das $Sb\ 3d_{\frac{3}{2}}$ und das $Sb\ 3d_{\frac{5}{2}}$ in demselben Bereich liegen. Da es durch die Lagerung der Proben außerhalb des MBE-Systems zur Oxidation der Oberfläche kommt, müssen die Bindungsenergien für das $O\ 1s$ -Orbital und das $Sb\ 3d$ -Orbital unter Ausbildung von GeO_2 und Sb_2O_5 betrachtet werden. Dabei wird die chemische Verschiebung der Bindungsenergie berücksichtigt, da anstelle von $O-O$ -Bindungen nun $Ge-O$ - und $Sb-O$ -Bindungen vorliegen [179, 180]. Die Aufspaltung des $3d$ -Orbitals aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung führt zu einer charakteristischen Differenz der Bindungsenergien von $\Delta S_{3d} = 9,4\text{ eV}$. Dabei beträgt die Bindungsenergie von $Sb\ 3d_{\frac{3}{2}}$ bei Ausbildung von Sb_2O_5 $E_B = 540,9\text{ eV}$. Zur Untersuchung kann der $Sb\ 3d_{\frac{5}{2}}$ (für Sb_2O_5) nicht herangezogen werden, da die Bindungsenergie fast identisch mit der des $O\ 1s$ -Orbital bei Ausbildung von GeO_2 ($E_B = 532,2\text{ eV}$) [181] ist. Abbildung 5.8 zeigt das Spektrum um das $O\ 1s$ -Orbital, aufgenommen bei $MgK\alpha$ -Anregung und einer Passenergie von $E_{pass} = 80\text{ eV}$. Die charakteristischen Intensitäten sind mit Voigt-Profilen angenähert worden und anhand des $C\ 1s$ -Orbitals (nicht gezeigt) hinsichtlich der Bindungsenergie normiert worden. Die Probe, die unter kontinuierlichem Sb-Fluss hergestellt worden ist, zeigt neben dem Sauerstoffsignal ein zusätzliches bei $E_B = 540,9\text{ eV}$, welches aufgrund des charakteristischen Abstands zum $Sb\ 3d_{\frac{5}{2}}$ -Orbital (das durch $O\ 1s$ -Orbital überlagert wird) als $Sb\ 3d_{\frac{3}{2}}$ identifiziert werden kann. Die Probe, bei der nach dem SME-Wachstum ($d_{SME,Ge} = 300\text{ nm}$) Sb bei $T_{Pyro} = 670^\circ\text{C}$ desorbiert worden ist und anschließend Ge ohne Sb-Fluss aufgewachsen worden ist

¹⁵1 ML Ge auf einer (001)-orientierten Oberfläche sind $7,21 \cdot 10^{14} \frac{\text{Atomen}}{\text{cm}^2}$

($d_{Ge} = 200 \text{ nm}$, $T_{Manipulator} = 430^\circ\text{C}$), zeigt Intensitäten, die auf das $Sb3d$ -Orbital zurückzuführen sind. Die Halbwertsbreite des $O1s$ -Orbitals (GeO_2) dieser Probe ist mit $FHWM = 3,4 \text{ eV}$ auch kleiner als die der durchgängig mit Sb gewachsenen Probe ($FHWM = 3,9 \text{ eV}$), bei der zusätzlich das $Sb3d_{5/2}$ -Orbital (Sb_2O_5) zu einer Verbreiterung führt.

Mit Rücksichtnahme auf die Nachweisgrenze der Messmethode XPS, die etwa der Menge $\Lambda \approx \frac{1}{10}$ -Monolage Sb entspricht, kann festgehalten werden, dass durch die Sb-Desorption und anschließendes Ge-Wachstum bei reduzierter Temperatur eine Sb-freie Oberfläche für die Herstellung virtueller Ge-Substrate erzielt werden kann.

SIMS Bei der Tiefenprofilanalyse wird zunächst ein Intensitäts-Zeit-Profil registriert. Die Umrechnung der gemessenen Intensitäten in Konzentrationen erfolgt durch eine Sb-Standardprobe (mit ^{121}Sb und ^{123}Sb implantierte Germaniumprobe). Die Analyse von Sb erfolgt mit Cs-Primärionen und negativen Sekundärionen. Es wurden beide Isotope gemessen, wobei das natürliche Isotopenverhältnis von $^{121}\text{Sb} : ^{123}\text{Sb}$ 57,3:42,7 beträgt.

Abbildung 5.9 zeigt das Tiefenprofil von der Probenoberfläche bis in eine Tiefe von 200 nm für den Nachweis von Sb. Für die Bestimmung von Sb beträgt die Nachweisgrenze $N = 5 \cdot 10^{14} \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^3}$ (Messfleckdurchmesser $60 \mu\text{m}$). In Grau dargestellt ist die Probe, die zweistufig hergestellt worden ist, also bei der nach dem SME-Wachstum ($d_{SME,Ge} = 300 \text{ nm}$) Sb bei $T_{Pyro} = 670^\circ\text{C}$ desorbiert worden ist und anschließend Ge ohne Sb-Fluss aufgewachsen worden ist ($d_{Ge} = 200 \text{ nm}$, $T_{Mani} = 430^\circ\text{C}$), in Schwarz dargestellt ist eine durchgängig mit Sb gewachsene Probe bei $T_{Pyro} = 670^\circ\text{C}$. Die verwendeten Analysebedingungen sind auf eine bestmögliche Nachweisgrenze optimiert und zeigen, dass eine Quantifizierung von Sb an der Oberfläche der Germaniumschicht (bis $\approx 50 \text{ nm}$ Tiefe) nicht direkt aus dem dargestellten Verlauf abzuleiten ist. Während sich in der gesamten Schicht (beide Proben $d = 500 \text{ nm}$) die Sb-Konzentration bei der durchgängig mit Sb-Fluss gewachsenen Probe auf $c_{Sb} \leq 5 \cdot 10^{16} \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^3}$ beläuft, schwankt die Sb-Konzentration der zweistufig gewachsenen Probe um die Nachweisgrenze von $N \approx 5 \cdot 10^{14} \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^3}$. Die Sb-Konzentration der durchgängig mit Sb gewachsenen Ge-Schicht deckt sich mit den Angaben für denselben Wachstumsprozess von WIETLER [89]. Würde die Sb-Desorption nicht funktionieren und vor dem fortgesetzten Ge-Wachstum bei $T_{Mani} = 430^\circ\text{C}$ noch $\Lambda_{Sb} = 0,8 \text{ ML}$ an der Oberfläche sein, so hätte die 200 nm dicke Ge-Schicht eine Sb-Konzentration von bis zu $c_{Sb} = 4 \cdot 10^{19} \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^3}$. Daher ist festzuhalten, dass die Sb-Desorption, so wie sie für die Herstellung virtueller Ge-Substrate vorgestellt worden ist, zu einer deutlichen Reduzierung der Sb-Konzentration c_{Sb} an der Oberfläche führt.

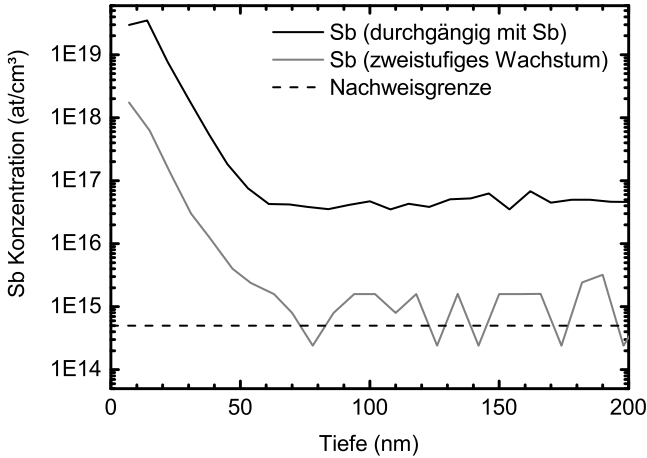


Abb. 5.9: Gezeigt ist das SIMS-Tiefenprofil (200 nm von der Oberfläche ausgehend) zweier Ge-Schichten, die mit SME hergestellt worden sind. In Grau dargestellt ist die Probe, die *zweistufig* hergestellt worden ist, also bei der nach dem SME-Wachstum ($d_{SME,Ge} = 300 \text{ nm}$) Sb bei $T_{Pyro} = 670 \text{ }^\circ\text{C}$ desorbiert worden ist und anschließend Ge ohne Sb-Fluss aufgewachsen worden ist ($d_{Ge} = 200 \text{ nm}$, $T_{Manipulator} = 430 \text{ }^\circ\text{C}$). In Schwarz ist eine *durchgängig* mit Sb gewachsene Probe bei $T_{Pyro} = 670 \text{ }^\circ\text{C}$ gezeigt. Die Analyse von Sb ist mit Cs-Primärionen und negativen Sekundärionen für den Nachweis von ^{121}Sb und ^{123}Sb durchgeführt worden. Für die Bestimmung von Sb beträgt die Nachweisgrenze $c_{Sb} = 5 \cdot 10^{14} \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^3}$ (Messfleckdurchmesser $60 \text{ } \mu\text{m}$).

Beide Proben zeigen im oberflächennahen Bereich qualitativ denselben Verlauf, dass bis in eine Tiefe von $\approx 50 \text{ nm}$ die Konzentration c_{Sb} abnimmt. Ob dieser Verlauf allerdings alleine durch eine von der Oberfläche her abnehmende Konzentration c_{Sb} oder noch durch zusätzliche Effekte, wie eine sich ändernde Sputterrate, verursacht wird, kann nicht abschließend beurteilt werden. Trotzdem kann eine Segregation von Sb an die Oberfläche bei beiden Proben festgestellt werden. Durch die Integration über die ersten 100 nm (von der Oberfläche startend) kann eine Abschätzung der im oberflächennahen Bereich verbliebenen Menge an Sb gemacht werden. Die zweistufig gewachsene Probe zeigt eine integrierte Konzentration von $c_{Sb, integr.} = 4,5 \cdot 10^{12} \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^2}$, verglichen mit $c_{Sb, integr.} = 1,2 \cdot 10^{14} \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^2}$ bei der durchgängig mit Sb gewachsenen Probe. Folglich lässt die integrierte Konzentration der zweistufig gewachsenen Probe den Schluss zu, dass sich weniger als $\Lambda \approx \frac{1}{100} ML$ Sb nach Abschluss des Wachstums an der Oberfläche befindet.

Dass noch Sb an der Oberfläche bei dem zweistufigen Wachstumsprozess vorhanden ist, kann zwei verschiedene Ursachen haben, die auch beide gleichzeitig zutreffend sein können. Zum einen kann Sb aus dem Hintergrund, das heißt beispielsweise von dem Probenhalter, nach der durchgeführten Desorption während des Abkühlvorgangs auf das Substrat gelangen. Zum anderen kann es ein Effekt der sich ändernden Löslichkeit sein. Da die Löslichkeit von Sb (in Ge) temperaturabhängig ist, kann eine Temperaturänderung um mehr als $\Delta T = 200^\circ C$ dazu führen, dass Sb, bevor bei reduzierter Temperatur weitergewachsen wird, an die Oberfläche tritt. Das würde bedeuten, dass Sb auch bei Temperaturen um $T_{Mani} \approx 430^\circ C$ an die Oberfläche segregieren kann. Beide vorgestellten Ursachen können erklären, warum sich auch im zweistufigen Wachstumsprozess eine, wenngleich sehr geringe Menge Sb, an der Oberfläche befindet.

Weiterhin zeigt die durchgängig mit Sb hergestellte Ge-Schicht durch die Integration der Konzentration c_{Sb} im oberflächennahen Bereich, dass nach Ende des Wachstums nur noch $\Lambda \approx \frac{1}{4} ML$ Sb an der Oberfläche vorhanden ist. Bei der Wachstumstemperatur von $T_{Pyro} \approx 670^\circ C$ ist eigentlich davon auszugehen, dass noch $\Lambda \approx 0,8 ML$ Sb an der Oberfläche verbleiben [91, 178]. Die geringere Menge an Sb kann beispielsweise durch weiterhin auftretende Desorption verursacht werden, denn die Temperatur wird nicht abrupt geändert. Außerdem ist zu berücksichtigen, dass die Probe an Luft gelagert worden ist, bevor die SIMS-Untersuchungen durchgeführt worden sind. An Luft bildet sich ein Oxid aus, das vorwiegend aus GeO_2 besteht, welches aber auch einen Anteil an Sb_2O_5 aufweisen kann. Inwieweit zu Beginn des Sputterns im oberflächennahen Bereich das Oxid zu einer abweichenden Konzentration von c_{Sb} führt, kann nicht beurteilt werden.

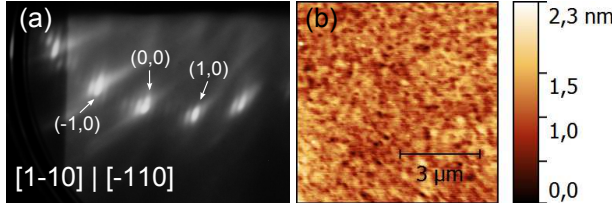


Abb. 5.10: SME-hergestellte Ge-Schicht (Probe SME670F) zur Untersuchung der Oberfläche mit STM. (a) RHEED-Aufnahme nach dem Wachstum in $[-110]$ - bzw. $[1-10]$ -Richtung. Aufspaltung der Hauptreflexe der 2×1 -Rekonstruktion in 6 schwach erkennbare Nebenreflexe. Exemplarisch sind die Reflexe indiziert. (b) AFM-Aufnahme der Probe SME670F mit einer Rauigkeit von $R_{rms} = 0,3 \text{ nm}$.

Durch den Vergleich von XPS- und SIMS-Untersuchungen kann gefolgert werden, dass durch die Sb-Desorption bei $T_{Pyro} = 670 \text{ }^\circ\text{C}$ und das anschließende Ge-Wachstum bei $T_{Mani} = 430 \text{ }^\circ\text{C}$ die Hintergrunddotierung deutlich verringert werden kann ($c_{Sb} \approx 5 \cdot 10^{14} \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^3}$). Diese ist verglichen mit der intrinsischen Ladungsträgerkonzentration von Ge ($n_i = 2 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$) einer intrinsischen Ge-Schicht nur noch um etwa eine Größenordnung erhöht. Die an der Oberfläche verbliebene Menge an Sb kann zu weniger als $\Lambda \leq \frac{1}{100} \text{ ML}$ Sb abgeschätzt werden. Dadurch wird eine ausreichend geringe Sb-Konzentration erreicht, sodass die virtuellen Ge-Substrate für die Epitaxie von GaAs verwendet werden können.

5.2.4 Ein-Domänigkeit der Ge-Oberflächen

Um auf virtuellen Ge-Substraten GaAs möglichst defektfrei aufwachsen zu können, wird eine doppel-atomar gestufte Oberfläche benötigt (siehe Kapitel 3.2.1). Durch diese kann die Ausbildung von Antiphasengrenzen [55] während des Wachstums von GaAs unterdrückt werden [61]. Bereits bei RUHKOPF ist durch die Kombination von RHEED-, LEED- (engl. *low energy electron diffraction*), XRD- und TEM-Untersuchungen gezeigt worden, dass virtuelle Ge-Substrate ein-domänige Ge-Oberflächen aufweisen. [114].

STM an durchgängig mit Sb gewachsenen SME-Ge-Schichten Für die STM-Untersuchung wird eine SME-gewachsene Ge Schicht mit einer Dicke von $d_{Ge} = 400 \text{ nm}$ herangezogen. Diese Probe (Probe SME670F) weist einen Fehlschnitt von $\delta_{kip} = 5,8^\circ$ auf und ist unter kontinuierlichem

Sb-Fluss bei $T_{P_{yro}} \approx 670^\circ\text{C}$ gewachsen worden. Unmittelbar nach dem Wachstum wies die Probe im RHEED eine Aufspaltung der Hauptreflexe auf, die in Abbildung 5.10 (a) gezeigt ist. Es ist erkennbar, dass zwischen den Hauptreflexen der 2×1 -Rekonstruktion 6 schwache Nebenreflexe auftreten, was auf eine regelmäßige Stufenanordnung bestehend aus Doppelstufen mit einer durchschnittlichen Terrassenlänge von etwa 7 Atomen (Terrassenbreite von $d_{T,Ge} \approx 27 \text{ \AA}$ für Ge) deutet [140]. Die Ge-Schicht zeigt eine Oberflächenrauigkeit von $R_{rms} = 0,3 \text{ nm}$, die somit vergleichbar zu den in Kapitel 5.2.2 gezeigten Ergebnissen ist.

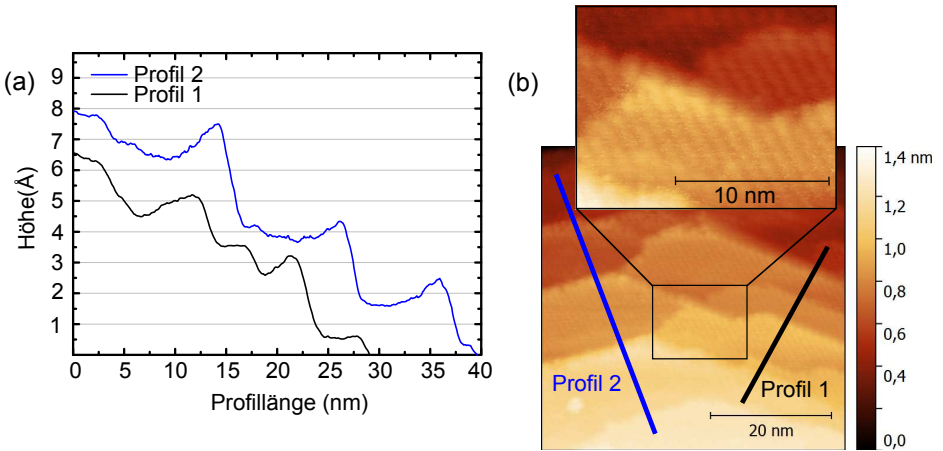


Abb. 5.11: STM-Untersuchung einer SME-hergestellten Ge-Oberfläche ($d_{Ge} = 400 \text{ nm}$) bei $T = 920^\circ\text{C}$. (a) Extrahierte der überwiegend doppel-atomar gestuften Ge-Oberfläche, in Höhenprofil 1 ist erkennbar, dass ebenfalls mono-atomare Stufen auftreten. (b) STM-Bild der Ge-Oberfläche, eingefärbt mit gwyddion [182]. Zu erkennen sind überwiegend doppel-atomare Stufen mit orthogonal zu den Stufenkanten verlaufenden Dimerreihen. Zur besseren Veranschaulichung der Ein-Domänigkeit der Oberfläche ist ein Bildausschnitt bei größerer Auflösung eingefügt worden

Die STM-Untersuchungen, durchgeführt von Christian Brand (siehe Kapitel 4.4.1), zeigen, dass eine ein-domänige Ge-Oberfläche vorliegt. Diese besteht vorwiegend aus Stufen doppel-atomarer Höhe und ist in Abbildung 5.11 gezeigt. Die Höhenprofile in Abbildung 5.11 (a) zeigen, dass die Höhe der Stufen durchschnittlich der theoretischen Höhe einer Ge-Doppelstufe

$H_{Ge,DS} \approx 2,8 \text{ \AA}$ entspricht. Allerdings liegt keine einheitliche Terrassenbreite vor, diese variiert zwischen $30 \text{ \AA} \leq d_{T,Ge} \leq 120 \text{ \AA}$. Da die Terrassen außerdem überwiegend Dimerreihen aufweisen, die orthogonal zur Terrassenkante verlaufen [109], liegt eine ein-domänige D_B -Konfiguration (siehe Kapitel 3.2.1) der 2×1 -rekonstruierten Ge-Oberfläche bestehend aus doppel-atomar gestuften Terrassen vor (siehe vergrößerter Bildausschnitt in Abbildung 5.11 (b)). Zwar überwiegt eine doppel-atomar gestufte Ge-Oberfläche, jedoch ist die Ausprägung der Doppelstufen unregelmäßig und kann nicht auf allen untersuchten Bereichen der Probe gesehen werden. Zusätzlich ist anhand des Höhenprofils 1 in Abbildung 5.11 erkennbar, dass auch mono-atomar gestufte Terrassen mit einer Stufenhöhe von $H_{Ge,ES} \approx 1,4 \text{ \AA}$ vorliegen. Diese Ergebnisse unterstützen die TEM- und XRD-Ergebnisse, die von RUHKOPF an einer identisch hergestellten Probe gezeigt worden sind [114]. Zum Nachweis der doppel-atomar gestuften Oberfläche ist in [114] auf die Ge-Schicht Gd_2O_3 (mit $d_{Gd_2O_3} = 7 \text{ nm}$) aufgewachsen worden. So ist bereits gezeigt worden, dass Gd_2O_3 auf einer vizinalen Si(001)-Oberfläche mit nur einer Domäne aufwächst, sofern eine doppel-atomar gestufte Oberfläche vorliegt [183]. Bei RUHKOPF [114] konnten allerdings zwei verschiedene Gd_2O_3 -Domänen nachgewiesen werden, von denen jedoch eine deutlich überwog. Daher passen die hier vorgestellten STM-Untersuchungen zu dem von RUHKOPF [114] gezogenen Fazit: es liegt für die untersuchte Probe eine ein-domänige Ge-Oberfläche mit vorwiegend doppel-atomaren Stufen vor, auf der vereinzelt auch mono-atomare Stufen vorhanden sind.

Es ist jedoch nicht auszuschließen, dass sich die Ge-Oberfläche durch die in situ Präparation verändert hat. Im Gegensatz zu der Präparation in einer MBE, bei der die Probe indirekt durch eine Strahlungsheizung auf die entsprechende Temperatur erhitzt wird, wird die Probe im STM durch Strom direkt geheizt. Während sich eine doppel-atomar gestufte Ge-Oberfläche (durch Strahlungsheizung) für eine Verkipfung von $\delta_{kipf} = 6^\circ$ bei $T = 650 \text{ }^\circ\text{C}$ (für mindestens 5 min) ausbildet [107], musste die Probe auf eine Temperatur von $T = 920 \text{ }^\circ\text{C}$ ¹⁶ erhitzt werden. Bis zu einer Temperatur von $T < 900 \text{ }^\circ\text{C}$ konnte lediglich die oxidierte Ge-Oberfläche beobachtet werden, obwohl bekannt ist, dass sich GeO_2 oberhalb von $T = 600 \text{ }^\circ\text{C}$ in GeO umwandelt, welches wiederum instabil ist und desorbiert [184, 185]. Folglich konnte die Ge-Oberfläche erst bei Temperaturen $T \geq 920 \text{ }^\circ\text{C}$ untersucht werden, wobei festzuhalten ist, dass der Schmelzpunkt von Ge bei $T = 938,2 \text{ }^\circ\text{C}$ liegt. Bereits bei $T = 930 \text{ }^\circ\text{C}$ konnte im STM ein Aufschmelzen der Ge-Oberfläche beobachtet werden. Außerdem kann durch den angelegten Strom eine Migration der Ge-Atome in

¹⁶Die Temperatur während der STM-Untersuchungen ist durch ein auf die Probe gerichtetes Pyrometer bestimmt worden.

Richtung des Stroms nicht ausgeschlossen werden, so wie es bereits für vizi-nale Si(001)-Oberflächen mit $\delta_{kip} = 6^\circ$ gezeigt worden ist [186]. Daher kann ein Einfluss des angelegten Stroms auf die Ge-Oberfläche zur Probenheizung nicht ausgeschlossen werden. Jedoch bestätigt die STM-Untersuchung die Beobachtungen im RHEED, wie sie in Kapitel 3.2.1 erklärt werden, dass bei auftretender Aufspaltung der Hauptreflexe in 6 schwache Nebenreflexe eine überwiegend doppel-atomar gestufte Oberfläche vorliegt. Zusätzlich ist mit STM-Untersuchungen gezeigt worden, dass RHEED-Aufnahmen als Nachweis einer ein-domänigen Ge-Oberfläche, die doppel-atomar gestuft ist, verwendet werden können.

Stufenpräparation Der zweistufige Wachstumsprozess (siehe Tabelle 5.2) endet mit dem Wachstum von Ge bei Temperaturen, die geringer sind als die zur Ausbildung einer doppel-atomar gestuften Ge-Oberfläche. Für die Ausbildung dieser ein-domänigen Ge-Oberfläche mit $\delta_{kip} \approx 6^\circ$ ist ein Tem-persschritt für $t = 5 \text{ min}$ bei $T = 650^\circ\text{C}$ nötig [107]. Daher wird überprüft, ob die Ge-Oberfläche auch doppel-atomar gestuft ist, wenn der zweistufige Wachstumsprozess angewendet wird. Dazu werden exemplarisch RHEED-Aufnahmen der Probe SME600FD gezeigt. Bei dieser Probe ist zunächst Ge ($d_{SME,Ge} = 300 \text{ nm}$) unter Sb-Fluss bei $T_{Pyro} \approx 600^\circ\text{C}$ aufgewachsen worden und nach Sb-Desorption bei dieser Temperatur anschließend Ge ($d_{Ge} = 200 \text{ nm}$) bei $T_{Mani} = 430^\circ\text{C}$. In Abbildung 5.12 werden RHEED-Aufnahmen in $[-110]$ - bzw. $[1-10]$ -Richtung gezeigt. Zunächst wird nach dem Wachstum mit SME-Ge ersichtlich, dass eine 2×1 -rekonstruierte Ge(001)-Oberfläche vorliegt, bei der die Hauptreflexe in 6 schwach erkennbare Neben-reflexe aufspalten (Abbildung 5.12 (a)). Dieses ist, wie im vorigen Abschnitt gezeigt, ein Indikator für eine doppel-atomar gestufte Oberfläche. Festzuhalten bleibt, dass sich also bereits bei $T_{Pyro} \approx 600^\circ\text{C}$ doppel-atomare Stufen ausbilden. Wird Ge bei niedrigeren Temperaturen aufgewachsen, zeig-en die RHEED-Aufnahme (Abbildung 5.12 (b)) anschließend zwar ebenfalls schwach erkennbare Reflexe mit $\frac{1}{7}$ -Abstand, jedoch sind diese nur unmittelbar um die Hauptreflexe erkennbar. Daher deutet diese Beobachtung auf eine 2×1 -rekonstruierte Ge(001)-Oberfläche hin, bei der sowohl mono- als auch doppel-atomare Stufen vorliegen. Wird nun eine thermische Präparation durchgeführt, kann ausreichend Energie angeboten werden, damit sich auf der Ge-Oberfläche doppel-atomare Stufen ausbilden. Hierfür ist bereits ein Tem-persschritt bei $T_{Pyro} \approx 600^\circ\text{C}$ für $t = 10 \text{ min}$ ausreichend. Die RHEED-Aufnahme in Abbildung 5.12 (c) zeigt eine deutlich stärker erkennbare Auf-spaltung der Hauptreflexe in 6 Nebenreflexe. Auf eine höhere Temperatur zur Stufenpräparation wird verzichtet, um die Segregation von Sb aus der

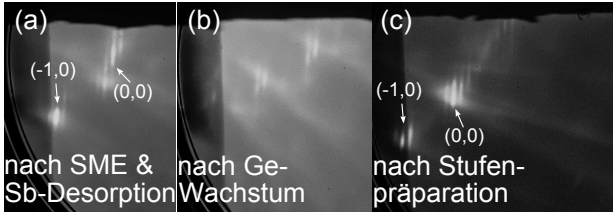


Abb. 5.12: RHEED-Aufnahmen (Probe SME600FD in $[-110]$ - bzw. $[1-10]$ -Richtung zu verschiedenen Zeitpunkten des zweistufigen Wachstums. (a) Nach dem ($d_{SME,Ge} = 300\text{ nm}$) unter Sb-Fluss bei $T_{Pyro} \approx 600\text{ }^\circ\text{C}$ und anschließender Sb-Desorption ($t = 5\text{ min}$); Aufspaltung der Hauptreflexe der 2×1 -Rekonstruktion in 6 schwach erkennbare Nebenreflexe. (b) Nach dem Ge-Wachstum ($d_{Ge} = 200\text{ nm}$) bei $T_{Mani} = 430\text{ }^\circ\text{C}$ tritt eine kaum erkennbare Aufspaltung der Hauptreflexe der 2×1 -Rekonstruktion auf. (c) Nach anschließender Stufenpräparation für $t = 10\text{ min}$ bei $T_{Pyro} \approx 600\text{ }^\circ\text{C}$ ist deutlich erkennbare Aufspaltung der Hauptreflexe der 2×1 -Rekonstruktion in 6 Nebenreflexe zu sehen. Exemplarisch sind die Reflexe indiziert.

SME-hergestellten Ge-Schicht an die Oberfläche zu begrenzen.

Für die Herstellung virtueller Ge-Substrate wird der in Tabelle 5.2 zweistufige Wachstumsprozess benutzt und um eine thermische Präparation ergänzt. Durch diese wird gewährleistet, dass eine überwiegend doppel-atomar gestufte Ge(001)-Oberfläche bei den Substraten mit Fehlschnitt ($\delta_{kipf} = 6^\circ$) vorliegt.

5.2.5 Herstellung virtueller Substrate für die GaAs-Epitaxie

Basierend auf den Ergebnissen aus diesem Kapitel sind für die Epitaxie von GaAs in Kapitel 6 vier virtuelle Ge-Substrate hergestellt worden. Im Vergleich zu den Untersuchungen dieses Kapitels sind die virtuellen Ge-Substrate auf Si-Substraten mit einem Durchmesser von 50 mm gewachsen worden und für die Epitaxie von GaAs geviertelt worden. Um den Einfluss des Fehlschnitts zu zeigen, ist der Wachstumsprozess jeweils auf einem Substrat *mit Fehlschnitt* (F) und auf einem *ohne Fehlschnitt* durchgeführt worden. Bei allen Substraten ist der in Tabelle 5.2 gezeigte zweistufige Prozesslauf mit anschließender thermischer Präparation ($t = 10\text{ min}$ bei $T_{Pyro} \approx 600\text{ }^\circ\text{C}$) zur Ausbildung einer doppel-atomar gestuften Ge-Oberfläche durchgeführt worden. Tabelle 5.3 gibt einen Überblick über die Prozessparameter. Die Wachstumstemperatur

Name	δ_{kipf}	$T_{Pyro,SME}$	$T_{Mani,Ge}$	n_d	R_{rms}
VS670F	6,1°	670 °C	430 °C	$1,6 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$	6,4 nm
VS670	0°	670 °C	430 °C	$3,5 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$	18 nm
VS630F	6,1°	630 °C	430 °C	$4,4 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$	1,4 nm
VS630	0°	630°C	430 °C	$5,9 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$	0,3 nm

Tab. 5.3: Probenübersicht der virtuellen Ge-Substrate hergestellt durch den zweistufigen Wachstumsprozess (Tabelle 5.2). Die Defektdichte ist aus der Halbwertsbreite der jeweiligen Rockingkurve um den Ge(004)-Reflex bestimmt worden. Der Fehler aus Bestimmung der Schichtdicke (mittels REM) beträgt maximal $1 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-2}$.

($T_{pyro,SME}$) im SME-Schritt ist variiert worden. Zusätzlich sind Ergebnisse der Charakterisierung mit AFM und XRD in Form der Oberflächenrauigkeit und der Defektdichte angegeben. Die beiden virtuellen Ge-Substrate (VS670F und VS670), die zunächst bei $T_{pyro,SME} \approx 670 \text{ °C}$ gewachsen worden sind, mussten ohne Ratensteuerung bei konstantem Emissionsstrom gewachsen werden. Als Folge dessen konnte die Schichtdicke während des Wachstums nicht kontrolliert werden. Die resultierenden Gesamtschichtdicken weisen bei diesen beiden Proben lediglich etwa 300 nm auf. Zu dem Verhältnis zwischen der Dicke der SME-Ge-Schicht und der Ge-Schicht ohne Sb-Fluss, das 3:2 betragen sollte, kann bei diesen beiden Proben keine Aussage gemacht werden. Die Defektdichte n_d , bestimmt aus der Halbwertsbreite der jeweiligen Rockingkurve um den Ge(004)-Reflex, ist ausgehend von 90°-Versetzungen bestimmt worden, wobei der Fehler aus der Ungenauigkeit der Schichtdickenbestimmung (mittels REM) maximal $1 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-2}$ beträgt. Die Oberflächenrauigkeit ist, verglichen mit den virtuellen Substraten VS630F und VS630, deutlich erhöht.

5.3 Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie

In diesem Kapitel wird die Herstellung virtueller Ge-Substrate durch CME vorgestellt. Diese werden hinsichtlich ihrer Eignung für die Epitaxie von III-V-Materialien untersucht. Diese Untersuchungen sind parallel zur Masterarbeit von SLAWIG [169] an der DCA S 1000 durchgeführt worden, sodass die Kalibration und der Test der Wachstumsbedingungen (insbesondere die Wahl von T_{Sub}) nicht Teil dieser Arbeit sind. In diesem Kapitel wird daher der optimierte Prozessablauf zur CME benutzt und auf die Eignung zur Herstellung virtueller Ge-Substrate *mit Fehlschnitt* untersucht. Die Probenbezeichnung beginnt folglich mit CME(F).

5.3.1 Optimierter Prozessablauf der CME

Der optimierte Prozessablauf, schematisch dargestellt in Abbildung 5.13 (a) nach TETZLAFF [99] umfasst die Abscheidung von $15 \text{ nm} \leq d_{Schicht} \leq 35 \text{ nm}$ Ge bei $T_{Sub,CME} = 50 \text{ }^\circ\text{C}$. Durch Abscheidung bei dieser Temperatur treten sowohl amorphe als auch kristalline Bereiche in der Ge-Schicht auf, weshalb dieser Prozess als *teilkristallin* bezeichnet wird. Anschließend wird die Oberfläche mit Kohlenstoff beschichtet ($\Lambda = 0,2 \text{ ML}$) und die Probe mit einer Rampe von $25 \frac{\text{K}}{\text{min}}$ auf $T_{Sub} = 650 \text{ }^\circ\text{C}$ gebracht, um das abgeschiedene Ge zu kristallisieren und den Relaxationsprozess einzuleiten (Abbildung 5.13 (b)). Dieser findet größtenteils bis $T_{Sub} < 450 \text{ }^\circ\text{C}$ [82] unter Ausbildung eines regelmäßigen Versetzungsnetzwerks statt. Für diese Variante können Relaxationsgrade¹⁷ von $R \leq 98\%$ erzielt werden [82] und die kristallisierte Ge-Schicht ist glatt. Allerdings bleiben bei dieser Variante am Schluss Reste von C an der Oberfläche zurück. Um nicht mit einer durch C verunreinigten Oberfläche zu enden, wird die Probe auf $T_{Sub,Ge} = 150 \text{ }^\circ\text{C}$ heruntergekühlt und in einem weiteren Schritt eine Ge-Schicht mit einer Dicke von $10 \text{ nm} \leq d_{Schicht} \leq 35 \text{ nm}$ aufgewachsen, die nach Abschluss ebenfalls glatt ist (Abbildung 5.13 (c)). Mit dieser Variante können vollständig relaxierte und glatte Ge-Schichten aufgewachsen werden, bei denen der Großteil des Relaxationsprozesses für $T_{Sub} < 200 \text{ }^\circ\text{C}$ unter Ausbildung eines regelmäßigen Versetzungsnetzwerks während des ersten Temperschritts passiert [82].

5.3.2 Probenherstellung

An allen drei Substraten ist die in Kapitel 5.1.3 beschriebene Reinigung mit anschließender Oberflächenpräparation durchgeführt worden. Die Substrate

¹⁷Durch XRD-Untersuchungen im Rahmen der Arbeit von TETZLAFF [99] mit demselben in Kapitel 4.2.1 beschriebenen Messaufbau ermittelt.

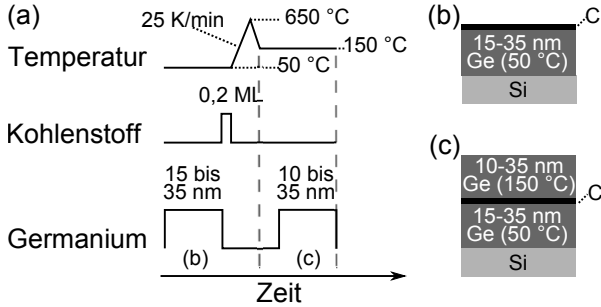


Abb. 5.13: Optimierter Prozesslauf zur CME nach TETZLAFF [99]. (a) Schema zur Herstellung von Ge-Schichten mit einem und zwei Schritten. (b) Abscheidung von Ge ($15 \text{ nm} \leq d_{\text{Ge}} \leq 35 \text{ nm}$) bei $T_{\text{Sub,CME}} = 50^\circ\text{C}$ mit $\Lambda = 0,2 \text{ ML C}$ auf der Oberfläche und anschließender Temperung auf $T_{\text{Sub}} = 650^\circ\text{C}$. (c) Fortführung des Prozesses aus (b) mit Wachstum von $10 \text{ nm} \leq d_{\text{Ge}} \leq 35 \text{ nm}$ Ge bei $T_{\text{Sub,Ge}} = 150^\circ\text{C}$, um mit einer Kohlenstofffreien Oberfläche zu enden.

haben unmittelbar vor dem Wachstum eine doppel-atomar gestufte Oberfläche im RHEED aufgewiesen. Bei $T_{\text{Sub,CME}} = 50^\circ\text{C}$ sind zwei Proben (CME(F)50 und CME(F)50-150) durch Abscheidung von $d_{\text{Schicht}} \approx 20 \text{ nm}$ Ge ($R_{\text{Ge}} \approx 1 \frac{\text{nm}}{\text{min}}$) sowie anschließender Abscheidung von Kohlenstoff ($\Lambda = \frac{1}{3} \text{ ML}$) und Temperung auf $T_{\text{Sub}} = 650^\circ\text{C}$ (Rampe: $25 \frac{\text{K}}{\text{min}}$) hergestellt worden. Die Probe CME(F)50-150 ist anschließend, wie in Abbildung 5.13 (c) gezeigt, auf $T_{\text{Sub,Ge}} = 150^\circ\text{C}$ heruntergekühlt worden und eine weitere Ge-Schicht mit einer Dicke von $d_{\text{Schicht}} \approx 20 \text{ nm}$ ($R_{\text{Ge}} \approx 1 \frac{\text{nm}}{\text{min}}$) aufgewachsen worden, um nicht mit einer durch C verunreinigten Oberfläche zu enden.

Allerdings ist im Rahmen der Abschlussarbeit von SLAWIG [169] mit RHEED-Aufnahmen festgestellt worden, dass die bei $T_{\text{Sub,CME}} = 50^\circ\text{C}$ abgeschiedene Ge-Schicht nicht *teilkristallin*, sondern *amorph* ist. Dieses entspricht dem bei TETZLAFF für $T_{\text{Sub,CME}} = 40^\circ\text{C}$ gezeigten, *amorphen* Wachstumsprozess, der allerdings eine größere Anzahl an Fehlstapelungen und eine stärkere Interdiffusion von Si im Vergleich zum teilkristallinen Prozess aufweist [99]. Daher ist die am Manipulator eingestellte Substrattemperatur T_{Sub} für den *teilkristallinen* Prozess von SLAWIG [169] anhand vergleichender RHEED-Untersuchungen neu definiert worden¹⁸. Insbesondere die Bestimmung von

¹⁸Die Abweichung der Substrattemperatur T_{Sub} zwischen TETZLAFF [99] und SLAWIG [169] ist auf eine zwischenzeitliche Reparatur am Substratmanipulator der DCA S 1000 zurückzuführen.

Name	CME-Variante	$T_{Sub,CME}$	t_C	$T_{Sub,Ge}$
CME(F)50	amorph	50 °C	15 min	-
CME(F)50-150	amorph	50 °C	15 min	150 °C
CME(F)80-150	teilkristallin	80 °C	5 min	150 °C

Tab. 5.4: Übersicht der mit CME hergestellten virtuellen Ge-Substrate.

vergleichsweise niedrigen Temperaturen ist in MBE-Systemen schwierig, da in dem verwendeten Temperaturbereich nicht auf Pyrometer zurückgegriffen werden kann. Deshalb wird an dieser Stelle noch einmal betont, dass sich die Temperaturen nach TETZLAFF [99] für die einzelnen CME-Prozesse nicht geändert haben, sondern die am Manipulator eingestellte Leistung (d.h. Temperatur) für diese Versuche eine andere ist. Für eine weitere Probe (CME(F)80-150) ist bei $T_{Sub,CME} = 80\text{ °C}$ Ge abgeschieden worden. Bei dieser ist die Oberfläche anschließend mit Kohlenstoff beschichtet ($\frac{1}{3} ML$) sowie auf $T_{Sub} = 650\text{ °C}$ (Rampe: $25 \frac{K}{min}$) getempert worden. Um analog zu Probe CME(F)50-150 nicht mit einer durch C verunreinigten Oberfläche zu enden, ist die Probe auf $T_{Sub,Ge} = 150\text{ °C}$ heruntergekühlt worden und eine weitere Ge-Schicht mit einer Dicke von $d_{Schicht} \approx 20\text{ nm}$ ($R_{Ge} \approx 1 \frac{nm}{min}$) aufgewachsen worden. Für diese Probe konnte eine teilkristalline Ge-Schicht im ersten Prozessschritt für $T_{Sub,CME} = 80\text{ °C}$ erreicht werden.

Tabelle 5.4 fasst die Parameter für die drei gezeigten Proben zur Herstellung virtueller Ge-Substrate durch CME zusammen. Ausführliche Informationen zu den jeweiligen Proben dieses Kapitels können im Anhang auf Seite 132 nachgelesen werden. Für die drei hergestellten Proben wird die Dauer der C-Beschichtung t_C angegeben (bei festem Emissionsstrom $I_E = 101,5\text{ A}$), da die Menge an C nicht genauer als zwischen $\frac{1}{3} ML \leq \Lambda \leq 1 ML$ bestimmt werden konnte (siehe Kapitel 5.1.2). Die Ge-Schichten weisen alle eine nominelle Dicke von $d_{Schicht} \approx 20\text{ nm}$ auf und sind bei identischer Leistung des Elektronenstrahlverdampfers ($R_{Ge} \approx 1 \frac{nm}{min}$) abgeschieden/gewachsen worden.

5.3.3 CME auf verkippten Substraten

CME mit einer amorphen Ge-Schicht Probe CME(F)50, hergestellt mit einer *amorphen* Ge-Schicht, zeigt nach Abschluss der Prozessierung im RHEED keine doppel-atomar gestufte Oberfläche. In den RHEED-Aufnahmen ist in [110]- bzw. [-1-10]-Richtung zwar ein Aufspalten der Hauptreflexe zu

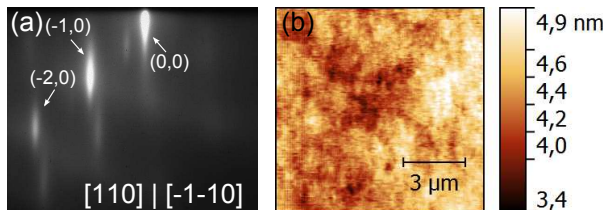


Abb. 5.14: Probe CME(F)50 nach der CME. (a) Die RHEED-Aufnahme in $[110]$ - bzw. $[-1-10]$ -Richtung nach der CME zeigt eine 2×1 -rekonstruierte $\text{Ge}(001)$ -Oberfläche mit Aufspaltung der Hauptreflexe. Exemplarisch sind die Reflexe indiziert. (b) AFM-Aufnahme (C-AFM) der glatten Oberfläche mit $R_{rms} = 0,2 \text{ nm}$.

sehen, siehe Abbildung 5.14, jedoch sind nicht die charakteristischen 6 schwachen Nebenreflexe zu erkennen. Stattdessen ist zwischen den Hauptreflexen der für eine 2×1 -rekonstruierte Ge-Oberfläche typische Nebenreflex schwach zu erkennen. Da in $[-110]$ - bzw. $[1-10]$ -Richtung im RHEED (hier nicht gezeigt) ebenfalls eine 2×1 -rekonstruierte Ge-Oberfläche zu sehen ist, liegt eine monoatomar gestufte Oberfläche mit Stufen des Typs S_a und S_b vor $[108]$ (siehe Kapitel 3.2.1). Die Probe ist anschließend für 5 min bei $T_{Mani} = 750^\circ\text{C}$ getempert worden, um die Ausbildung einer doppel-atomar gestuften Oberfläche zu begünstigen. Diese Temperatur entspricht laut Temperaturkalibration (siehe Abbildung 5.3) einer realen Temperatur von $T \approx 650^\circ\text{C}$. Diese Temperatur ist laut [107] ausreichend, um eine doppel-atomar gestufte Ge-Oberfläche bei $\delta_{kipf} \approx 6^\circ$ zur nächsten (111) -Ebene auszubilden. In [107] wird eine Temperung zunächst bei $T = 350^\circ\text{C}$ für 10 min und eine weitere für $t = 5 \text{ min}$ bei $T = 650^\circ\text{C}$ angeführt. Die zusätzliche Temperung bei $T_{Mani} = 750^\circ\text{C}$ hatte keinen Einfluss auf die Ge-Oberfläche und führte ebenfalls nicht zur Ausbildung einer doppel-atomar gestuften Oberfläche. Die Ge-Oberfläche ist, wie die RHEED-Aufnahmen bereits zeigen, glatt und weist eine quadratische Rauigkeit von $R_{rms} = 0,2 \text{ nm}$ (R_{rms} , engl. *root-mean-squared Roughness*) auf.

Die Probe CME(F)50 ist nach der ersten *ex situ* Charakterisierung erneut nach thermischer Entfernung des gebildeten GeO_x einer Stufenpräparation unterzogen worden. Dazu ist jeweils für 5 min die Probe bei $T_{Mani} = 800^\circ\text{C}$ und $T_{Mani} = 850^\circ\text{C}$ getempert worden, während die Oberfläche mit RHEED beobachtet worden ist. Die RHEED-Bilder zeigen keinen qualitativen Unterschied zu der in Abbildung 5.14 gezeigten Aufnahme. Die Ge-Oberfläche ist weiterhin mono-atomar gestuft und weist eine 2×1 -rekonstruierte Ober-

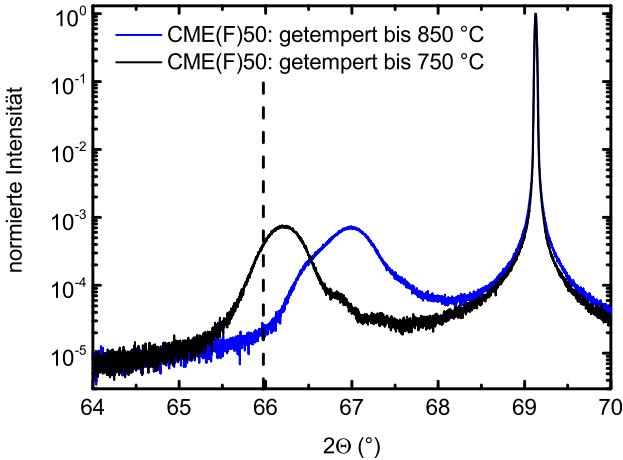


Abb. 5.15: $\Theta-2\Theta$ -Messung der Probe CME(F)50. Nach erster Temperung bis $T_{Mani} = 750\text{ °C}$ in Schwarz dargestellt, nach erneuter Temperung bis $T_{Mani} = 850\text{ °C}$ in Blau dargestellt. Der Volumenwert von a_{Ge} ist als gestrichelte Linie dargestellt. Die Messkurven sind auf die Intensität und auf den Si(004)-Reflex normiert worden.

fläche auf. Nach der letzten Temperung ist bei derselben Temperatur für $t = 10\text{ min}$ Ge mit $R_{Ge} = 0,12\frac{nm}{min}$ angeboten worden. Jedoch hat auch das zusätzliche Ge-Angebot nicht zu der Ausbildung einer doppel-atomar gestuften Oberfläche geführt. Folglich ist eine Erhöhung der Temperatur (und zusätzlich Ge-Angebot) zur Ausbildung einer doppel-atomar gestuften Oberfläche von CME-hergestellten Ge-Schichten nicht ausreichend. Bei dieser Probe (CME(F)50) ist allerdings noch C an der Oberfläche, weshalb anzunehmen ist, dass der verbleibende C die Ausbildung einer doppel-atomar gestuften Oberfläche verhindert.

Die Bestimmung der out-of-plane Gitterkonstanten $a_{Ge,\perp}$ der Probe vor und nach dem weiteren Temperung zeigt eine Verringerung von $a_{Ge,\perp}$ (die Intensität des Ge-Schwerpunkts ist zu einem größeren 2Θ -Winkel verschoben, siehe Abbildung 5.15) bei der bis $T_{Mani} = 850\text{ °C}$ getemperten Probe. Während der Relaxationsgrad vor dem erneuten Tempersschritt $R = 106\%$ betrug, würde die nach der Temperung bei $T_{Mani} = 850\text{ °C}$ gemessene out-of-plane Gitterkonstante $a_{Ge,\perp}$ einem "scheinbaren" Relaxationsgrad von $R = 140\%$

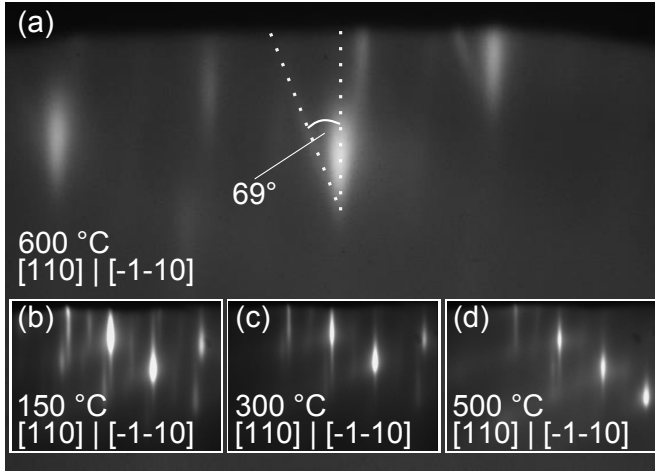


Abb. 5.16: RHEED-Aufnahmen in $[-110]$ - bzw. $[1-10]$ -Richtung der Probe CME(F)50-150 nach dem Ge-Wachstum. (a) Bei $T_{Mani} = 600\text{ °C}$ tritt eine fächerförmige Aufspaltung der Hauptreflexe ein, die auf eine Facettierung der Ge-Oberfläche hindeutet. Die halbe Fächeröffnung beträgt 69° . (b) Bei $T_{Sub,Ge} = 150\text{ °C}$, nach dem Ge-Wachstum. (c) Bei $T_{Mani} = 300\text{ °C}$, während der Temperung. (d) Bei $T_{Mani} = 500\text{ °C}$, während der Temperung.

entsprechen; beide Relaxationsgrade sind bereits um den Einfluss der thermischen Verspannung aufgrund unterschiedlicher Ausdehnungskoeffizienten (siehe Kapitel 2.2) korrigiert. Ein derartig hoher Relaxationsgrad ist physikalisch nicht sinnvoll und auf Diffusion von Si in das Ge zurückzuführen. Diese Diffusion hat zu der Ausbildung von $Si_{1-x}Ge_x$ geführt, wie in Abbildung 5.15 anhand der Verschiebung der Ge-Gitterkonstanten in Richtung des Si(004)-Reflexes in der $\Theta - 2\Theta$ -Messung deutlich wird. Durch Bestimmung von $a_{Ge,\perp}$ aus der $\Theta - 2\Theta$ -Messung und der Annahme, dass $a_{Ge,\parallel} = a_{Ge,\perp}$ ist, da vor der erneuten Temperung bereits vollständige Relaxation eingetreten ist, kann der Ge-Anteil zu 70% (nach [187])¹⁹ abgeschätzt werden. Folglich darf eine Temperung eine Temperatur von $T_{Mani} < 750\text{ °C}$ (entspricht einer realen Temperatur von $T \approx 650\text{ °C}$) nicht überschreiten, da es zur Ausbildung von $Si_{1-x}Ge_x$ kommt.

¹⁹In [188] ist gezeigt, dass die Abschätzung nach DISMUKES [187] der nach der Vegardschen Regel [189] vorzuziehen ist.

Um nicht mit einer durch C verunreinigten Oberfläche zu enden, ist bei Probe CME(F)50-150 nach der ersten Temperung die Probe heruntergekühlt worden und eine weitere Ge-Schicht ($d_{Schicht} \approx 20 \text{ nm}$) aufgewachsen worden. RHEED-Aufnahmen unmittelbar nach diesem Wachstum zeigen eine 2×1 -rekonstruierte Ge-Oberfläche, bei der in $[-110]$ - bzw. $[1-10]$ -Richtung eine Aufspaltung der Hauptreflexe erkennbar ist. Jedoch sind wie bei Probe CME(F)50 keine weiteren Nebenreflexe zu erkennen, sodass auch bei dieser Probe direkt nach dem Wachstum keine doppel-atomar gestufte Oberfläche auftritt (siehe Abbildung 5.16 (b)). Um die Ausbildung von Doppelstufen zu begünstigen, ist die Probe bei $T_{Mani} = 650 \text{ }^\circ\text{C}$ getempert worden. Während des Tempervorgangs sind RHEED-Aufnahmen in Abständen von $\Delta_T = 100 \text{ }^\circ\text{C}$ aufgenommen worden. Bis $T_{Mani} = 500 \text{ }^\circ\text{C}$ (siehe Abbildung 5.16 (c) und (d)) bleibt das RHEED-Bild qualitativ unverändert, sodass weiterhin keine doppel-atomar gestufte Oberfläche vorliegt. Ab $T_{Mani} = 600 \text{ }^\circ\text{C}$ tritt dann eine Facettierung der Oberfläche auf, die durch die fächerförmige Aufspaltung der Hauptreflexe (siehe Abbildung 5.16 (a)) im RHEED sichtbar wird. Aus diesen Aufnahmen lässt sich die dominierende Facettenorientierung bestimmen, wobei die Entstehung der fächerförmigen Aufspaltung durch die kinematische Streutheorie erklärt werden kann [127]. Innerhalb dieser wird die Streuung jedes einzelnen Elektrons an der Oberfläche unter folgenden Vereinfachungen betrachtet (Born-Näherung) [190]: Zum einen ist die Elektron-Atom-Wechselwirkung elastisch (vgl. Kapitel 4.1), zum anderen wechselwirken die einfallenden Elektronen nur mit einem Oberflächenatom. Entstehende Linien im RHEED-Beugungsbild sind auf konstruktive Interferenz der einzeln gestreuten Elektronen zurückzuführen [191]. Die Bestimmung der Facetten ist erstmals für das Wachstum von InAs-Quantenpunkten auf GaAs [192] und zum Beispiel für das Wachstum geringer Mengen von Ge auf Si(111) [72] untersucht worden. Bei Probe CME(F)50-150 lässt sich exemplarisch ein Winkel der halben fächerförmigen Aufspaltung bestimmen, dargestellt in Abbildung 5.16 (a). Der Winkel der fächerförmigen Aufspaltung beträgt $\sphericalangle \approx 69^\circ$ und weist auf $\{113\}$ -Facetten hin. Diese bilden auf Si(001)-Substraten einen Kontaktwinkel von $\sphericalangle(100)(113) = 72,5^\circ$. Im Rahmen des Fehlers lässt sich aus der auftretenden fächerförmigen Aufspaltung schließen, dass $\{113\}$ -Facetten dominierend sind. Die Ausbildung von Facetten ist bereits von der Surfactant-modifizierten Festphasenepitaxie von Ge bekannt [193].

Die Inselbildung bei Probe CME(F)50-150 ist ex situ anhand der AFM-Aufnahmen (siehe Abbildung 5.17) zu erkennen, die Rauigkeit beträgt $R_{rms} = 22,2 \text{ nm}$ und wird durch die REM-Aufnahmen im Querschnitt und in Draufsicht bestätigt. Da Inselbildung während der zweiten Temperung aufgetreten

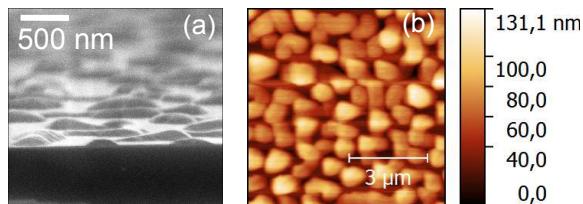


Abb. 5.17: SEM- und AFM-Aufnahmen der Probe CME(F)50-150. (a) REM-Aufnahme im Querbruch bei 5.000-facher Vergrößerung und $U_b = 5 \text{ kV}$. (b) AFM-Aufnahme (C-AFM) mit einer Rauigkeit der Oberfläche von $R_{rms} = 22,2 \text{ nm}$.

ist, kann angenommen werden, dass vor dem Ge-Wachstum zu viel C an der Oberfläche gewesen sein muss. Daher muss die Menge an C deutlich größer als $\Lambda > \frac{1}{3} ML$ gewesen sein und liegt vermutlich im Bereich $\Lambda \geq 1 ML$. Zwar entspricht die gemessene out-of-plane Gitterkonstante $a_{Ge,\perp}$ (siehe Abbildung 5.19) einem Relaxationsgrad für diese Probe von $R = 97\%$, jedoch ist dieser Wert eine Kombination der ersten, abgeschiedenen Ge-Schicht und der Ge-Inseln, die nach dem Wachstum der zweiten Ge-Schicht mit anschließender Temperung (bei $T_{Mani} = 650^\circ\text{C}$) aufgetreten sind.

Der amorphe CME-Prozess führte weder mit C-Bedeckung an der Oberfläche und anschließender Temperung (CME(F)50) noch mit einem weiteren Ge-Wachstum bei $T_{Sub,Ge} = 150^\circ\text{C}$ (CME(F)50-150) zu doppel-atomar gestuften Oberflächen. Zwar liegen bei beiden Proben zunächst glatte Schichten vor, jedoch trat bei Probe CME(F)50-150 ab $T_{Mani} = 600^\circ\text{C}$ eine Facettierung der Oberfläche ein.

CME mit einer teilkristallinen Ge-Schicht Die im optimierten Prozesslauf nach TETZLAFF [99] (siehe Kapitel 5.13) beschriebene teilkristalline Ge-Schicht im ersten Schritt konnte bei $T_{Sub,CME} = 80^\circ\text{C}$ realisiert werden (CME(F)80-150). Außerdem ist die Dauer der anschließenden C-Abscheidung auf $t_C = 5 \text{ min}$ reduziert worden, um eine Inselbildung während der abschließenden Temperung, wie bei Probe CME(F)50-150, zu verhindern. Das Vorgehen zur Herstellung von CME(F)80-150 ist somit direkt vergleichbar mit dem von Probe CME(F)50-150. Nach dem Ge-Wachstum bei $T_{Sub,Ge} = 150^\circ\text{C}$ ist auf den RHEED-Aufnahmen eine 2×1 -rekonstruierte Ge-Oberfläche, bei der in $[-110]$ - bzw. $[1-10]$ -Richtung eine Aufspaltung der Hauptreflexe auftritt, zu erkennen. Dieses ist vergleichbar mit der RHEED-Aufnahme von Probe CME(F)50-150 bei derselben Temperatur. Da keine weiteren Nebenreflexe zu

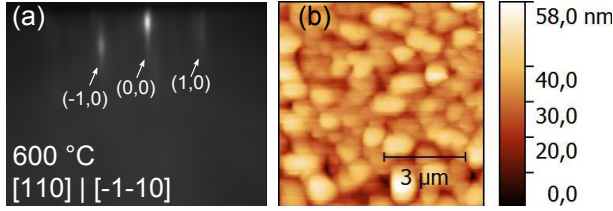


Abb. 5.18: RHEED- und AFM-Aufnahme der Probe CME(F)80-150. (a) In $[-110]$ - bzw. $[1-10]$ -Richtung ist bei $T_{Mani} = 600\text{ °C}$ eine 2×1 -rekonstruierte (mit schwach erkennbarer Aufspaltung der Hauptreflexe) Ge-Oberfläche zu erkennen, zeigt. Folglich liegt auch bei dieser Probe keine doppel-atomar gestufte Oberfläche vor. Exemplarisch sind die Reflexe indiziert. (b) AFM-Aufnahme (C-AFM) mit einer Rauigkeit der Oberfläche von $R_{rms} = 7,2\text{ nm}$.

erkennen sind, lässt sich analog schließen, dass auch bei dieser Probe direkt nach dem Wachstum keine doppel-atomar gestufte Oberfläche auftritt (siehe Abbildung 5.18 (a)). Um die Ausbildung von Doppelstufen zu begünstigen, ist die Probe ebenfalls bis $T_{Mani} = 650\text{ °C}$ getempert worden und RHEED-Aufnahmen in Abständen von $\Delta T = 100\text{ °C}$ während des Tempervorgangs aufgenommen worden. Im Gegensatz zu Probe CME(F)50-150 findet keine im RHEED erkennbare Facettierung der Oberfläche bis zum Schluss statt. Auf allen RHEED-Aufnahmen ist die 2×1 -rekonstruierte Ge-Oberfläche sowohl in $[110]$ - bzw. $[-1-10]$ - als auch in $[-110]$ - bzw. $[1-10]$ -Richtung, bei der die Aufspaltung der Hauptreflexe auftritt, zu erkennen. Daraus lässt sich schließen, dass auch bei dieser Probe keine doppel-atomar gestufte Ge-Oberfläche realisiert werden konnte. Die Ursache hierfür kann eine immer noch zu große Menge an C auf der Oberfläche sein, wobei die Rolle des C bei der Ausbildung von doppel-atomaren Stufen auf Ge-Oberflächen bisher nicht untersucht worden ist.

Ferner zeigt die Probe ex situ, dass eine im RHEED nicht sichtbare Aufrauung der Oberfläche während der letzten Temperung eingetreten ist. Aus AFM-Aufnahmen, die in Abbildung 5.18 (b) exemplarisch gezeigt sind, lässt sich die Rauigkeit zu $R_{rms} = 7,2\text{ nm}$ bestimmen. Verglichen mit Probe CME(F)50-150 ($R_{rms} = 22,2\text{ nm}$) ist die Rauigkeit deutlich geringer, jedoch nicht vergleichbar mit den Oberflächenrauigkeiten, die bei der Surfactant-modifizierten Epitaxie ($R_{rms} \approx 1\text{ nm}$, siehe Kapitel 5.2.2) erzielt werden können. Jedoch ist von TETZLAFF bereits gezeigt worden, dass Oberflächenrauigkeiten von $R_{rms} < 0,5\text{ nm}$ mit der CME möglich sind [130]. Anhand der $\Theta-2\Theta$ -Messung,

gezeigt in Abbildung 5.19 (graue Messdaten), lässt sich der Relaxationsgrad nach Korrektur um den Einfluss der thermisch induzierten Verspannung (siehe Kapitel 2.2) zu $R = 95\%$ bestimmen.

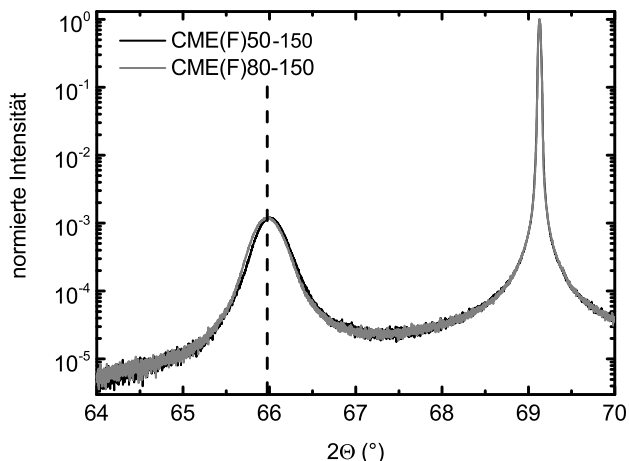


Abb. 5.19: $\Theta - 2\Theta$ -Messungen der Probe CME(F)50-150 und CME(F)80-150. In Schwarz dargestellt ist die Probe CME(F)50-150, die mit dem *amorphen* CME-Prozess hergestellt worden ist. In Grau dargestellt ist die Probe CME(F)80-150, die mit dem *teilkristallinen* CME-Prozess hergestellt worden ist. Der Volumenwert von a_{Ge} ist als gestrichelte Linie dargestellt. Intensität normiert und auf den Si(004)-Reflex normiert.

Bewertung Die Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie ist hinsichtlich ihrer Eignung zur Herstellung virtueller Ge-Substrate für die Epitaxie von III-V-Materialien untersucht worden. Dazu sind sowohl mit dem *amorphen* als auch mit dem *teilkristallinen* CME-Prozess (nach TETZLAFF [99]) Ge-Schichten ($d \leq 40 \text{ nm}$) auf fehlgeschnittenen Si(001)-Substraten hergestellt worden. Als Kriterien, die Eignung CME-hergestellter Ge-Schichten zu beurteilen, dienen zum einen die Oberflächenbeschaffenheit (Rauigkeit und Stufenstruktur) sowie der Relaxationsgrad. Zwar konnte der CME-Prozess erstmalig auch auf fehlgeschnittenen Substraten durchgeführt werden, jedoch konnte keine doppel-atomar gestufte Ge-Oberfläche trotz entsprechender thermi-

scher Präparation erreicht werden. Die hergestellten Ge-Schichten waren alle voll relaxiert und wiesen somit einen vergleichbaren Relaxationsgrad (zu TETZLAFF [82, 130]) auf.

Zwar konnte mit dem *amorphen* CME-Prozess (nur CME-Schritt, Probe CME(F)50) eine glatte Schicht ($R_{rms} = 0,2\text{ nm}$) gewachsen werden, jedoch wies diese auch nach entsprechender thermischer Präparation keine doppel-atomar gestufte Oberfläche auf. Bei zu großen Temperaturen ($T_{Mani} > 750\text{ °C}$) tritt Diffusion von Si in die Ge-Schicht auf und es kommt zur Ausbildung von $Si_{1-x}Ge_x$. Dass sich keine doppel-atomar gestufte Oberfläche (Ausbildung bei $T = 650\text{ °C}$ [107]) bildet, kann auf den an der Oberfläche verbliebenen C zurückgeführt werden. Um eine kohlenstofffreie Oberfläche nach Abschluss des Prozesses zu haben, ist in einem zweiten Schritt Ge aufgewachsen worden, jedoch bildete diese ebenfalls keine doppel-atomar gestufte Oberfläche aus (Probe CME(F)50-150). Zwar war direkt nach dem Wachstum bei $T_{Mani} = 150\text{ °C}$ im RHEED noch keine Inselbildung zu erkennen, doch zeigte sich diese bei der anschließenden Temperung. Für $T_{Mani} \geq 600\text{ °C}$ konnte eine Facettierung der Oberfläche beobachtet werden ($R_{rms} = 22,2\text{ nm}$). Dieses weist auf eine deutlich zu große Menge an C nach der Beschichtung der Oberfläche hin, die aufgrund dieses Ergebnisses größer als $\Lambda \geq 1\text{ ML}$ gewesen sein muss.

Für den *teilkristallinen* CME-Prozess (2-stufig; Probe CME(F)80-150) konnte ebenfalls keine glatte Oberfläche realisiert werden ($R_{rms} = 7,2\text{ nm}$), wengleich keine Facettierung der Oberfläche während der abschließenden Temperung durch RHEED-Aufnahmen zu beobachten war. Die Dauer der C-Abscheidung ist aufgrund der Ergebnisse des *amorphen* CME-Prozesses zwar auf ein Drittel reduziert worden, jedoch weist die auftretende Facettierung auf eine größere Menge an C als $\Lambda \geq \frac{1}{3}\text{ ML}$ hin. Auch hier bildete sich trotz entsprechender thermischer Präparation keine doppel-atomar gestufte Oberfläche aus.

Es kann festgehalten werden, dass im Rahmen der vorliegenden Dissertation die Eignung der Kohlenstoff-unterstützten Epitaxie zur Herstellung virtueller Ge-Substrate für die Epitaxie von III-V-Materialien nicht abschließend beurteilt werden kann. Für das Wachstum von GaAs ist eine doppel-atomar gestufte Oberfläche notwendig (siehe Kapitel 3.2.1). Aufgrund der auftretenden Facettierung (ohne C-Verunreinigungen) und der nicht doppel-atomar gestuften Oberflächen werden keine virtuellen Ge-Substrate mit CME für die Epitaxie von GaAs (siehe Kapitel 6) hergestellt. Die Eignung der CME für die Herstellung virtueller Ge-Substrate sollte daher nicht aufgrund dieser Versuche abschließend beurteilt werden. Damit die Ausbildung einer doppel-atomar gestuften (D_B) Ge-Oberfläche gelingt, müssen weitere Untersuchungen ins-

besondere die Rolle des C bei der Ausbildung von vizinalen Ge-Oberflächen untersuchen. Dazu ist eine genaue Kalibration der C-Beschichtungsrate notwendig, die in der vorliegenden Dissertation nicht erzielt werden konnte. Gelingt die Ausbildung einer doppel-atomar gestuften (D_B) Ge-Oberfläche einer voll relaxierten (hier bereits gezeigt) Ge-Schicht, so kann die CME eine entscheidende Rolle bei der Integration von III-V-Materialien auf Si einnehmen.

5.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel sind epitaktische Verfahren zur Herstellung virtueller Ge-Substrate für III-V-Halbleiter untersucht worden. Es sind die Surfactant-modifizierte Epitaxie mit Sb und die Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie verwendet worden. Für beide Verfahren diente die Ausbildung einer doppel-atomar gestuften Ge-Oberfläche als Kriterium für die Eignung als virtuelles Substrat. Zusätzlich sind strukturelle Eigenschaften wie die Defektdichte und der Relaxationsgrad als Vergleichsgröße gewählt worden. Während die Surfactant-modifizierte Epitaxie von Ge geeignet ist, um virtuelle Ge-Substrate herzustellen, konnten mit der Kohlenstoff-unterstützten Epitaxie zwar strukturell vergleichbare (zur SME) Ge-Schichten hergestellt werden, jedoch konnten die Ge-Schichten anschließend nicht derart präpariert werden, dass sich eine doppel-atomar gestufte Ge-Oberfläche ausbildet.

Für die virtuellen Ge-Substrate ist ein zweistufiger Wachstumsprozess basierend auf der SME vorgestellt worden. Die hergestellten Proben weisen eine Gesamtschichtdicke von $d = 500 \text{ nm}$ auf und die Schichten sind hinsichtlich der Prozessparameter auf die strukturellen Eigenschaften und die Oberflächenmorphologie optimiert worden. Der zweistufige Prozess gewährleistet, dass die Menge an Sb, welches nach Prozessende an der Oberfläche verbleibt, so gering wie möglich ist. Dazu sind neben XPS-Untersuchungen SIMS-Untersuchungen durchgeführt worden, durch die die Menge an verbliebenem Sb auf weniger als $A = \frac{1}{100} \text{ ML}$ abgeschätzt werden kann. Zusätzlich ist mit STM-Untersuchungen gezeigt worden, dass RHEED-Aufnahmen als Nachweis einer ein-domänigen Ge-Oberfläche, die doppel-atomar gestuft ist, verwendet werden können. Allerdings muss nach dem zweistufigen Wachstum, das mit einer Ge-Schicht bei $T_{\text{Mani}} = 430 \text{ °C}$ endet, noch eine thermische Präparation zur Ausbildung der doppel-atomar gestuften Oberfläche durchgeführt werden.

Die Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie erlaubt es zwar, virtuelle Ge-Substrate mit Ge-Schichtdicken $d_{\text{Ge}} \leq 50 \text{ nm}$ herzustellen, die voll relaxiert sind, jedoch konnten keine Wachstumsbedingungen gefunden werden, in denen sich eine doppel-atomar gestufte Ge-Oberfläche ausbildet. Als möglicher Grund zeigt sich die Menge an C, die nach der Beschichtung auf der Oberfläche ist und weiterer Untersuchungen bedarf, um die Eignung der CME zur Herstellung virtueller Ge-Substrate abschließend zu beurteilen.

6 GaAs-Epitaxie auf virtuellen Germaniumsubstraten

In diesem Kapitel wird zunächst die Reinigung der virtuellen Ge-Substrate erklärt, da sie von der *HF*-Ozon-basierten Reinigung, die für die Si-Substrate verwendet worden ist (siehe Kapitel 5.1.4), abweicht. Anschließend wird die Epitaxie von GaAs auf den virtuellen Ge-Substraten mit $d \approx 1 \mu\text{m}$ dicken GaAs-Schichten untersucht. Zu klären ist, welchen Einfluss der Fehlschnitt des Substrats auf die strukturellen Eigenschaften der GaAs-Schicht hat. Dazu wird das Augenmerk auf die strukturelle Qualität der GaAs-Schichten durch die Untersuchung mit XRD und TEM gelegt. Insbesondere durch TEM lassen sich Antiphasengrenzen nachweisen, die durch Ausbildung einer doppel-atomar gestuften Ge-Oberfläche verhindert werden können. Außerdem wird der Einfluss des As_4 -Partialdrucks auf die Schichtqualität untersucht.

6.1 Probenpräparation

Im Folgenden wird eine Übersicht über das verwendete MBE-System zum Wachstum von GaAs auf virtuellen Ge-Substraten gegeben. Zusätzlich wird auf die Kalibration von Temperatur und Wachstumsraten an dem verwendeten MBE-System eingegangen. Abschließend wird die Reinigung virtueller Ge-Substrate sowie die *in situ* Oberflächenpräparation anhand von RHEED-Aufnahmen erklärt.

6.1.1 MBE-System

Die GaAs-Epitaxie auf den hergestellten virtuellen Ge-Substraten wird in einer Riber C21T III-V-Molekularstrahlepitaxieanlage im Laboratorium für Nano- und Quantenengineering der Leibniz Universität Hannover durchgeführt. Das beschriebene MBE-System gehört zu dem Institut für Festkörperphysik der Leibniz Universität Hannover und wird von Dr. Eddy Patrick Rugeramigabo betrieben. Es ist zu beachten, dass Si und Ge als Dotierstoffe bei der Epitaxie von GaAs verwendet werden. Um eine ungewollte Dotierung zu vermeiden, werden in der Regel verschiedene MBE-Systeme für Gruppe IV- (Si/Ge) und III-V-Epitaxie (GaAs) benutzt.

Riber C21T III-V Die RIBER C21T III-V wird für das Wachstum von GaAs auf den hergestellten virtuellen Ge-Substraten verwendet. Das UHV-MBE-System besteht aus drei Kammern, in denen Proben bis zu einer Größe

von 2 Zoll prozessiert werden können. Neben der Schleusenkammer steht eine Präparationskammer, ausgestattet mit Turbo- und Ionengetterpumpe, zur Verfügung in der Proben thermisch präpariert werden können ($T \leq 440^\circ\text{C}$). Die Wachstumskammer, die durch flüssigen Stickstoff gekühlt wird, hat einen Basisdruck $p < 1 \cdot 10^{10} \text{ mbar}$ und wird mit einer Kryo-Pumpe sowie einer Turbomolekularpumpe betrieben. In der Wachstumskammer stehen Effusionszellen zum Verdampfen von Si , Ga und As_4 zur Verfügung, wobei Letzteres durch eine Cracker-Zelle in As_2 aufgespalten werden kann. Zur in situ Überwachung des Wachstums kann zum einen das verbaute RHEED-System der Firma STAIB INSTRUMENTE verwendet werden, zum anderen ist ein Massenspektrometer angeschlossen.

6.1.2 Kalibration

In der RIBER C21T III-V wird GaAs auf die in Kapitel 5 hergestellten virtuellen Ge-Substrate aufgewachsen. Sowohl die Kalibration der Wachstumsraten der Effusionszellen als auch die Kalibration der Temperatur ist für Substrate in der Größe eines Viertels eines 2-Zoll-Substrats durchgeführt worden. Das GaAs-Wachstum auf virtuellen Ge-Substraten ist ebenfalls auf Proben dieser Größe durchgeführt worden. Zur Kalibration der Effusionszellen für Ga und As_4 kann eine Druckmessröhre in den molekularen Strahl gebracht werden, um den jeweiligen Fluss von Ga und As_4 zu bestimmen. Der Fluss wird in der Literatur als BEP (engl. *beam equivalent pressure*) angegeben. Für Ga beträgt dieser bei allen Wachstumsprozessen $BEP_{Ga} = 6,6 \cdot 10^{-7} \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^2 \text{ s}}$. Da As_4 -Partialdruck variiert worden ist, wird im Folgenden das BEP-Verhältnis des Flusses von As_4 zu Ga angegeben. Es ist zwischen $10 \leq V_{BEP} \leq 50$ variiert worden. $V_{BEP} > 1$ bedeutet, dass in As_4 -reicher Atmosphäre gewachsen wird. Zusätzlich wird der in der Wachstumskammer herrschende Prozessdruck p_{GaAs} für jeden Prozess angegeben. Gewachsene Kalibrationschichten werden mit spektroskopischer Ellipsometrie hinsichtlich ihrer Dicke überprüft. Die Wachstumsrate betrug bei allen Prozessen $R_{GaAs} \approx 0,78 \frac{\mu\text{m}}{\text{h}}$. Zur Homogenität der Schichtdicke kann zum jetzigen Zeitpunkt keine Aussage gemacht werden, jedoch sind alle Proben mit Substratrotation gewachsen worden, sodass von einer vergleichbar homogenen Schichtdicke ausgegangen werden kann.

Die Substrattemperatur ist über den Wechsel der Oberflächenrekonstruktion der (001)-orientierten GaAs-Oberfläche kalibriert worden. Der Rekonstruktionswechsel von einer $c(4 \times 4)$ - zu einer (2×4) - (α -, β -, γ - Phase) zu einer (4×6) - bis hin zu einer (4×1) -rekonstruierten GaAs(001)-Oberfläche kann in Abhängigkeit des As_4 -Partialdrucks und der Substrattemperatur in einem

Bereich von $400\text{ °C} \leq T_{Sub} \leq 600\text{ °C}$ mit RHEED beobachtet werden [194]. Dabei ist zu beachten, dass der Wechsel der Oberflächenrekonstruktion reversibel auf Änderung der Temperatur und des Drucks reagiert und somit unabhängig von dem verwendeten MBE-System ist [194]. Insbesondere für die GaAs(001)- 2×4 - β -rekonstruierte Oberfläche ist eine genaue Temperatur (in As₄-reicher Atmosphäre) zur Ausbildung bekannt ($T_{Sub} \approx 550\text{ °C}$) [195]. So ist eine genaue Bestimmung der für die im Rahmen dieser Dissertation verwendeten Wachstumstemperaturen bei der GaAs-Epitaxie von $T_{Sub} \approx 600\text{ °C}$ möglich und die Genauigkeit der Temperatur mit $\pm 5\text{ °C}$ anzugeben. Da in diesem MBE-System hauptsächlich Übergitter-Strukturen (Quantum Well) für Ladungsträgerbeweglichkeiten in zweidimensionalen Elektronengasen hergestellt werden, wird eine Si-Effusionszelle zur Dotierung verwendet. Daher ergibt sich eine Hintergrunddotierung der hergestellten Proben von $c_{Si} < 3 \cdot 10^{14}\text{ cm}^{-3}$.

6.1.3 Reinigung virtueller Substrate

Da für das Wachstum von GaAs ein anderes MBE-System als für die Herstellung der virtuellen Ge-Substrate verwendet wird, kommen die virtuellen Ge-Substrate durch Lagerung und Transport mit Luft in Kontakt. Neben der Ausbildung von GeO_2 und Ge-Suboxiden (GeO_x) können die virtuellen Ge-Substrate auch von organischen und anorganischen Partikeln verunreinigt werden. Vor dem Wachstum von GaAs ist also eine Reinigung notwendig, die in diesem Kapitel basierend auf den Ergebnissen von KÄHLER [196] vorgestellt wird. Die kombinierte *HF*-Ozon-basierte Reinigung [91, 99], die für die Si-Substrate verwendet wird (siehe Kapitel 5.1.4), kann zur Reinigung virtueller Ge-Substrate nicht verwendet werden. Bei Verwendung von *HF* werden Ge-Suboxide (GeO_x ; $x < 2$) nicht vollständig entfernt und es kommt zu einer Aufrauung der Oberfläche [197]. Anstelle dieser kann eine sequentielle *HCl/H₂O₂*-Reinigung verwendet werden, die zu einer deutlich reduzierten Oberflächenrauigkeit führt [198]. Zu beachten ist dabei, dass die Oberfläche durch H_2O_2 von organischen Verschmutzungen gereinigt wird und dabei gleichzeitig GeO_2 entsteht [198]. Diese Reinigungsvariante endet also mit einer oxidierten Ge-Oberfläche, die anschließend eine in situ Präparation zur Entfernung von GeO_2 notwendig macht.

Eine zyklische *HCl/H₂O₂*-Reinigung (bei $T = 23\text{ °C}$) mit zunächst *HCl* ($c = 15\%$ für $t = 20\text{ s}$), anschließender DI-Wasserspülung (DI, deionisiertes Wasser) und abschließendem H_2O_2 ($c = 7\%$ für $t = 15\text{ s}$) nach [198, 199] führt allerdings unabhängig von der Anzahl der Zyklen (maximal 3) zu einem Ätzen der Ge-Schicht. Die Ätzrate dieser Reinigung ist an SME-hergestellten

Schritt	Konzentration	Dauer
<i>HCl</i>	15%	20 s
DI-Spülen	-	< 5 s
Ozon (UV unterstützt)	125 sccm	10 min

Tab. 6.1: Ablauf für virtuelle Ge-Substrate mit einer sequentiellen *HCl*/Ozon-Reinigung (UV-unterstützt, bei 20°C).

Ge-Schichten zu $R_{\text{Ätz}} \approx 40 \frac{\text{nm}}{\text{min}}$, unabhängig von der Anzahl der Zyklen, bestimmt worden [196]. Zunächst wird durch *HCl* das native GeO_2 entfernt, die Ätzrate des *HCl* ist dabei sehr gering und vergleichbar mit der Ätzrate von Wasser ($R_{\text{Ätz}} = 2 \frac{\text{nm}}{\text{h}}$ [200]). Allerdings wird durch *HCl* nur GeO_2 und nicht die Ge-Suboxide (GeO_x) entfernt [201]. Durch das H_2O_2 werden die Suboxide (GeO_x) zu GeO_2 oxidiert und dabei die Ge-Schicht geätzt.

Da die verwendeten virtuellen Ge-Substrate lediglich eine Ge-Schichtdicke von $d_{\text{Ge}} = 500 \text{ nm}$ aufweisen, kann die vorgestellte Reinigung mit H_2O_2 nicht verwendet werden. Als Alternative, um nach dem *HCl*-Reinigungsschritt die Ge-Oberfläche zu oxidieren, wird Ozon (UV-unterstützt) verwendet, wie es in Kapitel 5.1.4 beschrieben ist [202]. Durch die Verwendung von Ozon (UV unterstützt) wird die Ge-Schicht durch GeO_2 passiviert und nicht geätzt. Tabelle 6.1 zeigt den Ablauf zur Reinigung virtueller Ge-Substrate. Die Spülung in DI-Wasser wird durchgeführt, um Reste von *HCl* zu entfernen.

Im Gegensatz zur *HF*-Ozon-basierten Reinigung [91, 99] der Si-Substrate (siehe Kapitel 5.1.4) endet die ex situ Reinigung der virtuellen Ge-Substrate mit einer durch GeO_2 passivierten Oberfläche. Dieses GeO_2 muss nach dem Einschleusen in das zur GaAs-Epitaxie verwendete MBE-System desorbiert werden. Während der thermischen in situ Reinigung findet folgende Reaktion statt [184, 185]:



Das entstehende GeO ist oberhalb von $T = 600 \text{ }^\circ\text{C}$ instabil und desorbiert.

6.1.4 Oberflächenpräparation

Nach dem Einschleusen der virtuellen Ge-Substrate wird in situ eine thermische Präparation zur GeO_2 -Desorption durchgeführt. Die Proben werden jeweils für $t = 15 \text{ min}$ bei $T_1 = 440 \text{ }^\circ\text{C}$, $T_2 = 620 \text{ }^\circ\text{C}$ und $T_3 = 660 \text{ }^\circ\text{C}$

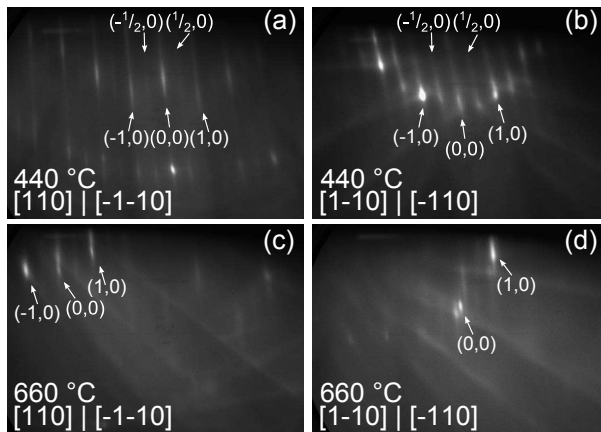


Abb. 6.1: RHEED-Aufnahmen der Oberflächenpräparation von Probe VS670F. Aufgenommen in [110]- bzw. [-1-10]-Richtung ((a) und (c)) sowie [-110]- bzw. [1-10]-Richtung ((b) und (d)). Bei $T_1 = 440 \text{ }^\circ\text{C}$ ist in beiden Richtungen eine 2x1-rekonstruierte Ge-Oberfläche zu erkennen, während bei $T_3 = 660 \text{ }^\circ\text{C}$ in [-110]- bzw. [1-10]-Richtung (d) ein Aufspalten der Hauptreflexe der 2x1-Rekonstruktion auftritt und eine Ge-Oberfläche vorliegt, die überwiegend aus doppelatomaren Stufen besteht. Exemplarisch sind die Reflexe indiziert.

direkt vor dem Wachstum präpariert. Dieses Vorgehen ist vergleichbar mit der Präparation von Ge-Substraten für die Epitaxie von GaAs [105, 116, 117]. Die Oberfläche wird dabei durch RHEED beobachtet, wie es exemplarisch in Abbildung 6.1 für ein virtuelles Ge-Substrat mit Fehlschnitt (VS670F) gezeigt ist. Während bei $T_1 = 440 \text{ }^\circ\text{C}$ in beiden Richtungen eine 2x1 rekonstruierte Ge-Oberfläche auftritt (Abbildung 6.1 (a) und (b)), die zeigt, dass das GeO_2 bereits größtenteils desorbiert ist, ist bei $T_3 = 660 \text{ }^\circ\text{C}$ ein Aufspalten der Hauptreflexe in [-110]- bzw. [1-10]-Richtung erkennbar (Abbildung 6.1 (d)). Zwar sind die 6 Nebenreflexe nur schwach zu erkennen, was der RHEED-Aufnahme bei dieser hohen Substrattemperatur geschuldet sein kann, jedoch zeigen die RHEED-Aufnahmen basierend auf den Ergebnissen aus Kapitel 5.2.4, dass eine 2x1-rekonstruierte Ge-Oberfläche mit überwiegend doppelatomaren Stufen vorliegt. Die virtuellen Ge-Substrate ohne Fehlschnitt zeigen bei beiden Temperaturen und in beiden Richtungen eine 2x1-rekonstruierte Ge-Oberfläche, bei der bereits bei $T_1 = 440 \text{ }^\circ\text{C}$ der Großteil der GeO_2 -Desorption passiert ist.

6.1.5 Wachstumsparameter für die GaAs-Epitaxie

Bis auf den As_4 -Partialdruck sind alle Wachstumsparameter für die GaAs-Epitaxie gleich. Es ist jeweils eine GaAs-Schicht mit $d_{GaAs} \approx 1 \mu\text{m}$ ($R_{GaAs} \approx 0,78 \frac{\text{mm}}{\text{h}}$) bei $T_{Mani} = 640^\circ\text{C}$ auf die virtuellen Substrate gewachsen worden. Diese Manipulatorntemperatur entspricht nach der durchgeführten Temperaturkalibration einer Substrattemperatur von $T_{Sub} \approx 600^\circ\text{C}$ (siehe Kapitel 6.1.2). Das GaAs-Wachstum ist zunächst mit dem Angebot von As_4 gestartet worden, sobald p_{GaAs} den Zielwert erreicht hat (innerhalb weniger min), ist zusätzlich Ga angeboten worden. Der As_4 -Partialdruck ist variiert worden, sodass für den Prozessdruck $2 \cdot 10^{-8} \text{ torr} < p_{GaAs} < 2 \cdot 10^{-7} \text{ torr}$ gilt. Das entspricht einem Verhältnis der BEP von $10 \leq V_{BEP} \leq 50$. Ein vergleichbares V_{BEP} wird durch dieselbe Ziffer am Ende des Probennamens kenntlich gemacht. Für die vorliegenden Wachstumsexperimente sind drei verschiedene V_{BEP} verwendet worden. Bei der ersten GaAs-Schicht konnte nicht von Beginn an ein ausreichend großer As_4 -Partialdruck erreicht werden. Erst nach etwa $t = 15 \text{ min}$ wurde ein $V_{BEP} = max.10$ erreicht. Folglich gilt für diese Probe $V_{BEP} = max.10$, $p_{GaAs} = 2,3 \cdot 10^{-8} \text{ torr}$, kenntlich gemacht mit $-G1$. Für die weiteren Wachstumsprozesse konnte das angegebene V_{BEP} von Beginn an gewährleistet werden. Es gilt für ein $V_{BEP} \approx 10$ mit $8,0 \cdot 10^{-8} \text{ torr} \leq p_{GaAs} \leq 9,5 \cdot 10^{-8} \text{ torr}$ die Kennzeichnung mit $-G2$ und für $V_{BEP} \approx 50$ mit $p_{GaAs} = 1,4 \cdot 10^{-7} \text{ torr}$ die Kennzeichnung mit $-G3$. Das Vorgehen, zunächst mit As_4 zu starten, ist an dem verwendeten MBE-System der etablierte Prozess zum Wachstum von GaAs-Schichten. Eine Einordnung der Wachstumsbedingungen ist in Kapitel 3.2.2 zu finden, da sich innerhalb der Literatur bisher kein einheitlicher Ansatz durchgesetzt hat. Tabelle 6.2 gibt einen Überblick über die hergestellten Proben. Anhand der Probenbezeichnung kann mit Verweis auf Tabelle 5.3 rückverfolgt werden, welches virtuelle Ge-Substrat zu Grunde liegt. Durch die Viertelung der 2 Zoll großen virtuellen Ge-Substrate können auf demselben Substrat mehrere Wachstumsversuche durchgeführt werden.

6.2 GaAs-Epitaxie auf virtuellen Ge-Substraten

In diesem Kapitel wird zunächst auf den Wachstumsprozess des GaAs mit Verweis auf bestehende Literatur eingegangen. Nachfolgend wird anhand der strukturellen Charakterisierung mit XRD und TEM der Einfluss des Fehlschnitts auf die Qualität der GaAs-Schichten gezeigt. Ein in der Literatur benutztes Kriterium ist das Auftreten bzw. die Unterdrückung von Antiphasengrenzen an der GaAs/Ge-Grenzfläche. Dazu wird jeweils auch die

Name	δ_{kipf}	p_{GaAs}	V_{BEP}
VS670F-G1	6,1°	$2,3 \cdot 10^{-8} \text{ torr}$	max. 10
VS670-G2	0°	$9,5 \cdot 10^{-8} \text{ torr}$	≈ 10
VS670F-G2	6,1°	$8,0 \cdot 10^{-8} \text{ torr}$	≈ 10
VS630F-G3	6,1°	$1,4 \cdot 10^{-7} \text{ torr}$	≈ 50
VS630-G3	0°	$1,4 \cdot 10^{-7} \text{ torr}$	≈ 50

Tab. 6.2: Prozessparameter der GaAs-Epitaxie auf virtuellen Ge-Substraten. Der As_4 -Partialdruck ist variiert worden, während die Wachstumstemperatur $T_{Sub} \approx 600^\circ\text{C}$ und -rate $R_{GaAs} \approx 0,78 \frac{\mu\text{m}}{\text{h}}$ bei allen Proben identisch gewesen ist. Angegeben werden der Prozessdruck in der Wachstumskammer p_{GaAs} und das Verhältnis des As_4 - zum Ga-Fluss V_{BEP} . Die GaAs-Schichten sind mit $d_{GaAs} \approx 1 \mu\text{m}$ hergestellt worden.

Nachweismöglichkeit von Antiphasengrenzen der beiden benutzten Charakterisierungsmethoden erklärt und bewertet.

6.2.1 Wachstumsprozess

Zunächst wird der Wachstumprozess selbst erklärt, um zu dem in Kapitel 3.2.2 vorgestellten Widerspruch bezüglich des Wachstumsbeginns (Ga oder As) Stellung zu nehmen. Einerseits besteht die Möglichkeit, in einer As-gesättigten Umgebung mit dem Wachstum zu beginnen [61, 115, 121, 122]. Während andererseits genauso für den Beginn des Wachstums mit Ga ([117]) gezeigt worden ist, dass antiphasengrenzenfreie GaAs-Schichten auf Ge-Substraten möglich sind. Allerdings ist gezeigt worden, dass Ga die doppel-atomare Stufung einer Ge(001)-Oberfläche für $T \geq 500^\circ\text{C}$ aufhebt [123].

Nach der thermischen Präparation wiesen die virtuellen Ge-Substrate mit Fehlschnitt in den RHEED-Aufnahmen unmittelbar vor dem GaAs-Wachstum eine schwach erkennbare Aufspaltung der Hauptreflexe in [-110]- bzw. [1-10]-Richtung auf (siehe Abbildung 6.1 (d)). Daher kann von einer überwiegend doppel-atomar gestuften Ge-Oberfläche ausgegangen werden. Nach Öffnen der As_4 -Effusionszelle ist die Aufspaltung in [-110]- bzw. [1-10]-Richtung schwächer zu erkennen (Abbildung 6.2 (a)), jedoch muss berücksichtigt werden, dass die vorliegenden Beobachtungen unter Rotation der Probe gemacht worden sind. Daher ist die Beurteilung der RHEED-Aufnahmen durch eine gewisse Bewegungsunschärfe beeinträchtigt. Mit Öffnen der Ga-Effusionszelle

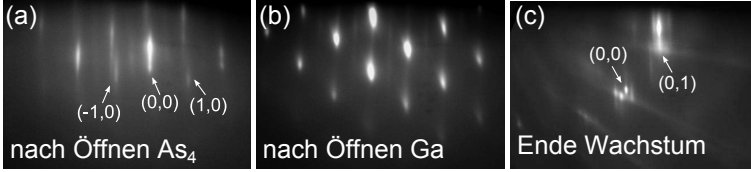


Abb. 6.2: RHEED-Aufnahmen des GaAs-Wachstums. Exemplarisch gezeigt für Probe VS630F-G3 in $[-110]$ - bzw. $[1-10]$ -Richtung. (a) Schwach erkennbare Aufspaltung der Hauptreflexe, die auf eine überwiegend doppel-atomar gestufte Oberfläche hindeutet. (b) Dreidimensionales Wachstum nach Öffnen der Ga Effusionszelle. (c) Am Ende des Wachstums bei $T_{Sub} \approx 600^\circ\text{C}$ ist eine 4×2 - α -rekonstruierte GaAs-Oberfläche zu erkennen. Exemplarisch sind die Reflexe indiziert.

setzte instantan Inselbildung ein (Abbildung 6.2 (b)). Entgegen [121, 115], die unmittelbar nach Wachstumsbeginn eine 4×2 -rekonstruierte GaAs-Oberfläche beschreiben, war für diese Wachstumsprozesse ein Auftreten von Spots (kreisförmige Verbreiterung der Reflexe) auf den RHEED-Aufnahmen zu erkennen, das zunächst auf ein dreidimensionales Wachstum hindeutete. Innerhalb weniger Minuten entwickelte sich dann eine 4×2 -Rekonstruktion (ohne Spots), die typisch für das Wachstum von GaAs unter As-reichen Bedingungen bei der verwendeten Temperatur ($T_{Sub} \approx 600^\circ\text{C}$) ist [195]. Am Ende der Wachstumsprozesse war die beschriebene 4×2 - α -Rekonstruktion (ohne Spots, Abbildung 6.2 (c)) bei allen Proben zu erkennen, sodass von einer glatten GaAs-Schicht auszugehen ist. Ein Unterschied zwischen virtuellen Ge-Substraten mit und ohne Fehlschnitt war nicht mehr zu erkennen. Beim Abkühlvorgang der Proben änderte sich die Oberflächenrekonstruktion für $T \leq 470^\circ\text{C}$ in eine $c(4 \times 4)$ -Rekonstruktion [195]. Um einen qualitativen Eindruck der GaAs-Oberfläche zu bekommen, sind im Anhang auf Seite 136 REM-Aufnahmen der gewachsenen Schichten (bei Verkippung der Probe) zu finden. Sämtliche vorliegenden Informationen zu den gewachsenen und untersuchten Proben sind im Anhang auf Seite 134 aufgeführt.

Aufgrund der vorliegenden Beobachtungen muss festgehalten werden, dass trotz Änderung des As_4 -Partialdrucks (Erhöhung von V_{BEP}) ein dreidimensionales Wachstum nach Öffnen der Ga-Effusionzelle nicht verhindert werden konnte. Obwohl Wachstumsbedingungen ($V_{BEP} \geq 10$) gewählt worden sind, die vergleichbar mit denen in der Literatur sind [61, 115, 121, 122]. Um den Einfluss des Fehlschnitts der virtuellen Ge-Substrate auf die Qualität der

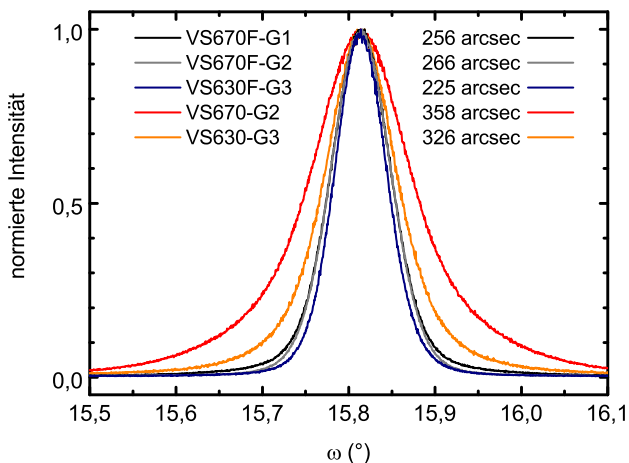


Abb. 6.3: ω -Messung um den GaAs(002)-Reflex der GaAs-Schichten auf virtuellen Ge-Substraten *ohne* (in Rot und Orange) und *mit Fehlschnitt* (in Schwarz, Grau und Blau). Für eine einheitliche Darstellung ist der Schwerpunkt der Messkurven auf den GaAs(002)-Reflex bei $\omega = 15,81^\circ$ gelegt worden, während die Intensität normiert worden ist. Die Halbwertsbreite ist anschließend aus der Annäherung der Messkurve durch eine Gauss-Funktion bestimmt worden.

GaAs-Schichten zu beurteilen, werden im Folgenden Ergebnisse der strukturellen Charakterisierung vorgestellt. Die zentrale Frage ist dabei, ob die Ausbildung von Antiphasengrenzen (siehe Kapitel 3.2.2) auch bei virtuellen Ge-Substraten durch Wahl eines geeigneten Fehlschnitts unterdrückt werden kann.

6.2.2 Strukturelle Untersuchung

Omega-Messungen Die ω -Messungen um den GaAs(002)-Reflex zeigen für die durchgeführten Wachstumsexperimente eine deutliche Verbreiterung der Messkurve bei den beiden virtuellen Ge-Substraten *ohne Fehlschnitt* (VS670-G2 und VS630-G3). Die Messkurven sind in Abbildung 6.3 dargestellt und für eine einheitliche Darstellung ist der Schwerpunkt der Messkurven auf den GaAs(002)-Reflex bei $\omega = 15,81^\circ$ gelegt worden, während die In-

tensität normiert worden ist. Die Halbwertsbreite ist anschließend aus der Annäherung der Messkurve durch eine Gauss-Funktion bestimmt worden. Die Verbreiterung der Halbwertsbreite kann nach der Theorie, beschrieben in Kapitel 4.2.2, als Hinweis auf eine erhöhte Anzahl an Defekten gesehen werden. Die entsprechenden GaAs-Schichten auf virtuellen Ge-Substraten *mit Fehlschnitt*, die bei vergleichbarem As_4 -Partialdruck gewachsen worden sind, zeigen eine um 25% (VS670F-G2 zu VS670-G2) ($V_{BEP} \approx 10$) und um 30% (VS670F-G3 zu VS670-G3) ($V_{BEP} \approx 50$) verringerte Halbwertsbreite. Bei Betrachtung der drei GaAs-Schichten auf virtuellen Ge-Substraten *mit Fehlschnitt* fällt auf, dass der As_4 -Partialdruck (V_{BEP}) keinen signifikanten Einfluss auf die vorliegende kristalline Qualität der GaAs-Schichten hat. Denn die GaAs-Schichten VS670F-G1 ($p_{GaAs} = 2,3 \cdot 10^{-8} \text{ torr}$, $V_{BEP} \approx 10$) und VS670F-G2 ($p_{As_4} = 8,0 \cdot 10^{-8} \text{ torr}$, $V_{BEP} \approx 10$) sind beide auf demselben virtuellen Ge-Substrat gewachsen worden. Sie unterscheiden sich lediglich in p_{As_4} , während des Wachstums weisen beide eine sehr ähnliche Halbwertsbreite (256 arcsec zu 266 arcsec) auf. Dass die GaAs-Schicht VS630F-G3 ($p_{GaAs} = 1,4 \cdot 10^{-7} \text{ torr}$, $V_{BEP} \approx 50$) eine etwas geringere Halbwertsbreite mit 225 arcsec aufweist, kann auch auf die deutlich geringere Oberflächenrauigkeit $R_{rms} = 1,4 \text{ nm}$ des virtuellen Ge-Substrats (verglichen mit $R_{rms} = 6,4 \text{ nm}$) zurückgeführt werden. Denn durch eine vergleichsweise glatte Oberfläche kann GaAs in besserer kristalliner Qualität aufgewachsen werden, sodass die resultierenden GaAs-Schichten defektärmer sind. Daher kann gefolgert werden, dass die gemessene Halbwertsbreite aufgrund der besseren kristallinen Qualität der GaAs-Schicht verringert ist. Deshalb zeigen die GaAs-Schichten VS630F-G3 und VS630-G3 (virtuelles Ge-Substrate mit $d \approx 500 \text{ nm}$, $R_{rms} = 1,4 \text{ nm}$) eine geringere Halbwertsbreite als die GaAs-Schichten VS670F-G1, VS670F-G2 und VS670-G2 auf den dünneren virtuellen Ge-Substraten ($d \approx 300 \text{ nm}$, $R_{rms} \geq 6,4 \text{ nm}$). Ein Einfluss der Schichtdicke der Ge-Schichten ist anhand der vorliegenden Ergebnisse nicht abzuleiten.

Um die Ergebnisse besser einordnen zu können, ist anhand der extrahierten Halbwertsbreiten die Defektdichte ausgehend von 60° -Versetzungen bestimmt worden. Diese ist in Tabelle 6.3 gezeigt und mit Formel 4.6 aus Kapitel 4.2.2 für alle Proben bestimmt worden. Da der verwendeten Formel Vereinfachungen zu Grunde liegen (siehe Anhang A auf Seite 128), müssen diese für eine Fehlerabschätzung berücksichtigt werden. So trägt der vorliegende Versetzungstyp zum Fehler bei, da anstelle von 60° -Versetzungen auch Versetzungen mit Schraubencharakter auftreten können. Es ist jedoch gezeigt worden, dass der Unterschied des Versetzungstyps für die Bestimmung der Defektdichte in GaAs(001)-orientierten Schichten einen vernachlässigbar klei-

Probe	δ_{kipf} (°)	n_d ($\cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$)	Fehler n_d ($\cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$)
VS670F-G1	6,146	2,0	$\pm 0,24$
VS670F-G2	6,146	2,1	$\pm 0,23$
VS670-G2	$\approx 0,1$	3,9	$\pm 0,43$
VS630F-G3	6,148	1,5	$\pm 0,11$
VS630-G3	0,056	3,2	$\pm 0,35$

Tab. 6.3: Defektdichte der GaAs-Schichten bestimmt aus der jeweiligen Halbwertsbreite von ω -Messungen um den GaAs(002)-Reflex, ausgehend von 60°-Versetzungen [147]. Gezeigt sind die Defektdichten der fünf hergestellten GaAs-Schichten auf virtuellen Ge-Substraten (siehe Tabelle 5.3).

nen Einfluss hat [147]. Zusätzlich ergibt sich ein Fehler ausgehend von der Ungenauigkeit der Schichtdickenbestimmung. Für alle Proben sind in REM- und TEM-Untersuchungen die Schichtdicken an Querbrüchen untersucht und der Mittelwert aller Messungen bestimmt worden. Der resultierende Gesamtfehler ist zusätzlich in Tabelle 102 angegeben und beträgt $\approx 10\%$. Solange also die Bestimmung der Defektdichten innerhalb der Probenserie konsistent ist, können die Proben untereinander verglichen werden. Dabei ergibt ein Blick auf die Defektdichten das bereits für die Halbwertsbreite diskutierte Bild: Das Wachstum von GaAs auf virtuellen Ge-Substraten mit Fehlschnitt führt zu einer defektärmeren, also qualitativ hochwertigeren Schicht. In der vorliegenden Untersuchung kann die Defektdichte um den Faktor ≈ 2 reduziert werden. Genauso ist ein Einfluss des As_4 -Partialdrucks auf die Defektdichte nicht nachzuweisen.

Die Defektdichte der virtuellen Ge-Substrate beeinflusst ebenfalls die kristalline Qualität der GaAs-Schichten. Denn Durchstoßversetzungen können sich aus der Ge-Schicht in die GaAs-Schicht fortsetzen (siehe Kapitel 103). Somit bestimmt die Defektdichte des virtuellen Ge-Substrats die Defektdichte der GaAs-Schicht mit. Mit zunehmender Schichtdicke kann die Anzahl an Defekten reduziert werden, weil die Wahrscheinlichkeit, dass sich zwei Versetzungen treffen und auslöschen, mit steigender Schichtdicke zunimmt [98]. Jedoch läuft die Erhöhung der Schichtdicke zur Reduzierung der Defektdichte dem Bestreben nach möglichst dünnen Ge-Schichten (siehe Kapitel 6) entgegen.

Für einen Vergleich der hier errechneten Defektdichten ($1,5 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2} \leq$

$n_d < 4 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$) muss beachtet werden, dass es verschiedene Methoden zur Bestimmung der Defektdichte gibt, so können Defektdichten beispielsweise durch Defektätzen [203, 204, 205] oder durch TEM-plan-view-Untersuchungen [30, 126] bestimmt werden. Außerdem wird in der Literatur größtenteils die Defektdichte mit der Anzahl an Durchstoßversetzungen gleichgesetzt, sodass ein Vergleich mit den aus der Halbwertsbreite von ω -Messungen berechneten Defektdichten mit einer großen Unsicherheit verbunden ist. Für einen quantitativen Vergleich sind in der Literatur Defektdichten von GaAs(P)-Schichten auf gradierten SiGe-Pufferschichten (auf Si-Substraten mit 6°-Fehlschnitt) von $n_d \approx 1,2 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-2}$ [30] zu finden. Verglichen mit den im Rahmen der vorliegenden Dissertation bestimmten Defektdichten, sind diese um mindestens eine Größenordnung geringer und zeigen den Raum für Verbesserungen sowohl der gewachsenen GaAs-Schichten als auch der virtuellen Ge-Substrate.

Transmissionselektronenmikroskopie Eine Möglichkeit, die strukturelle Qualität der GaAs-Schichten auf virtuellen Ge-Substraten zu beurteilen, ist die Unterdrückung von Antiphasengrenzen an der GaAs/Ge-Grenzfläche. Das Auftreten von Antiphasengrenzen (siehe Abschnitt 2.2.2) kann durch Transmissionselektronenmikroskopie wie bei [105, 116, 119, 120, 126] untersucht werden. Nachfolgend wird eine kurze Einführung gegeben, wie Antiphasengrenzen mit TEM identifiziert und charakterisiert werden können.

Durch TEM-Aufnahmen im Querschnitt unter $\vec{g} \parallel (002)$ und $\vec{g} \parallel (00 - 2)$ können im Dunkelfeldmodus Antiphasengrenzen sichtbar gemacht werden. [206]. Gezeigt ist dieses für das Wachstum von GaP auf Si [207, 208, 209] und für das Wachstum von GaAs auf Ge bzw. Si [210, 211, 212]. Auftretende Antiphasengrenzen zeigen links und rechts der jeweiligen Antiphasengrenze einen unterschiedlichen Kontrast. Wird der Kontrast nun umgekehrt, indem der \vec{g} um 180° gedreht wird, ändert sich der Kontrast links und rechts einer Antiphasengrenze jeweils mit. Für die Identifikation von Antiphasengrenzen wird jedoch zum Teil auf die Umkehr des Kontrasts verzichtet und lediglich auf den oben beschriebenen Kontrastwechsel an einer Antiphasengrenze verwiesen [57, 58, 120, 126].

Ein Maß, um Antiphasengrenzen zu charakterisieren, ist die Bestimmung ihrer Höhe h_{APB} [126]. Dabei ist die Höhe auftretender Antiphasengrenzen unabhängig von der Orientierung des TEM-Präparats (Querschnitt) zu den Stufen (parallel oder orthogonal) [126].

Alle vorliegenden GaAs-Schichten auf virtuellen Ge-Substraten werden ausschließlich mit Aufnahmen im Hellfeld- (BF, engl. *bright field*) und Dunkelfeldmodus (DF, engl. *dark field*), bei denen $\vec{g} \parallel (004)$ ist, untersucht. Da dieser

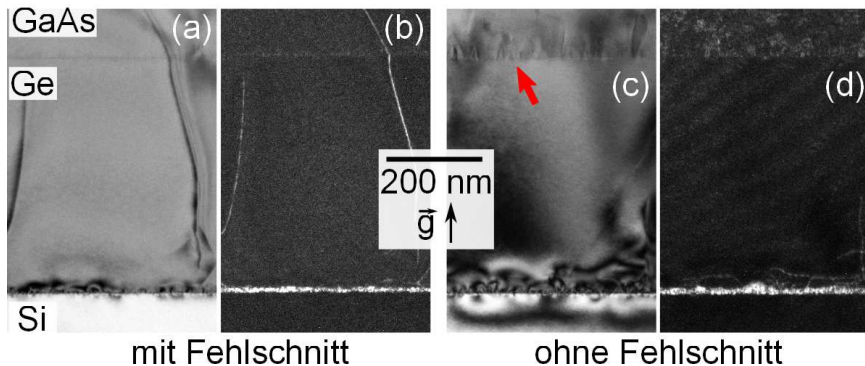


Abb. 6.4: Bildausschnitte von TEM-Querschnittsaufnahmen bei 25.000-facher Vergrößerung und $\vec{g} \parallel (004)$ der Proben VS630F-G3 und VS630-G3. (a) Aufnahme im Hellfeldmodus der Probe VS630F-G3. (b) Aufnahme im Dunkelfeldmodus unter Weak-Beam-Bedingungen der Probe VS630F-G3. (c) Aufnahme im Hellfeldmodus der Probe VS630-G3. Das Auftreten von Antiphasengrenzen ist durch einen roten Pfeil an der GaAs/Ge-Grenzfläche markiert (d) Aufnahme im Dunkelfeldmodus unter Weak-Beam-Bedingungen der Probe VS630-G3.

\vec{g} parallel zu dem oftmals in der Literatur verwendeten $\vec{g} \parallel (002)$ ist, sind die Untersuchungen vergleichbar. Die TEM-Aufnahmen im Dunkelfeldmodus sind unter Weak-Beam-Bedingungen (WBDF) erstellt worden, da für diesen Fall der durch Versetzungen hervorgerufene Kontrast besonders schmal ist [145]. Die hier gezeigten TEM-Aufnahmen sind exemplarisch ausgewählt worden, eine Übersicht der fünf gewachsenen GaAs-Schichten im Querbruch ist im Anhang auf Seite 137 zu finden.

Abbildung 6.4 zeigt exemplarisch TEM-Querschnittsaufnahmen bei 25.000-facher Vergrößerung der Proben mit Fehlschnitt (VS630F-G3) und ohne Fehlschnitt (VS630-G3). Aus den Aufnahmen im BF (Abbildung 6.4 (a) und (c)) wird deutlich, dass bei beiden Proben scharfe Grenzflächen vorliegen. Sowohl die Si/Ge-Grenzfläche als auch die GaAs/Ge-Grenzfläche sind abrupt. An der Si/Ge-Grenzfläche sind Spannungsfelder zu erkennen, die auf das entstandene Versetzungsnetzwerk aus 90° -Versetzungen zum Ausgleich der Gitterfehlpassung zwischen Si und Ge ($f = 4,2\%$) zurückzuführen sind [89]. Insbesondere durch Betrachtung der entsprechenden DF-Aufnahmen (Abbildung 6.4 (b) und (d)) an derselben Position wird das Versetzungsnetzwerk an

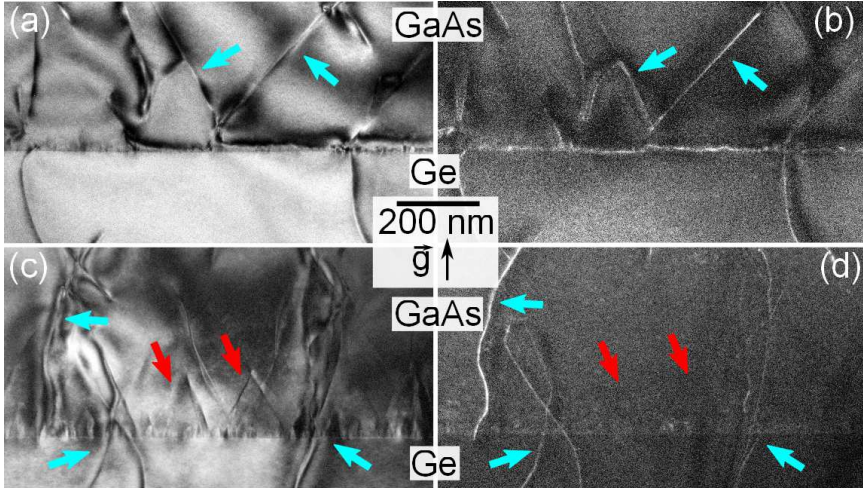


Abb. 6.5: TEM-Querschnittsaufnahmen der GaAs/Ge-Grenzfläche bei 25.000-facher Vergrößerung und $\vec{g} \parallel (004)$ (Proben VS630F-G3 (oben, mit Fehlschnitt) und VS630-G3 (unten, ohne Fehlschnitt)). (a) Aufnahme im Hellfeldmodus der Probe VS630F-G3. (b) Aufnahme im Dunkelfeldmodus unter Weak-Beam-Bedingungen der Probe VS630F-G3. (c) Aufnahme im Hellfeldmodus der Probe VS630-G3. Das Auftreten von Antiphasengrenzen ist durch einen roten Pfeil an der GaAs/Ge-Grenzfläche markiert (d) Aufnahme im Dunkelfeldmodus unter Weak-Beam-Bedingungen der Probe VS630-G3. Durch rote Pfeile sind Antiphasengrenzen markiert, türkise Pfeile markieren Versetzungen (zum Beispiel Durchstoßversetzungen).

der Si/Ge-Grenzfläche deutlich. Außerdem sind Durchstoßversetzungen zu erkennen, die an der Si/Ge-Grenzfläche entstehen und sich in die GaAs-Schicht fortsetzen (Abbildung 6.4 (a) und (b)). Das Auftreten von Antiphasengrenzen an der GaAs/Ge-Grenzfläche kann anhand dieser Aufnahmen nicht beurteilt werden. Während die Probe mit Fehlschnitt (Abbildung 6.4 (a)) keine Strukturen zeigt, sind bei der Probe ohne Fehlschnitt deutlich Strukturen an der GaAs/Ge-Grenzfläche zu erkennen, die durch Antiphasengrenzen verursacht werden können (markiert durch einen roten Pfeil in Abbildung 6.4 (c)).

Um zu klären, ob es sich bei den auftretenden Strukturen an der GaAs/Ge-Grenzfläche um Antiphasengrenzen handelt, wird in Abbildung 6.5 die GaAs/Ge-Grenzfläche (25.000-fache Vergrößerung) dieser beiden Proben

detaillierter betrachtet (VS630F-G3 und VS630-G3). Dabei zeigt Abbildung 6.5 (a) und (b) die Probe mit Fehlschnitt und Abbildung 6.5 (c) und (d) die Probe ohne Fehlschnitt. An der Probe mit Fehlschnitt sind zunächst exemplarisch Versetzungen durch türkise Pfeile markiert. Teilweise haben diese Versetzungen ihren Ursprung in der Ge-Schicht, durchstoßen diese und setzen sich in der GaAs-Schicht fort. Diese Versetzungen sind deutlicher in DF-Aufnahmen zu erkennen. Der Vergleich zur Probe ohne Fehlschnitt (Abbildung 6.5 (c) und (d)) zeigt ebenfalls Durchstoßversetzungen, die sowohl in BF- als auch in DF-Aufnahmen zu sehen sind (türkise Pfeile).

Jedoch werden bei der Aufnahme im BF Strukturen deutlich, die auf Antiphasengrenzen zurückzuführen sind. Bei diesen wird die oben beschriebene Kontraständerung links und rechts der entsprechenden Antiphasengrenze deutlich. Die exemplarisch mit roten Pfeilen markierten Antiphasengrenzen verlaufen in $\{111\}$ -Ebenen. Wegen der Änderung der Bindungslänge von Ga-As- zu Ga-Ga- und As-As-Bindungen wird das Kristallgitter lokal gestört und elastische Verspannung entsteht [104], wodurch Antiphasengrenzen in den TEM-Aufnahmen eine Kontraständerung hervorrufen. Die hier gezeigten Antiphasengrenzen weisen eine Kontraständerung links und rechts der Antiphasengrenze auf. Zusätzlich ist erkennbar, dass neben Antiphasengrenzen mit $h_{APB} \approx 50 \text{ nm}$ an der Grenzfläche viele deutlich kleinere und folglich nur schwach erkennbare Antiphasengrenzen zu finden sind. Antiphasengrenzen, die in $\{110\}$ -Ebenen verlaufen, sind an dieser Stelle nicht zu finden, obwohl dieser Typ von Antiphasengrenzen energetisch am günstigsten ist und daher bevorzugt ausgebildet wird [56]. Antiphasengrenzen, die zunächst in $\{110\}$ -Ebenen verlaufen und dann in $\{112\}$ -oder $\{113\}$ -Ebenen abknicken und weiterlaufen, sind bei diesem Bild ebenfalls nicht gefunden worden.

Die beschriebene Kontraständerung links und rechts einer Antiphasengrenze wird in Abbildung 6.6 bei 100.000-facher Vergrößerung im BF besonders deutlich. Die Probe VS630F-G3 (mit Fehlschnitt) (Abbildung 6.6 (a)) zeigt neben einer aus der Ge-Schicht kommenden Durchstoßversetzung (türkiser Pfeil) noch Antiphasengrenzen, die in $\{110\}$ -Ebenen verlaufen. Diese Antiphasengrenzen sind die einzigen, die in allen TEM-Aufnahmen der Probe VS630F-G3 (mit Fehlschnitt) zu finden waren. Da die Antiphasengrenzen in einer $\{110\}$ -Ebene verlaufen, können sie sich nicht selber auslöschen, jedoch enden sie hier an der Durchstoßversetzung, die aus der Ge-Schicht kommt. Die Probe VS630-G3 (ohne Fehlschnitt) in Abbildung 6.6 (b) zeigt hingegen deutlich erkennbare Antiphasengrenzen an der Grenzfläche. Diese verlaufen in $\{111\}$ -Ebenen und weisen die beschriebene Kontraständerung von hell zu dunkel auf. Exemplarisch sind diese mit einem roten Pfeil markiert, durch den Verlauf in $\{111\}$ -Ebenen treffen sich diese.

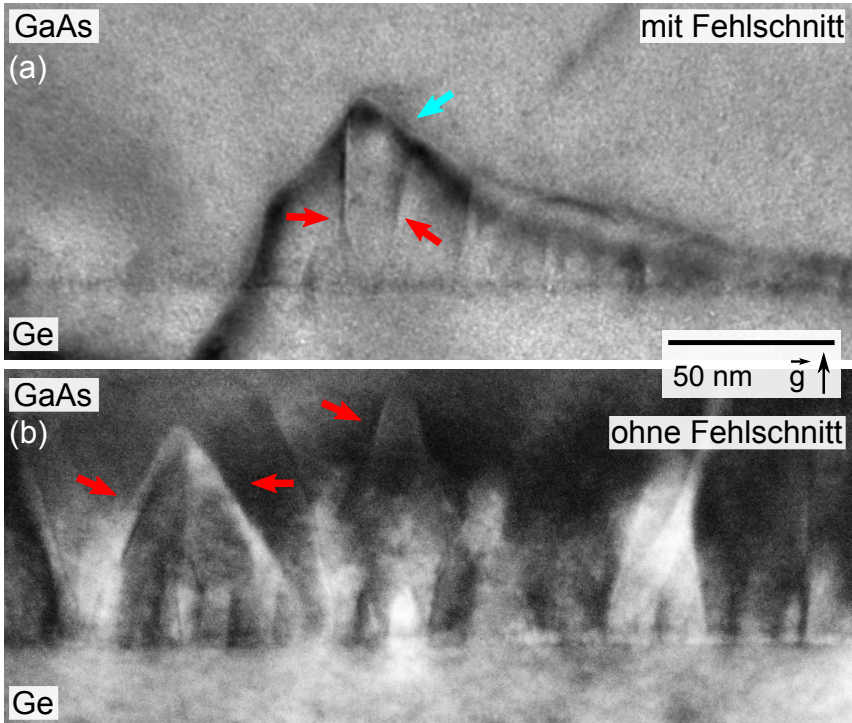


Abb. 6.6: TEM-Querschnittsaufnahmen der GaAs/Ge-Grenzfläche bei 100.000-facher Vergrößerung im Hellfeldmodus und $\vec{g} \parallel (004)$. (a) Probe VS630F-G3 (mit Fehlschnitt). Der türkise Pfeil kennzeichnet eine aus der Ge-Schicht kommende Durchstoßversetzung. (b) Probe VS630-G3 (ohne Fehlschnitt). Durch rote Pfeile sind Antiphasengrenzen markiert.

Die TEM-Aufnahmen der untersuchten GaAs-Schichten weisen überwiegend Antiphasengrenzen auf, die in $\{111\}$ -Ebenen verlaufen. Antiphasengrenzen, die in $\{110\}$ -Ebenen bis zur Grenzfläche laufen, sind nicht gefunden worden, können aber aufgrund der limitierten Statistik vom TEM-Untersuchungen nicht ausgeschlossen werden. Wie exemplarisch gezeigt worden ist (Abbildung 6.6 (b)), können sich zwei Antiphasengrenzen treffen und gegenseitig auslöschen [56, 57, 58, 59]. RUBEL [56] stellt für die verschiedenen Ebenen, in denen Antiphasengrenzen in GaAs verlaufen können, rein theoretische Bildungsenergien vor. Demnach ist die Ausbildung von Antiphasengrenzen, die in $\{110\}$ -Ebenen verlaufen ($E = 28 \frac{meV}{\text{\AA}^2}$), energetisch günstiger als der Typ, bei dem Antiphasengrenzen in $\{111\}$ -Ebenen ($E = 43 \frac{meV}{\text{\AA}^2}$) verlaufen. Die Ausbildungsenergie in $\{112\}$ - bzw. in $\{113\}$ -Ebenen mit jeweils ($E = 39 \frac{meV}{\text{\AA}^2}$) ist unwesentlich kleiner als die von $\{111\}$ -Ebenen. Die Bildungsenergien von RUBEL [56] widersprechen nicht nur den hier gezeigten Ergebnissen, dass Antiphasengrenzen vorwiegend in $\{111\}$ -Ebenen verlaufen. Sondern sie widersprechen auch der Literatur, in der für vergleichbare Untersuchungen ebenfalls hauptsächlich sich auslöschende Antiphasengrenzen (in $\{111\}$ -Ebenen verlaufend) gezeigt werden [57, 58, 120, 126]. Aufgrund dieser Tatsache können die theoretischen Bildungsenergien von RUBEL [56] lediglich ein Anhaltspunkt für die Ausbildung von Antiphasengrenzen sein.

Die GaAs-Schichten, die auf virtuellen Ge-Substraten mit Fehlschnitt gewachsen worden sind, weisen bis auf Probe VS670F-G1 nur vereinzelt Antiphasengrenzen auf. Zwar ist die Statistik durch TEM-Untersuchungen stark limitiert, jedoch wird bei dem Vergleich der GaAs-Schichten auf dem virtuellen Ge-Substrat VS670F der Unterschied deutlich. In Abbildung 6.7 werden die Proben VS670F-G1 und VS670F-G2 gezeigt, die sich nur in dem gewählten As_4 -Partialdruck unterscheiden. Während bei Probe VS670F-G1 (Abbildung 6.7 (a)) V_{BEP} erst während der ersten $t = 15 \text{ min}$ Prozesszeit auf $V_{BEP \text{ max.}10}$ anstieg, betrug bei Probe VS670F-G2 (Abbildung 6.7 (b)) V_{BEP} von Beginn an $V_{BEP} \approx 10$ ($p_{GaAs} = 8 \cdot 10^8 \text{ torr}$). Beide Proben unterscheiden sich nicht nur in dem Auftreten von Antiphasengrenzen an der GaAs/Ge-Grenzfläche, sondern weisen auch eine unterschiedliche Ge-Schichtdicke auf. Während Probe VS670F-G1 eine wellige GaAs/Ge-Grenzfläche mit $d_{Ge} \approx 200 \text{ nm}$ aufweist, zeigt Probe VS670F-G2 (Abbildung 6.7 (b)) eine glatte GaAs/Ge-Grenzfläche und eine Ge-Schichtdicke von $d_{Ge} \approx 300 \text{ nm}$. Dieser Dickenunterschied der Ge-Schicht kann nicht durch den Wachstumsprozess der Ge-Schicht selbst erklärt werden, da es sich um dasselbe virtuelle Ge-Substrat handelt. Es ist auf einem 2"-Substrat hergestellt worden und anschließend geviertelt worden, sodass beide GaAs-Wachstumsprozesse auf demselben virtuellen Ge-Substrat durchgeführt wor-

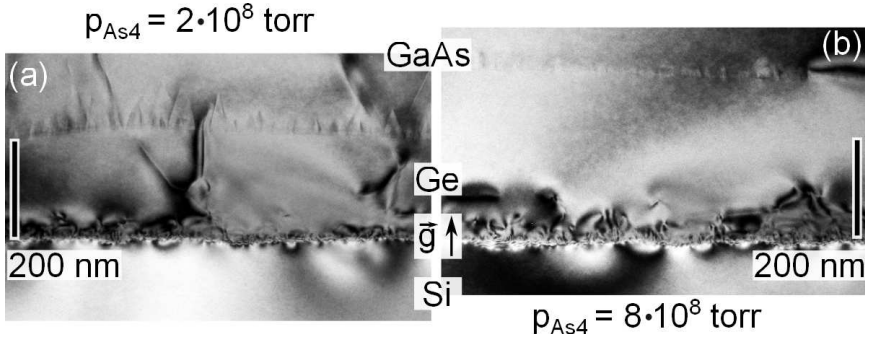


Abb. 6.7: TEM-Querschnittsaufnahmen im Hellfeldmodus der Proben VS670F-G1 und VS670F-G2 bei 25.000-facher Vergrößerung und $\vec{g} \parallel (004)$. Beiden Proben liegt dasselbe virtuelle Ge-Substrat VS670F zu Grunde. (a) Bei Probe VS670F-G1 ist GaAs mit einem variierenden V_{BEP} (zu Beginn $p_{GaAs} = 2 \cdot 10^8 \text{ torr}$) gewachsen worden. (b) Bei Probe VS670F-G2 ist GaAs mit einem $V_{BEP} \approx 10$ ($p_{GaAs} = 8 \cdot 10^8 \text{ torr}$) gewachsen worden.

den sind. Eine Erklärungsmöglichkeit, die das Auftreten von Antiphasengrenzen und die abweichende Ge-Schichtdicke d_{Ge} erklären kann, ist das Ätzen von Ge durch Ga. Dadurch, dass der As_4 -Partialdruck zu Wachstumsbeginn zu gering ist, kann mit Öffnen der Ga-Blende ankommendes Ga nicht in ausreichendem Maße an As gebunden werden. Es bilden sich Ga-Tropfen auf der Ge-Oberfläche, die aufgrund der Löslichkeit von Ge in Ga die Ge-Schicht ätzen [213]. Es ist bekannt, dass lokales Ätzen mit Ga-Tropfen auf Si benutzt wird, um Strukturen im Nanometerbereich zu erzeugen (zum Beispiel Löcher [214, 215] und Nanodrähte [216]). Für Ga-Tropfen auf einer Ge(111)-orientierten Oberfläche ist gezeigt worden, dass oberhalb von $T \geq 302^\circ\text{C}$ gleichzeitig Segregation von Ge in Ga und umgekehrt auftritt [213].

Das Auftreten von Antiphasengrenzen bei einem virtuellen Ge-Substrat mit Fehlschnitt (VS670F-G1) zeigt, dass der As_4 -Partialdruck (V_{BEP}) einen Einfluss auf die Ausbildung von Antiphasengrenzen hat. In den vorliegenden Untersuchungen können nahezu vollständig antiphasengrenzenfreie GaAs-Schichten auf virtuellen Ge-Substraten ab $V_{BEP} \approx 10$ ($p_{GaAs} \geq 8 \cdot 10^8 \text{ torr}$) gewachsen werden.

Bewertung der strukturellen Charakterisierung Um die gewachsenen GaAs-Schichten zu bewerten, sind die auftretenden Antiphasengrenzen hinsichtlich ihrer Höhe h_{APB} charakterisiert worden (analog zu [126]). Abbildung 6.8 zeigt die Auswertung der Höhe in einem Boxplot aus den zu allen Proben vorliegenden TEM-Aufnahmen im Querschnitt, die Messgenauigkeit beträgt dabei maximal 2 nm. Die Anzahl der ausgewerteten Antiphasengrenzen ist zusätzlich angegeben. Dabei ist zu beachten, dass die Antiphasengrenzen vorwiegend in $\{111\}$ -Ebenen verlaufen und somit jeder Messpunkt n aus zwei sich treffenden Antiphasengrenzen besteht. Im Boxplot wird in der Box selber neben dem Mittelwert (quadratisches Symbol) und dem Median (horizontale Linie in der Box) angegeben, in welchem Bereich 50% der erhobenen Daten liegen, sie wird also durch das obere und das untere Quartil begrenzt. Die Länge der Box ist dabei der Interquartilsabstand. Die Whisker stellen außerhalb der Box liegende Werte mit einem 1,5-fachen Interquartilsabstand dar. Werte, die außerhalb dieses Bereiches liegen, werden als Ausreißer bezeichnet. An der Auswertung der vorliegenden Höhen der Antiphasengrenzen h_{APB} kann der Einfluss des Fehlschnitts deutlich abgelesen werden. Für alle Proben ist die Grenzfläche auf mindestens 4 μm Länge untersucht worden. Die beiden GaAs-Schichten auf virtuellen Ge-Substraten mit Fehlschnitt haben in der TEM-Auswertung kaum Antiphasengrenzen gezeigt, daher ist der Interquartilsabstand der jeweiligen Box auch auf wenige nm beschränkt. Diese beiden Proben (VS670F-G2 (grau, $V_{BEP} \approx 10$) und VS630F-G3 (blau, $V_{BEP} \approx 50$)) sind bei einem höheren As_4 -Partialdruck gewachsen worden. Die beiden Referenzproben, die bei entsprechenden Wachstumsbedingungen auf virtuellen Ge-Substraten ohne Fehlschnitt hergestellt worden sind (VS670-G2 (rot) und VS630-G3 (orange)) zeigen beide deutlich Antiphasengrenzen. Die durchschnittliche Höhe beträgt für Erstere $h_{APB} \approx 59 \text{ nm}$ und für Zweitere $h_{APB} \approx 52 \text{ nm}$, allerdings sind bei beiden Proben Ausreißer mit Höhen der auftretenden Antiphasengrenzen von bis zu $h_{APB} \approx 200 \text{ nm}$ zu finden.

Der Vergleich der Proben mit denselben Wachstumsbedingungen (-G2 und -G3) unterstützt somit die Ergebnisse der Charakterisierung der GaAs-Schichten durch ω -Messungen. Durch die Wahl eines virtuellen Ge-Substrats mit Fehlschnitt kann die Ausbildung von Antiphasengrenzen an der GaAs/Ge-Grenzfläche weitestgehend unterdrückt werden. In Probe VS630F-G3 (blau), gewachsen bei $V_{BEP} \approx 50$, konnte lediglich eine einzige Antiphasengrenze in allen untersuchten TEM-Aufnahmen gefunden werden.

Allerdings gibt es einen deutlichen Unterschied zu den Ergebnissen der ω -Messungen. Bei diesen zeigten die GaAs-Schichten auf Substraten mit Fehlschnitt (VS670F-G1 (schwarz), VS670F-G2 (grau) und VS630F-G3 (blau))

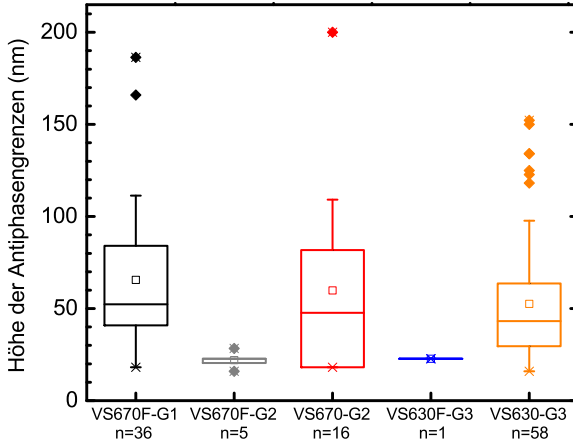


Abb. 6.8: Statistische Auswertung der TEM-Aufnahmen im Querschnitt. Boxplot der ausgewerteten Antiphasengrenzen in der GaAs-Schicht hinsichtlich ihrer Höhe. GaAs auf virtuellen Substraten mit Fehlschnitt in Schwarz, Grau und Blau dargestellt, auf Substraten ohne Fehlschnitt in Rot und Orange dargestellt. Im Boxplot wird in der Box selber neben dem Mittelwert (quadratisches Symbol) und dem Median (horizontale Linie in der Box) angegeben, in welchem Bereich 50% der erhobenen Daten liegen, sie wird also durch das obere und das untere Quartil begrenzt. Die Länge der Box ist dabei der Interquartilsabstand. Die Whisker stellen außerhalb der Box liegende Werte mit einem 1,5-fachen Interquartilsabstand dar. Werte, die außerhalb dieses Bereiches liegen, werden als Ausreißer bezeichnet. Unter dem Probennamen ist die Anzahl der ausgewerteten Antiphasengrenzen zusätzlich angegeben. Dabei ist zu beachten, dass die Antiphasengrenzen vorwiegend in $\{111\}$ -Ebenen verlaufen und somit jeder Messpunkt n aus zwei sich treffenden Antiphasengrenzen besteht.

eine vergleichbare Halbwertsbreite der ω -Messungen und dementsprechend auch der Defektdichte. Die Probe VS630F-G3 (blau) wies dabei die geringste Defektdichte mit $n_d = 1,5 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$ auf, jedoch war kein Einfluss des unterschiedlichen As_4 -Partialdrucks (V_{BEP}) zu erkennen. Die Auswertung der TEM-Aufnahmen im Querschnitt zeigt nun einen deutlichen Einfluss des As_4 -Partialdrucks (V_{BEP}) auf die Ausbildung von Antiphasengrenzen. Die beiden GaAs-Schichten auf virtuellen Ge-Substraten mit Fehlschnitt, die bei einem höheren As_4 -Partialdruck ($V_{BEP} \geq 10$, $p_{GaAs} \geq 8 \cdot 10^8 \text{ torr}$) gewachsen worden sind (VS670F-G2 (grau) und VS630F-G3 (blau)), weisen kaum Antiphasengrenzen auf. Dahingegen zeigt die GaAs-Schicht mit geringerem As_4 -Partialdruck ($V_{BEP} < 10$) ein deutliches Auftreten mit einer durchschnittlichen Höhe von $h_{APB} \approx 65 \text{ nm}$. Der „scheinbare“ Widerspruch zwischen den Ergebnissen der beiden Methoden (ω -Messungen und TEM) kann durch die Unterschiede in der Messmethodik erklärt werden. Dieser lässt den Schluss zu, dass die Charakterisierung der GaAs-Schichten mit XRD (durch ω -Messungen) keine Aussage über die GaAs/Ge-Grenzfläche und das Auftreten von Antiphasengrenzen zulässt. Antiphasengrenzen führen folglich nicht zu einem signifikanten Beitrag der Halbwertsbreite (l_{kipp}^2 und l_{zerr}^2), was auf ihren Einfluss auf das Gitter zurückgeführt werden kann. Während Defekte wie 60° - und 90° -Versetzung Burgersvektoren mit einer Länge von $b_{60^\circ} \approx 0,4 \text{ nm}$ (bezogen auf GaAs(001)-orientierte Schichten) aufweisen, beträgt die Variation der Bindungslänge in einer Antiphasengrenze, in der statt Ga-As-Bindungen Ga-Ga- und As-As-Bindungen auftreten, nur $\approx 0,01 \text{ nm}^{20}$ [207]. Dadurch wird das Kristallgitter lokal gestört und eine elastische Verspannung entsteht, die in TEM-Aufnahmen sichtbar ist [104, 207]. Im Gegensatz zu einem Defekt, der weitreichende Spannungsfelder erzeugt, ist die Änderung der Bindungslänge in einer Antiphasengrenze und die daraus resultierende Gitterverzerrung l_{zerr} zu gering, um mit XRD nachgewiesen zu werden. Dadurch, dass sich Antiphasengrenzen, die in $\{111\}$ -, $\{112\}$ - und $\{113\}$ -Ebenen verlaufen, auslösch können [56, 57, 58, 59], sind diese auch größtenteils auf den Grenzflächenbereich beschränkt. In den untersuchten GaAs-Schichten traten überwiegend Antiphasengrenzen auf, die sich bereits nach $d \approx 100 \text{ nm}$ ausgelöscht haben und somit keinen Einfluss mehr auf den Rest der GaAs-Schicht hatten. In der Literatur finden sich vergleichbare Untersuchungen, die ebenfalls hauptsächlich sich auslöschende Antiphasengrenzen (in $\{111\}$ -Ebenen verlaufend) zeigen [57, 58, 120, 126].

²⁰Die kovalenten Bindungsradii von Ga und As sind $r_{Ga} = 0,126 \text{ nm}$ und $r_{As} = 0,117 \text{ nm}$ [207].

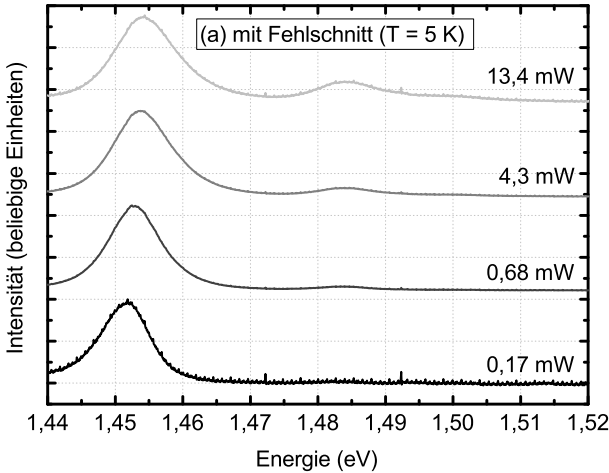


Abb. 6.9: Photolumineszenz-Spektren der Probe VS630F-G3 (mit Fehlschnitt) bei $T = 5\text{ K}$. Dargestellt sind die Spektren für verschiedene Leistungen mit einem Versatz in der Intensitätsachse.

6.2.3 Photolumineszenz-Spektroskopie

Die GaAs-Schichten auf den virtuellen Ge-Substraten VS630F und VS630 sind durch Photolumineszenz-Spektroskopie verglichen worden. Während die strukturelle Charakterisierung bei Probe VS630F-G3 (mit Fehlschnitt) die geringste Halbwertsbreite aller untersuchten Proben gezeigt hat und nur eine Antiphasengrenze identifiziert werden konnte, ist VS630-G3 die Referenzprobe (ohne Fehlschnitt) dazu. Bei dieser konnten Antiphasengrenzen an der GaAs/Ge-Grenzfläche identifiziert werden.

Die PL-Untersuchung ist mit einer Anregungswellenlänge von $\lambda = 780\text{ nm}$ durchgeführt worden. Dabei sind für beide Proben leistungsabhängige Spektren bei $T = 5\text{ K}$ aufgenommen worden. Die gezeigten Spektren sind intensitätsnormiert und der Messhintergrund ist abgezogen worden. In Abbildung 6.9 (VS630F-G3, mit Fehlschnitt) und Abbildung 6.10 (VS630-G3, ohne Fehlschnitt) werden die integrierten Intensitäten für vergleichbare Leistungen gezeigt. Zur besseren Darstellung sind die Spektren bei verschiedener Leistung mit einem Y-Versatz dargestellt. Zu beachten ist, dass zwar die normierten Intensitäten gezeigt werden, jedoch das Signal der Probe mit Fehlschnitt

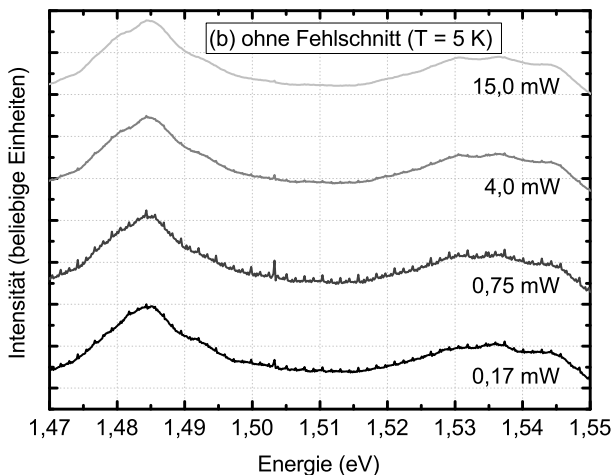


Abb. 6.10: Photolumineszenz-Spektren der Probe VS630-G3 (ohne Fehlschnitt) bei $T = 5\text{ K}$. Dargestellt sind die Spektren für verschiedene Leistungen mit einem Versatz in der Intensitätsachse.

um mindestens Faktor ≥ 10 größer als das der Probe ohne Fehlschnitt war. Die geringere Gesamtintensität bei der Probe ohne Fehlschnitt kann auf das Auftreten von Antiphasengrenzen zurückgeführt werden. Denn die in den Antiphasengrenzen auftretenden Ga-Ga- und As-As-Bindungen sind elektrisch aktive Defekte, die zu nichtstrahlender Rekombination führen [26, 101].

In beiden untersuchten Proben ist ein Intensitätsmaximum bei Energien $E < 1,5\text{ eV}$ deutlich zu erkennen. Die Intensitätsmaxima der beiden Proben sind jeweils durch eine Gauss-Funktion angenähert und hinsichtlich ihres Schwerpunkts x_c und der Halbwertsbreite FWHM ausgewertet worden. Der Schwerpunkt des Signals der Probe mit Fehlschnitt (VS630F-G3) nimmt mit steigender Leistung von $1,451\text{ eV} \leq x_c \leq 1,454\text{ eV}$ zu (blueshift²¹). Der Schwerpunkt der Probe ohne Fehlschnitt (VS630-G3) hingegen ist konstant bei $x_c = 1,485\text{ eV}$.

Die Bandlücke von GaAs bei $T = 5\text{ K}$ ($T = -268,15\text{ °C}$) beträgt $E_g = 1,51\text{ eV}$ [217]. Daher ist für GaAs von einer Absorptionskante infolge von

²¹Mit blueshift (Blauverschiebung) wird eine Verschiebung zu höheren Energien, also kürzeren Wellenlängen, bezeichnet.

Band-zu-Band-Rekombination (gebundener Exzitonen) bei $E \approx 1,519 \text{ eV}$ auszugehen [218, 219]. Die untersuchten Proben zeigen hingegen Intensitätsmaxima bei deutlich kleineren Energien. Dieses kann auf Diffusion von Ge in das GaAs zurückgeführt werden [57, 220]. Die auftretenden Intensitätsmaxima bei $x_c \approx 1,45 \text{ eV}$ (mit Fehlschnitt) bzw. $x_c = 1,485 \text{ eV}$ (ohne Fehlschnitt) sind auf den $e - Ge_{As}^0$ - (freie Elektronen zu Akzeptor) und den $Ge_{Ga}^0 - Ge_{As}^0$ - (Donator zu Akzeptor) Übergang zurückzuführen [220, 221]. In der Literatur ist dieser Übergang für GaAs-Schichten, die auf Ge-Substraten gewachsen worden sind, bei $E \approx 1,476 \text{ eV}$ gezeigt worden. Dieser Übergang entspricht einer Bindungsenergie von Ge in GaAs von $E_B = 43 \text{ meV}$ [221], bezogen auf die Absorptionskante bei $E \approx 1,519 \text{ eV}$. Die beiden hier untersuchten Proben zeigen hingegen eine abweichende Energiedifferenz zur Absorptionskante (=Bindungsenergie E_B) von $E_B \approx 65 \text{ meV}$ (mit Fehlschnitt) und $E_B = 34 \text{ meV}$ (ohne Fehlschnitt). Dass die hier bestimmten Bindungsenergien von dem in der Literatur gezeigten Wert abweichen, kann auf Verspannung der GaAs-Schichten zurückgeführt werden. Denn durch Verspannung können ebenfalls Störstellen entstehen, die die Bandstruktur und somit energetische Übergänge beeinflussen [165].

Weiterhin kann die Halbwertsbreite FWHM zur Charakterisierung der strukturellen Qualität der GaAs-Schichten herangezogen werden. Betrachtet wird weiterhin das Intensitätsmaximum bei $x_c \approx 1,45 \text{ eV}$ (mit Fehlschnitt) bzw. $x_c = 1,485 \text{ eV}$ (ohne Fehlschnitt). Die Halbwertsbreite der Probe mit Fehlschnitt (VS630F-G3) beträgt bei den gezeigten Leistungen $FWHM \approx 9 \text{ meV}$. Die Halbwertsbreite der Probe ohne Fehlschnitt (VS630-G3) beträgt bei den gezeigten Leistungen $FWHM \approx 14 \text{ meV}$. Die erhöhte Halbwertsbreite der Probe ohne Fehlschnitt ist wiederum ein Beleg für die schlechtere strukturelle Qualität infolge des Auftretens von Antiphasengrenzen. In der Literatur sind Halbwertsbreiten aus PL-Untersuchungen für diesen Übergang ($e - Ge_{As}^0$ (freie Elektronen zu Akzeptor) und $Ge_{Ga}^0 - Ge_{As}^0$ (Donator zu Akzeptor)) bei $T = 4,2 \text{ K}$ gezeigt [222]. Für GaAs-Schichten, die auf Ge-Substraten gewachsen worden sind, werden größere Halbwertsbreiten für antiphasengrenzenfreie Schichten von $FWHM \approx 15 \text{ meV}$ gezeigt [222].

In beiden Proben tritt jeweils ein weiteres Intensitätsmaximum bei $E \approx 1,485 \text{ eV}$ (mit Fehlschnitt) und $E \approx 1,535 \text{ eV}$ (ohne Fehlschnitt) auf. Allerdings ist dieses zweite Intensitätsmaximum bei der Probe mit Fehlschnitt leistungsabhängig (siehe Abbildung 6.9), während es bei der Probe ohne Fehlschnitt (siehe Abbildung 6.10) nicht leistungsabhängig ist. Dieses zweite Maximum entspricht dem energetisch nächsthöheren Übergang (beispielsweise gebundener Exzitonen [219]), der mit zunehmender Leistung angeregt wird. Dass dieser bei der Probe ohne Fehlschnitt nicht leistungsabhängig ist, kann

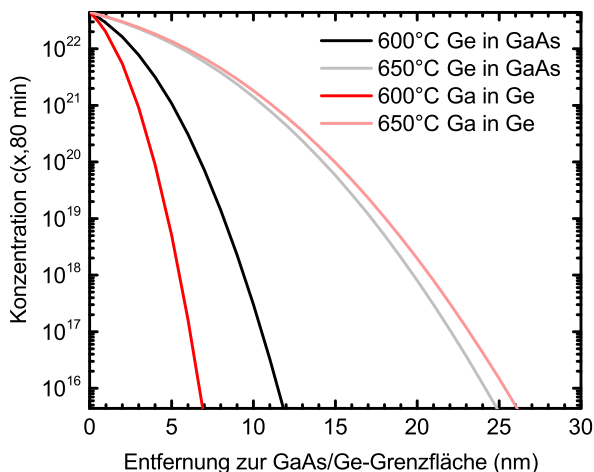


Abb. 6.11: Diffusionsprofile von Ge in GaAs (in Schwarz und Grau) und von Ga in Ge (in Rot und Hellrot) aus unerschöpflicher Quelle. Gezeigt wird der Verlauf der Konzentration c über der Entfernung zur GaAs/Ge-Grenzfläche für eine Diffusionszeit von $t = 80 \text{ min}$. Dabei sind jeweils zwei verschiedene Temperaturen angenommen worden, $T = 600^\circ\text{C}$ und $T = 650^\circ\text{C}$.

ein Zeichen für die schlechtere strukturelle Qualität der GaAs-Schicht sein. Das bedeutet, dass aufgrund der auftretenden Defekte in der GaAs-Schicht eine Vielzahl an Rekombinationspfaden existiert, sodass bevor der energetisch niedrigste Rekombinationspfad abgesättigt ist, bereits ein energetisch höherer zur Rekombination beiträgt. Dieses Ergebnis bestätigt auch die eingangs erwähnte Beobachtung, dass die Intensität der Probe mit Fehlschnitt um mindestens Faktor ≥ 10 größer gewesen ist.

Die vorliegenden PL-Untersuchungen zeigen den Einfluss des Fehlschnitts der virtuellen Ge-Substrate und unterstützen die Ergebnisse der strukturellen Charakterisierung. Die Probe mit Fehlschnitt, in der kaum Antiphasengrenzen auftreten, zeigt eine deutlich bessere strukturelle Qualität als die Probe mit Antiphasengrenzen (ohne Fehlschnitt). Folglich zeigen die PL-Untersuchungen, dass die GaAs-Schicht auf einem virtuellen Ge-Substrat mit Fehlschnitt defektärmer ist und eine höhere kristalline Qualität aufweist.

Abschätzung der Diffusion Beide untersuchten Proben zeigen eine Verschiebung der Intensitätsmaxima zu deutlich kleineren Energien als der Absorptionskante von GaAs infolge von Band-zu-Band-Rekombination (gebundener Exzitonen) bei $E \approx 1,519 \text{ eV}$ [218, 219]. Mit Verweis auf bestehende Veröffentlichungen ist dieses Verhalten auf Diffusion von Ge in das GaAs zurückgeführt worden [57, 220]. Um abzuschätzen ob dieser Effekt alleine durch Diffusion begründet werden kann, wird die Diffusion von Ge in GaAs und von Ga in Ge betrachtet.

Mit dem 2. Fick'schen Gesetz kann das Profil für die Konzentration von Ge in der GaAs-Schicht (c_{Ge}) und von Ga in der Ge-Schicht (c_{Ga}) abgeschätzt werden. Wenn die Ge-Schicht bzw. das Ga in der GaAs-Schicht als unerschöpfliche Quellen angenommen werden, gilt für die Konzentration im Abstand x zur Grenzfläche und der Zeit t [91]:

$$c(x, t) = c_0(1 - \operatorname{erf}(\frac{x}{\sqrt{Dt}})). \quad (6.2)$$

Im Fall einer unerschöpflichen Quelle beträgt $c_{0,Ge} = 4,4 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ und $c_{0,GaAs} = 4,42 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$. Außerdem ist erf die gaußsche Fehlerfunktion. Für die Diffusionskonstante von Ge in GaAs gilt folgende Funktion [223]

$$D(T) = 1,6 \cdot 10^{-5} e^{\frac{-2,06 \text{ eV}}{kT}} \quad (6.3)$$

im Temperaturbereich von $650^\circ\text{C} \leq T \leq 800^\circ\text{C}$. Da die Wachstumstemperatur für die GaAs-Schichten $T \approx 600^\circ\text{C}$ betrug, wird Formel 6.3 für diese Temperatur extrapoliert. Es ergeben sich folglich folgende Diffusionskonstanten für die Diffusion von Ge in GaAs: $D(600^\circ\text{C}) = 2,1 \cdot 10^{-17} \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$ und $D(650^\circ\text{C}) = 9,1 \cdot 10^{-17} \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$. Für die Diffusionskonstante von Ga in Ge gilt: $D(600^\circ\text{C}) = 7 \cdot 10^{-18} \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$ und $D(650^\circ\text{C}) = 1 \cdot 10^{-16} \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$ [224].

Wird für die Zeit t die Wachstumsdauer der GaAs-Schicht von $t = 80 \text{ min}$ festgelegt, so ergeben sich die in Abbildung 6.11 gezeigten Diffusionsprofile für Ge in GaAs (schwarze Kurve) und von Ga in Ge (rote Kurve). Für die Diffusionslängen l_D gilt:

$$l_D = \sqrt{Dt}. \quad (6.4)$$

Mit den oben angeführten Werten ergeben sich Diffusionslängen l_D für Ge in GaAs von $l_D \approx 31 \text{ nm}$ bei $T = 600^\circ\text{C}$ und $l_D \approx 66 \text{ nm}$ bei $T = 650^\circ\text{C}$. Für die Diffusion von Ga in Ge ergeben sich Diffusionslängen l_D von $l_D \approx 18 \text{ nm}$ bei $T = 600^\circ\text{C}$ und $l_D \approx 69 \text{ nm}$ bei $T = 650^\circ\text{C}$. Folglich werden durch eine Erhöhung der Temperatur auf $T = 650^\circ\text{C}$ deutlich größere Diffusionslängen ($l_D > 60 \text{ nm}$) erreicht. Da allerdings das Wachstum der GaAs-Schichten bei

$T \approx 600 \text{ }^\circ\text{C}$ durchgeführt worden ist, zeigt die vorgestellte Abschätzung der Diffusion einen auf die Grenzfläche beschränkten Effekt. Bei GaAs-Schichten, die $d_{\text{GaAs}} \approx 1 \mu\text{m}$ Schichtdicke aufweisen, sollte auf die Grenzfläche beschränkte Diffusion einen vernachlässigbaren Einfluss auf die strukturelle Qualität der GaAs-Schicht haben. Somit kann abschließend zwar der in den PL-Untersuchungen gesehene Effekt durch bestehende Veröffentlichungen [57, 220, 221] erklärt werden. Jedoch zeigt die Abschätzung der Diffusion, dass weitere Untersuchungen durchgeführt werden müssen, um die Konzentration von Ge in der GaAs-Schicht zu bestimmen. Denkbar sind dabei SIMS-Untersuchungen um ein Tiefenprofil der gesamten GaAs-Schicht anzufertigen. Außerdem muss eine eingehende Betrachtung die PL-Untersuchungen mit einschließen und die Empfindlichkeit der Methode auf Grenzflächen-Effekte diskutiert werden. Dabei muss dann der Einfluss von Defekten auf die Interdiffusion von Ga in die Ge-Schicht bzw. von Ge in die GaAs-Schicht berücksichtigt werden.

In der Literatur ist gezeigt worden, dass durch die Wahl einer ausreichend geringen Wachstumstemperatur zu Beginn des GaAs-Wachstums, die Diffusion vernachlässigbar ist [124]. Nach dem Beginn des Wachstums, bei vergleichsweise tiefen Temperaturen ($T \approx 300 \text{ }^\circ\text{C}$), wird das eigentliche Wachstum bei für GaAs üblichen Temperaturen von $T \approx 620 \text{ }^\circ\text{C}$ durchgeführt, ohne dass eine signifikante Diffusion²² auftritt [124]. Da in den hier durchgeführten Wachstumsprozessen die Temperatur von Beginn an $T \approx 600 \text{ }^\circ\text{C}$ betrug, kann nicht ausgeschlossen werden, dass gerade zu Beginn des Wachstums Diffusion aufgetreten ist, die über das Maß der hier durchgeführten Abschätzung hinausgeht.

²²Die untersuchten Schichten sind nach der Prozessierung mit sekundär Ionen Massenspektroskopie (SIMS) hinsichtlich der Konzentrationen von Ga, As und Ge mit folgenden die Nachweisgrenzen analysiert worden: Ga (in Ge) $1 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, As (in Ge) $3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, Ge (in GaAs) $(3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3})$ [124].

6.3 Zusammenfassung

In diesem Kapitel ist das epitaktische Wachstum von GaAs auf virtuellen Ge-Substraten mit und ohne Fehlschnitt untersucht worden. Zunächst ist die Reinigung der virtuellen Ge-Substrate, die von der HF-Ozon-basierten für Si-Substrate abweicht, vorgestellt worden. Diese umfasst eine sequentielle $HCl - UV/Ozon$ -Reinigung, die die Ge-Oberfläche nicht aufräut oder ätzt. Durch das HCl werden nur GeO_2 und nicht die Ge-Suboxide (GeO_x) entfernt, weshalb anschließend durch den $UV/Ozon$ -Schritt die Suboxide (GeO_x) zu GeO_2 oxidiert werden. Das entstandene GeO_2 wird dann in situ desorbiert. Die virtuellen Ge-Substrate ohne Fehlschnitt dienen als Referenz, um die Ausbildung von Antiphasengrenzen an der GaAs/Ge-Grenzfläche zu untersuchen. Die gewachsenen GaAs-Schichten ($d_{GaAs} \approx 1 \mu m$) sind strukturell mit XRD und TEM untersucht worden.

Aus ω -Messungen wird der Einfluss des Fehlschnitts deutlich. Die GaAs-Schichten auf virtuellen Ge-Substraten mit Fehlschnitt zeigen unabhängig vom variierten As_4 -Partialdruck alle vergleichbare Halbwertsbreiten. Gemessen wurden Werte im Bereich $225 \text{ arcsec} \leq FWHM \leq 256 \text{ arcsec}$. Diese sind $\approx 30\%$ geringer als die Halbwertsbreiten der GaAs-Schichten auf virtuellen Ge-Substraten ohne Fehlschnitt. Folglich führt das Wachstum von GaAs auf virtuellen Ge-Substraten mit Fehlschnitt zu einer defektärmeren, also qualitativ hochwertigeren Schicht. Aus diesen gemessenen Halbwertsbreiten ergeben sich Defektdichten von $1,5 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2} \leq n_d < 4 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$ für die GaAs-Schichten auf virtuellen Substraten mit Fehlschnitt. Diese Defektdichten sind um den Faktor ≈ 2 reduziert verglichen mit denen der GaAs-Schichten auf virtuellen Ge-Substraten ohne Fehlschnitt. Für einen qualitativen Vergleich sind in der Literatur Defektdichten von GaAs(P)-Schichten auf gradierten $Si_{1-x}Ge_x$ -Pufferschichten (auf Si-Substraten mit 6° -Fehlschnitt) von $n_d \approx 1,2 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-2}$ [30] zu finden. Verglichen mit den im Rahmen der vorliegenden Dissertation bestimmten Defektdichten, sind diese um mindestens eine Größenordnung geringer.

Um Antiphasengrenzen an der GaAs/Ge-Grenzfläche nachzuweisen und zu untersuchen, sind TEM-Querschnittsaufnahmen aller Proben angefertigt worden. Die GaAs-Schichten, die auf virtuellen Ge-Substraten mit Fehlschnitt gewachsen worden sind, weisen bis auf eine Ausnahme nur vereinzelt Antiphasengrenzen auf. Diese GaAs-Schicht auf einem virtuellen Ge-Substrat mit Fehlschnitt ist mit einem geringeren As_4 -Partialdruck gewachsen worden, sodass ein Einfluss des As_4 -Partialdrucks auf die Ausbildung von Antiphasengrenzen nachgewiesen worden ist. Um eine nahezu vollständig antiphasengrenzenfreie Schicht auf virtuellen Ge-Substraten mit Fehlschnitt

zu gewährleisten, muss $V_{BEP} \geq 10$ ($p_{GaAs} \geq 8 \cdot 10^8 \text{ torr}$) sein. In den untersuchten GaAs-Schichten auf virtuellen Ge-Substraten ohne Fehlschnitt traten überwiegend Antiphasengrenzen auf, die in $\{111\}$ -Ebenen verlaufen und sich nach $d \approx 100 \text{ nm}$ ausgelöscht haben. Der Vergleich der Messergebnisse zeigt, dass aus ω -Messungen kein Rückschluss auf die Ausbildung/Unterdrückung von Antiphasengrenzen gezogen werden kann. In der Probe mit dem größten verwendeten As_4 -Partialdruck ($V_{BEP} \approx 50$) konnte lediglich eine einzige Antiphasengrenze in allen untersuchten TEM-Aufnahmen gefunden werden.

Die vorliegenden PL-Untersuchungen, durchgeführt bei $T = 5 \text{ K}$, zeigen den Einfluss des Fehlschnitts der virtuellen Ge-Substrate und unterstützen die Ergebnisse der strukturellen Charakterisierung. Die Probe mit Fehlschnitt, in der kaum Antiphasengrenzen aufgetreten sind, zeigt eine deutlich bessere strukturelle Qualität als die Probe mit Antiphasengrenzen (ohne Fehlschnitt). Folglich ist die GaAs-Schicht, die auf einem virtuellen Ge-Substrat mit Fehlschnitt gewachsen worden ist, defektärmer und weist eine höhere strukturelle Qualität auf.

Es ist gezeigt worden, dass die hergestellten virtuellen Ge-Substrate mit Fehlschnitt für das Wachstum von GaAs geeignet sind. Bei ausreichend hohem As_4 -Partialdruck aufgewachsene GaAs-Schichten sind nahezu vollständig frei von Antiphasengrenzen.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Dissertation hat die monolithische Integration von GaAs auf virtuellen Ge-Substraten untersucht. Dazu sind virtuelle Ge-Substrate mit der Surfactant-modifizierten Epitaxie (SME) und der Kohlenstoff-unterstützten Epitaxie (CME) hergestellt worden. Erstmals konnten virtuelle Ge-Substrate für die Epitaxie von GaAs mit der Surfactant-modifizierten Epitaxie von Ge hergestellt werden. Mit der Kohlenstoff-unterstützten Epitaxie von Ge konnten auf verkippten Substraten strukturell vergleichbare Ge-Schichten (zur SME) hergestellt werden. Abschließend konnten jedoch keine Bedingungen gefunden werden, die durch thermische Präparation zu einer doppel-atomar gestuften Ge-Oberfläche führten. Aufgrund der vorliegenden Ergebnisse sind für das Wachstum von GaAs ausschließlich virtuelle Ge-Substrate mit einer Schichtdicke von $d_{Ge} \approx 500 \text{ nm}$ mit der SME hergestellt worden. Anschließend ist GaAs epitaktisch auf virtuellen Ge-Substraten mit und ohne Fehlschnitt aufgewachsen worden. Die Eignung der hergestellten virtuellen Ge-Substrate konnte durch die nahezu vollständige Unterdrückung von Antiphasengrenzen an der GaAs/Ge-Grenzfläche bei Verwendung von Substraten mit Fehlschnitt nachgewiesen werden.

7.1 Zusammenfassung

Für die virtuellen Ge-Substrate ist erstmals ein zweistufiger Wachstumsprozess basierend auf der SME vorgestellt worden, der hinsichtlich der Prozessparameter auf die strukturellen Eigenschaften und die Oberflächenmorphologie der Ge-Schichten optimiert worden ist. Der zweistufige Prozess gewährleistet, dass die Menge an Sb (A_{Sb}), welches nach Prozessende an der Oberfläche verbleibt, so gering wie möglich ist. Durch XPS- und SIMS-Untersuchungen konnte gezeigt werden, dass durch den zweistufigen Wachstumsprozess für die SME mit Sb die Menge an verbliebenem Sb (A_{Sb}) auf weniger als $A_{Sb} = \frac{1}{100} ML$ abgeschätzt werden kann. Nach dem zweistufigen Wachstum muss noch eine thermische Präparation zur Ausbildung der doppel-atomar gestuften Ge-Oberfläche durchgeführt werden. Zusätzlich ist mit STM-Untersuchungen gezeigt worden, dass RHEED-Aufnahmen als Nachweis einer ein-domänigen Ge-Oberfläche, die doppel-atomar gestuft ist, verwendet werden können.

Zum ersten Mal ist die die Kohlenstoff-unterstützte Epitaxie zum Wachstum vollständig relaxierter Ge-Schichten auf verkippten Si(001)-Substraten angewendet worden. Die CME erlaubt es zwar, virtuelle Ge-Substrate mit Ge-Schichtdicken $d_{Ge} \leq 50 \text{ nm}$ herzustellen, jedoch konnten keine Bedingungen gefunden werden, bei denen sich eine doppel-atomar gestufte Ge-Oberfläche

ausbildete. Für eine abschließende Beurteilung der CME bedarf es weiterer Untersuchungen zur Rolle des Kohlenstoffs bei der Ausbildung von doppelatomaren Stufen.

Um die mit der SME-hergestellten virtuellen Ge-Substrate für das Wachstum von GaAs benutzen zu können, ist zunächst eine sequentielle *HCl-UV/Ozon*-Reinigung, die die Ge-Oberfläche nicht aufräut oder ätzt, entwickelt worden. Die gewachsenen GaAs-Schichten ($d_{GaAs} \approx 1 \mu m$) sind strukturell mit XRD, TEM und PL charakterisiert worden. Die GaAs-Schichten auf virtuellen Ge-Substraten mit Fehlschnitt zeigen unabhängig vom variierten As_4 -Partialdruck alle vergleichbare Halbwertsbreiten ($225 \text{ arcsec} \leq FWHM \leq 256 \text{ arcsec}$). Diese sind $\approx 30\%$ geringer als die Halbwertsbreiten der GaAs-Schichten auf virtuellen Ge-Substraten ohne Fehlschnitt, die als Referenz, um Antiphasengrenzen an der GaAs/Ge-Grenzfläche zu untersuchen, hergestellt worden sind. Folglich führt das Wachstum von GaAs auf virtuellen Ge-Substraten mit Fehlschnitt zu einer defektärmeren, also strukturell perfekteren GaAs-Schicht. Die GaAs-Schichten auf virtuellen Substraten mit Fehlschnitt zeigen eine um den Faktor ≈ 2 reduzierte Defektdichte ($1,5 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2} n_d < 4 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$).

Um Antiphasengrenzen an der GaAs/Ge-Grenzfläche nachzuweisen und zu untersuchen, sind TEM-Querschnittsaufnahmen aller Proben angefertigt worden. Die GaAs-Schichten, die auf virtuellen Ge-Substraten mit Fehlschnitt gewachsen worden sind, weisen bis auf eine Ausnahme nur vereinzelt Antiphasengrenzen auf. Diese Ausnahme ist eine GaAs-Schicht, die mit einem geringeren As_4 -Partialdruck gewachsen worden ist. Daraus konnte ein Einfluss des As_4 -Partialdrucks auf die Ausbildung von Antiphasengrenzen nachgewiesen werden. Um eine nahezu vollständig antiphasengrenzenfreie Schicht auf virtuellen Ge-Substraten mit Fehlschnitt zu gewährleisten, muss das BEP-Verhältnis (V_{BEP}) des Flusses von As_4 zu Ga $V_{BEP} \geq 10$ ($p_{GaAs} \geq 8 \cdot 10^8 \text{ torr}$) sein. In den untersuchten GaAs-Schichten auf virtuellen Ge-Substraten ohne Fehlschnitt traten überwiegend Antiphasengrenzen auf, die in $\{111\}$ -Ebenen verlaufen und sich größtenteils nach $d \approx 100 \text{ nm}$ ausgelöscht haben. In der GaAs-Schicht (auf einem virtuellen Ge-Substrat mit Fehlschnitt) mit dem größten verwendeten As_4 -Partialdruck ($V_{BEP} \approx 50$) konnte lediglich eine einzige Antiphasengrenze in allen untersuchten TEM-Aufnahmen gefunden werden.

Die PL-Untersuchungen, die bei $T = 5 \text{ K}$ durchgeführt worden sind, zeigten ebenfalls den Einfluss des Fehlschnitts der virtuellen Ge-Substrate und unterstützen die Ergebnisse der strukturellen Charakterisierung. Die GaAs-Schicht (auf einem virtuellen Ge-Substrat mit Fehlschnitt) in der lediglich eine Antiphasengrenze gefunden werden konnte, zeigte ein deutlich höheres

Signal, als die GaAs-Schicht mit Antiphasengrenzen (auf einem virtuellen Ge-Substrat ohne Fehlschnitt). Dieser Unterschied der GaAs-Schichten auf virtuellen Ge-Substraten mit und ohne Fehlschnitt lässt den Rückschluss auf die strukturelle Perfektion der GaAs-Schichten zu. Durch Verwendung von virtuellen Ge-Substraten mit Fehlschnitt konnte GaAs defektärmer gewachsen werden und die Schichten zeigen eine höhere strukturelle Perfektion.

Die vorliegende Dissertation hat gezeigt, dass die monolithische Integration von GaAs auf Si mit virtuellen Ge-Substraten gelingen kann. Dabei konnte erstmals GaAs auf virtuelle Ge-Substrate, die mit der Surfactant-modifizierten Epitaxie hergestellt worden sind, epitaktisch aufgewachsen werden. Bei ausreichend hohem As_4 -Partialdruck aufgewachsene GaAs-Schichten auf virtuellen Ge-Substraten mit Fehlschnitt sind nahezu vollständig frei von Antiphasengrenzen.

7.2 Ausblick

Die Ergebnisse der vorliegenden Dissertation zeigen zwei grundsätzliche Angriffspunkte für weitere Untersuchungen zur monolithischen Integration von GaAs auf Si durch virtuelle Ge-Substrate. Im Folgenden wird diskutiert, wie die strukturellen Eigenschaften der virtuellen Ge-Substrate verbessert werden müssen, um den Anforderungen in einer Tandemsolarzelle gerecht zu werden. Zum anderen wird gezeigt, wie die Epitaxie von GaAs durch optimierte Wachstumsprozesse verbessert werden kann.

Um die Ge-Schichten (der virtuellen Ge-Substrate) als Tunnelübergang zwischen zwei aktiven Solarzellen (Si und GaAs(P)) zu benutzen, ist gezeigt worden, dass die Ge-Schichtdicke etwa $d_{Ge} \approx 50 \text{ nm}$ betragen sollte [8]. Denn je größer die Ge-Schichtdicke ist, desto mehr einfallendes Licht wird absorbiert und die Effizienz der gesamten Tandemsolarzelle [37] leidet. Bereits eine Ge-Schicht mit $d = 150 \text{ nm}$ würde so viel Licht absorbieren, dass der generierte Strom einer GaAs/Ge/Si-Tandemsolarzelle um 26,3%²³ reduziert wird [37]. Also ist eine möglichst dünne und vollständig relaxierte Ge-Schicht, die eine geringe Defektdichte n_d aufweist, das Ziel. Die hier erzielte strukturelle Qualität der Ge-Schichten beeinflusst ebenfalls die strukturelle Qualität der GaAs-Schichten. Denn die TEM-Ergebnisse der vorliegenden Dissertation haben gezeigt, dass sich Versetzungen aus der Ge-Schicht in die GaAs-Schicht fortsetzen. Die GaAs-Schichten weisen vergleichbare Defektdichten ($n_d \leq 4 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$) wie die virtuellen Ge-Substrate ($n_d \approx 10^8 \text{ cm}^{-2}$)

²³Dabei wird ausschließlich die Auswirkung der Absorption in der Ge-Schicht auf den Photostrom untersucht. Ausgehend von einer GaAs/Si Tandemsolarzelle, in der die Ge-Schicht als Tunnelübergang benutzt wird. [37]

auf. Zwar ist die Ladungsträgerbeweglichkeit nur schwach von der Versetzungsdichte (für Versetzungsdichten $n_d \leq 10^8 \text{ cm}^{-2}$) abhängig [23], jedoch ist die Lebensdauer der Minoritätsladungsträger sensitiv auf Kristalldefekte [25]. So sind Versetzungsdichten kleiner $n_d \leq 10^6 \text{ cm}^{-2}$ nötig, um Verluste infolge nichtstrahlender Rekombination in Solarzellen zu begrenzen [25]. Verglichen mit den vorliegenden Ergebnissen zeigt sich die Notwendigkeit zur Optimierung der Defektdichten sowohl der virtuellen Ge-Substrate als auch der GaAs-Schichten.

Die Ge-Schichten der virtuellen Ge-Substrate haben eine Schichtdicke von $d \approx 500 \text{ nm}$, was der eingangs erwähnten Forderung nach Ge-Schichten mit $d_{Ge} \approx 50 \text{ nm}$ [8] noch nicht gerecht wird. Eine Reduzierung der Schichtdicke erschwert jedoch die Reduzierung der Defektdichte. Da sich mit zunehmender Schichtdicke Versetzungen auslöschten können [98], ist eine größere Schichtdicke von Vorteil, um möglichst defektarme Ge-Schichten herzustellen.

An dieser Stelle rückt die CME wieder in den Fokus. Denn mit dieser können vollständig relaxierte Ge-Schichten auf verkippten Substraten hergestellt werden, die Schichtdicken im Bereich $d_{Ge} \approx 50 \text{ nm}$ aufweisen. Außerdem ist gezeigt worden, dass bei mehrstufigen CME-Prozessen, Versetzungen an den Ge/C-Grenzflächen enden können [99]. Gelingt es, diesen Mechanismus gezielt zu verstehen und anzuwenden, könnten Defektfilter eingebaut werden, damit die abschließende Ge-Schicht möglichst defektfrei ist. Da in der vorliegenden Dissertation keine Ge-Schichten mit CME hergestellt werden konnten, die eine doppel-atomar gestufte Ge-Oberfläche aufwiesen, müssen weitere Versuche zur Rolle des Kohlenstoffs bei der Ausbildung von doppel-atomar gestuften Ge-Oberflächen durchgeführt werden. Dafür sind XPS-Untersuchungen notwendig, mit denen eine $\frac{1}{10}$ -Monolagen genaue Bestimmung von Kohlenstoff möglich ist. Gelingt die Präparation einer doppel-atomar gestuften Oberfläche, bietet die CME die Voraussetzungen, ausreichend dünne Ge-Schichten ($d_{Ge} \approx 50 \text{ nm}$) herzustellen, sodass GaAs ohne Antiphasengrenzen aufgewachsen werden kann.

Die Unterdrückung von Antiphasengrenzen an der GaAs/Ge-Grenzfläche konnte in der vorliegenden Dissertation erreicht werden. Durch die Wahl von virtuellen Ge-Substraten mit Fehlschnitt ($\delta_{kip} \approx 6^\circ$ zur nächsten (111)-Ebene) und entsprechender thermischer Präparation einer doppel-atomar gestuften Ge-Oberfläche, konnte GaAs nahezu vollständig frei von Antiphasengrenzen aufgewachsen werden. Dieses ist entscheidend für Anwendungen der GaAs-Schichten in Solarzellen, denn Antiphasengrenzen sind elektrische aktive Defekte und somit nichtstrahlende Rekombinationszentren [24, 26]. Wie bereits eingangs erklärt sind jedoch die gezeigten Defektdichten $n_d \leq 4 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$ noch zu groß, um diese GaAs-Schichten in einer Solarzelle

zu verwenden. Für einen qualitativen Vergleich sind in der Literatur Defektdichten von GaAs(P)-Schichten auf gradierten $Si_{1-x}Ge_x$ -Pufferschichten (auf Si-Substraten mit 6° -Fehlschnitt) von $n_d \approx 1,2 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-2}$ [30] zu finden. Verglichen mit den errechneten Defektdichten der vorliegenden Dissertation, sind diese um mindestens eine Größenordnung geringer.

Außerdem kann zur Verbesserung der strukturellen Qualität für das Wachstum von GaAs die Migrations-unterstützte Epitaxie (MEE, engl. *migration enhanced epitaxy*) [25] herangezogen werden. In der Literatur ist dieses Verfahren für das Wachstum von GaAs auf (virtuellen) Ge-Substraten bereits verbreitet [105, 106, 116, 124, 125, 126]. Dieses wird in jüngeren Publikationen für das Wachstum von GaAs-Schichten in Tandemsolarzellen gezeigt [116, 126]. Bisher ist die MEE von GaAs noch nicht auf SME- oder CME-hergestellten Ge-Schichten untersucht worden.

Ein weiterer Aspekt, der untersucht werden muss, ist die Entstehung von Defekten während des Abkühlprozesses (nach dem GaAs Schichtwachstum). Durch den Unterschied der thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Si und Ge/GaAs kann tensile Spannung entstehen. Diese tensile Spannung kann zu einem Aufreißen der Schicht führen und als Nukleationszentrum für elektrisch aktive Defekte dienen [101]. Eine geeignete Kontrolle von Spannungsrelaxation und Defektbildung [225] ist deshalb unerlässlich für die Integration von III-V-Materialien auf virtuellen Ge-Substraten mit ausreichend guten strukturellen und elektronischen Eigenschaften.

Abschließend soll noch die Notwendigkeit der Verwendung von virtuellen Substraten mit einem ausreichend großen Fehlschnitt diskutiert werden. Bisher werden in der Literatur überwiegend (virtuelle) Ge-Substrate mit einem Fehlschnitt von $\delta_{kippp} \approx 6^\circ$ zur nächsten (111)-Ebene verwendet [105, 116, 117]. Zusätzlich ist gezeigt worden, dass der azimutale Fehlschnitt ϕ_{mis} nicht mehr als 26° von der [110]-Richtung abweichen darf [111, 112, 113, 114]. Durch den vergleichsweise großen Fehlschnitt bildet sich bereits bei relativ tiefen Temperaturen und kurzen Zeiten ($T \approx 640^\circ\text{C}$ für $t = 5 \text{ min}$ [105, 106, 107]) eine doppel-atomar gestufte Oberfläche aus. Aktuelle Ergebnisse in der Literatur [226] zeigen, dass unter geeigneten Bedingungen GaAs auf "quasi-unverkippten" ($\delta_{kippp} \leq 0,5^\circ$ zur nächsten (111)-Ebene) virtuellen Ge-Substraten aufgewachsen werden kann. Diese Ge-Schichten ($d_{Ge} = 1 \mu\text{m}$) sind mit CVD hergestellt²⁴ [226] worden. Die Dichte an Durchstoßversetzungen in dem Film ist mit "einige" 10^7 cm^{-2} [226] angegeben. Das GaAs kann durch

²⁴Die Ge-Schichten sind nicht mit einem gradierten $Si_{1-x}Ge_x$ -Puffer hergestellt worden. Stattdessen sind die Ge-Schichten in einem CVD-Prozess direkt auf Si gewachsen worden und durch ein zyklisches Tempervfahren ist die Dichte an Durchstoßversetzungen reduziert worden [227].

MOCVD ohne Antiphasengrenzen aufgewachsen werden, wenn die Verkipfung $\delta_{kippp} \approx 0,5^\circ$ zur nächsten (111)-Ebene beträgt. Die Unterdrückung von Antiphasengrenzen konnte durch Ausbildung einer doppel-atomar gestuften Ge-Oberfläche gewährleistet werden. Dieses Ergebnis zeigt, dass wenn die azimutale Richtung des Fehlschnitts gewährleistet wird, der Fehlschnitt selber eine geringere Bedeutung hat. Durch geeignete Wahl von Prozessen und Prozessparametern kann so unter Umständen auf große Fehlschnitte verzichtet werden. Dieses gilt ebenfalls für die direkte Integration von GaAs auf Si ohne Verwendung einer Ge-Zwischenschicht. Auf Si-Substraten, die lediglich einen Fehlschnitt von $\delta_{kippp} \leq 0,15^\circ$ (zur nächsten (111)-Ebene) aufwiesen, konnte GaAs ohne Ausbildung von Antiphasengrenzen an der GaAs/Si-Grenzfläche durch ein MOCVD-Prozess aufgewachsen werden [104].

Dass derzeit ein großes Interesse an der monolithischen Integration von GaAs auf Si besteht, kann an den jüngsten Forschungsschwerpunkten zur Integration von III-V-Bauelementen auf Si abgelesen werden. So wird nicht nur an der Integration von III-V-Materialien für Solarzellen gearbeitet, sondern auch, um optoelektronische- und hochbeweglichkeits-Bauelemente herzustellen [104, 228, 229, 230, 231, 232].



Anhang

A - Ergänzung zur Bestimmung der Defektdichte

An dieser Stelle werden die bei TETZLAFF [99] getroffenen Annahmen und Abschätzungen aufgeführt, die für den verwendeten Messaufbau zur Charakterisierung von epitaktischen Ge-Schichten um den (004)-Reflex gültig sind. Es ergibt sich aus diesen Vereinfachungen für die Versetzungsdichte n_d folgender Ausdruck [99]:

$$n_d = \frac{\iota_{mess}^2 - \frac{17090}{d_{Schicht}}}{2,2\pi \cdot \ln 2 \cdot b^2}. \quad (7.1)$$

Dazu müssen einige Annahmen bezüglich der zu untersuchenden Probe und des Messaufbaus getroffen werden, sodass sich die gemessene Halbwertsbreite wie folgt zusammensetzt [147]:

$$\iota_{mess}^2 = \iota_{intr}^2 + \iota_{mono}^2 + \iota_{kipf}^2 + \iota_{zerr}^2 + \iota_{dicke}^2 + \iota_{kr}^2. \quad (7.2)$$

Sowohl der intrinsische Beitrag der Rockingkurve (meist $\iota_{intr} \leq 10 \text{ arcsec}$ [147]) als auch der Beitrag des asymmetrischen Monochromators $\iota_{mono} = 28,8 \text{ arcsec}$ (für das verwendete D8 DISCOVER Diffraktometer von BRUKER) können vernachlässigt werden. Der Beitrag zur Krümmung der Proben kann bei den untersuchten Schichtdicken $d < 1 \mu\text{m}$ ebenfalls vernachlässigt werden, sodass gilt: $\iota_{kr} \approx 0 \text{ arcsec}$. Durch die Scherrer-Gleichung kann der schichtdickenabhängige Beitrag beschrieben werden [233]:

$$\iota_{dicke} = 2 \cdot \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \cdot \frac{\lambda}{d_{Schicht} \cos(\Theta)}. \quad (7.3)$$

Für dünne Schichten ($d_{Schicht} < 1 \mu\text{m}$), wie sie in dieser Dissertation untersucht werden, gilt die Näherung [148]:

$$\iota_{dicke} = \frac{17090}{d_{Schicht}}. \quad (7.4)$$

Außerdem werden Verbreiterungen durch die Gitterverkipfung [147]

$$\iota_{kipf}^2 = 2\pi \ln 2 \cdot b^2 n_d \quad (7.5)$$

und die Gitterverzerrung [147]

$$\iota_{zerr}^2 = A_v b^2 n_d \ln(2 \cdot 10^{-7} \text{cm} \sqrt{n_d}) \tan^2 \Theta \quad (7.6)$$

verursacht. Dabei ist b der Betrag des Burgersvektor \vec{b}^{25} und A_v ein Vorfaktor. Sowohl b als auch A_v sind vom Versetzungstyp abhängig. Da Rockingkurven um den (004)-Reflex betrachtet werden, gilt ein Verhältnis $\iota_{kipf}^2 : \iota_{zerr}^2$ von 10:1 [147, 91]. Folglich kann der Beitrag aus 7.6 vernachlässigt werden. Da der Betrag des Burgersvektors abhängig vom Versetzungstyp ist, stellt sich die Frage, für welche Versetzungen die Berechnung der Defektdichten durchgeführt worden ist. Eine genaue Analyse des vorliegenden Versetzungstyps konnte im Rahmen dieser Dissertation zwar nicht durchgeführt werden, sodass die Bestimmung der Defektdichten n_d für den Fall von ausschließlich 60° -Versetzen bzw. 90° -Versetzen ($b_{60^\circ} = b_{90^\circ}$)²⁶ [99] durchgeführt worden ist. Bei WIETLER [91] ist gezeigt worden, dass in Ge-Schichten, die mit SME gewachsen werden, typischerweise ein Versetzungsnetzwerk an der Grenzfläche bestehend auf 90° -Versetzen vorliegt. 60° -Versetzen können zwar auch identifiziert werden, weisen jedoch denselben Betrag des Burgersvektors wie 90° -Versetzen auf. Daher hat letztendlich der vorliegende Versetzungstyp nur einen schwachen Einfluss auf die Halbwertsbreite und somit auf die Defektdichte [91].

Sollen epitaktische GaAs-Schichten hinsichtlich ihrer Defektdichte charakterisiert werden, kann die hier vorgestellte Näherung ebenfalls verwendet werden. Zum einen ist der kristallographische Aufbau der Diamantstruktur und der Zinkblendestruktur identisch, beide bestehen aus zwei kubisch flächenzentrierten Subgittern (fcc), die um ein Viertel der Raumdiagonale verschoben sind. Zum anderen sind die untersuchten GaAs-Schicht alle dünner als $d_{GaAs} < 1 \mu\text{m}$, sodass die verwendete Näherung ([148]) benutzt werden kann. Für die Bestimmung der Defektdichte der GaAs-Schichten wird der GaAs(002)-Reflex [147] verwendet, da für GaAs der (002)-Reflex im Gegensatz zu Si und Ge nicht verboten²⁷ ist [145]. Mit Verweis auf die Literatur [147] wird in der vorliegenden Dissertation die Defektdichte n_d der GaAs-Schichten ausgehend von ausschließlich 60° -Versetzen bestimmt.

²⁵siehe Fußnote 6 in Kapitel 3.1.1

²⁶Für den Burgersvektor einer 60° -Versetzung gilt $\vec{b}_{60^\circ} = \frac{a}{2}[101]$ und für den Burgersvektor einer 90° -Versetzung gilt $\vec{b}_{90^\circ} = \frac{a}{2}[0\bar{1}\bar{1}]$.

²⁷siehe Fußnote 9 in Kapitel 4.2.2

B - Probenübersicht SME

Übersicht der in Kapitel 5.2 untersuchten Proben. Substrate mit Fehlschnitt sind mit einem F gekennzeichnet. Liegt der zweistufige Wachstumsprozess zu Grunde, endet die Probenkennzeichnung mit einem D, stellvertretend für die Sb-Desorption.

Name	Substrat	δ_{kipf} (°)	SME-Ge		Ge	
			T_{Pyro} (°C)	$d_{SME,Ge}$ (nm)	T_{Mani} (°C)	d_{Ge} (nm)
SME600	124-08	$\approx 0,1$	600	500	-	-
SME600FD	135-18	6,142	600	300	430	200
SME630	126-01	0,045	630	500	-	-
VS630F	135-14	6,148	630	300	430	200
SME630FD	140-15	0,04	630	300	430	200
VS630	137-20	0,056	630	300	430	200
SME670-1	124-05	$\approx 0,1$	670	500	-	-
SME670-2	124-24	$\approx 0,1$	670	500	-	-
SME670-3	132-05	0,084	670	500	-	-
SME670D-1	132-07	0,084	670	300	430	200
SME670D-2	137-25	0,056	670	300	430	200
SME670D-3	140-08	0,04	670	300	430	200
SME670F	VIC602	5,80	670	400	-	-
VS670F*	135-04	6,146	670	300	430	200
VS670*	114-18	$\approx 0,1$	670	300	430	200
SME700	124-09	$\approx 0,1$	700	500	-	-

Tab. 7.1: Probenübersicht I der in Kapitel 5.2 verwendeten Proben.

*Wachstum ohne Ratensteuerung bei konstantem Emissionsstrom. Daher sind die Angaben zur Schichtdicke Sollwerte, die tatsächliche Gesamtdicke weicht signifikant ab (bestimmt aus REM-Untersuchungen). Über das Verhältnis zwischen der Dicke der SME-Ge-Schicht und der Ge-Schicht ohne Sb-Fluss, das 3:2 betragen sollte, kann bei dieser Probe keine Aussage gemacht werden.

Fortsetzung der Übersicht der in Kapitel 5.2 untersuchten Proben.

Substrat	R_{rms} (nm)	R^{**}	FWHM (Gauss) (arcsec)	n_d (60° bzw. 90°) ($\cdot 10^8 cm^{-2}$)	d_{Gesamt} (REM) (nm)
124-08	0,6	99,9%	483	7	479
135-18	k. A.	97,8%	341	3,4	490
126-01	0,7	100,3%	377	4,2	544
135-14	1,4	98,5%	384	4,4	512
140-15	k. A.	99,9%	399	4,7	502
137-20	0,3	99,7%	445	5,9	496
124-05	1,9	100,5%	485	7	482
124-24	3,2	100,3%	449	6	524
132-05	2,8	100,1%	479	6,9	494
132-07	2,1	99,9%	509	7,8	493
137-25	k. A.	99,6%	399	4,8	548
140-08	k. A.	99,2%	457	6,3	528
VIC602	0,3	99,4%	422	7,1	400
135-04*	6,4	103,8%	720	16	344
114-18*	18	94,1%	1068	35	296
124-09	8,2	100%	513	7,9	522

Tab. 7.2: Probenübersicht II der in Kapitel 5.2 verwendeten Proben.

*Wachstum ohne Ratensteuerung bei konstantem Emissionsstrom. Daher sind die Angaben zur Schichtdicke Sollwerte, die tatsächliche Gesamtdicke weicht signifikant ab (bestimmt aus REM-Untersuchungen). Über das Verhältnis zwischen der Dicke der SME-Ge-Schicht und der Ge-Schicht ohne Sb-Fluss, das 3:2 betragen sollte, kann bei dieser Probe keine Aussage gemacht werden.

**Nach Korrektur um Verspannung infolge unterschiedlicher thermischer Ausdehnungskoeffizienten.

C - Probenübersicht CME

Übersicht der in Kapitel 5.3 untersuchten Proben.

Name	Substrat	δ_{kipf} (°)	CME-Variante	$T_{Sub,CME}$ (°C)
CME(F)50	135-11	6,147	amorph	50
CME(F)50-150	135-12	6,134	amorph	50
CME(F)80-150	135-13	6,149°	teilkristallin	80

Tab. 7.4: Probenübersicht I der in Kapitel 5.3 verwendeten Proben.

Fortsetzung der Übersicht der in Kapitel 5.3 untersuchten Proben.

Name	d_{Ge} (nm)	t_C (min)	$T_{Sub,Ge}$ (°C)	d_{Ge} (nm)	R_{rms} (nm)	R
CME(F)50	20	15	-	-	0,2	106%
CME(F)50-150	20	15	150	20	22,2	97%
CME(F)80-150	20	5	150	20	7,2	95%

Tab. 7.5: Probenübersicht II der in Kapitel 5.3 verwendeten Proben.

D - Probenübersicht GaAs

Übersicht der in Kapitel 6 untersuchten Proben. Virtuelle Ge-Substrate mit Fehlschnitt sind mit einem F gekennzeichnet.

Name	Substrat	δ_{kipf} ($^{\circ}$)	p_{GaAs} ($torr$)	V_{BEP} $\frac{As_4}{G}$
VS670F-G1	135-104_I	6,146	$2,3 \cdot 10^{-8}$	max. 10
VS670-G2	114-18_I	$\approx 0,1$	$9,5 \cdot 10^{-8}$	≈ 10
VS670F-G2	135-14_II	6,146	$8,0 \cdot 10^{-8}$	≈ 10
VS630F-G3	135-14_I	6,148	$1,4 \cdot 10^{-7}$	≈ 50
VS630-G3	137-20_I	0,056	$1,4 \cdot 10^{-7}$	≈ 50

Tab. 7.6: Probenübersicht I der in Kapitel 6 verwendeten Proben.

Fortsetzung der Übersicht der in Kapitel 6 untersuchten Proben. Virtuelle Ge-Substrate mit Fehlschnitt sind mit einem F gekennzeichnet.

Name	d_{GaAs} (REM/TEM) (nm)	FHWM (arcsec)	n_d (60° bzw. 90°) ($\cdot 10^8 cm^{-2}$)
VS670F-G1	926	256	1,96
VS670-G2	950	358	3,89
VS670F-G2	885	266	2,1
VS630F-G3	869	225	1,5
VS630-G3	876	326	3,21

Tab. 7.7: Probenübersicht II der in Kapitel 6 verwendeten Proben.

E - REM-Aufnahmen der GaAs-Schichten

REM-Aufnahmen der in Kapitel 6 untersuchten GaAs-Schichten.

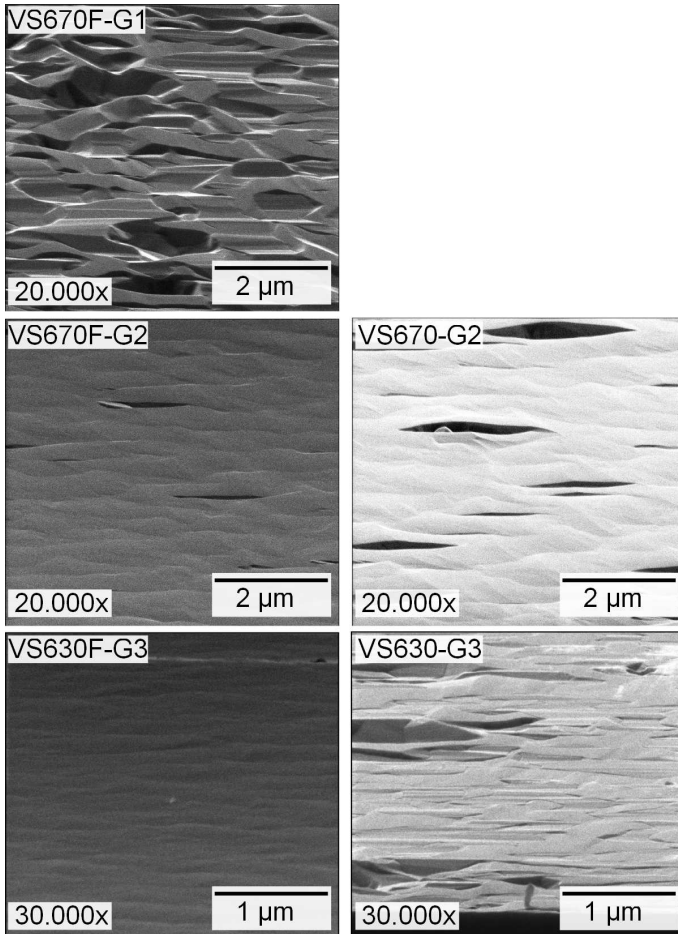


Abb. 7.1: REM-Aufnahmen der in Kapitel 6 untersuchten GaAs-Schichten.

F - TEM-Aufnahmen GaAs

Übersicht der in Kapitel 6 vorgestellten TEM-Ergebnisse.

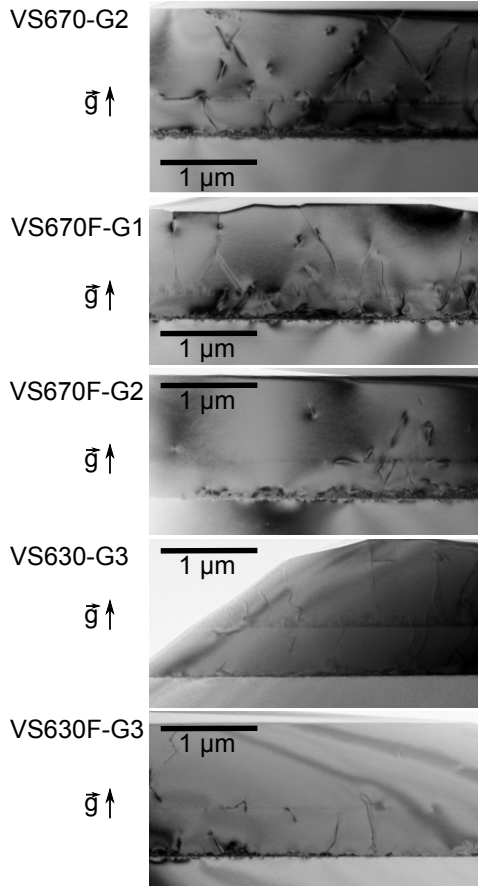


Abb. 7.2: TEM-Aufnahmen im Querschnitt der GaAs-Schichten auf virtuellen Ge-Substraten. Aufgenommen im Hellfeld-Modus mit 5000-facher Vergrößerung, $\vec{g} \parallel (004)$. Schichtaufbau von unten nach oben: Si-Ge-GaAs.

Literatur

- [1] LICHTENBERG, G. C. ; PROMIES, W.: *Sudelbücher*. München : Deutscher Taschenbuch Verlag, 2005. – ISBN 978-3-423-59075-4
- [2] BUNDESGESETZ: *Gesetz für den Ausbau erneuerbarer Energien: EEG (Fassung: 21. Juli 2104, Fundstelle 754-27)*. 2014
- [3] STROM-REPORT: *Stromerzeugung 2015 in Deutschland nach Energieträgern*: <http://strom-report.de/strom-vergleich/#stromerzeugung-2015>. 2015, zuletzt abgerufen am 29.08.2016
- [4] AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS (ASTM) TERRESTRIAL REFERENCE SPECTRA FOR PHOTOVOLTAIC PERFORMANCE EVALUATION: *Reference Solar Spectral Irradiance: Air Mass 1.5*: <http://rredc.nrel.gov/solar/spectra/am1.5/>. 2016, zuletzt abgerufen am 05.09.2016
- [5] EINSTEIN, A.: Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt. In: *Annalen der Physik* 322 (1905), Nr. 6, S. 132–148. <http://dx.doi.org/10.1002/andp.19053220607>
- [6] GREEN, M. A. ; EMERY, K. ; HISHIKAWA, Y. ; WARTA, W. ; DUNLOP, E. D.: Solar cell efficiency tables (version 47). In: *Progress in Photovoltaics: Research and Applications* 24 (2016), Nr. 1, S. 3–11. <http://dx.doi.org/10.1002/pip.2728>
- [7] SHOCKLEY, W. ; QUEISSER, H. J.: Detailed Balance Limit of Efficiency of p-n Junction Solar Cells. In: *Journal of Applied Physics* 32 (1961), Nr. 3, S. 510. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1736034>
- [8] GREEN, M. A.: Silicon wafer-based tandem cells: The ultimate photovoltaic solution? In: *Proceedings SPIE 8981, Physics, Simulation, and Photonic Engineering of Photovoltaic Devices* (2014), S. 89810L. <http://dx.doi.org/10.1117/12.2044175>
- [9] RAMANUJAM, J. ; VERMA, A. ; GONZÁLEZ-DÍAZ, B. ; GUERRERO-LEMUS, R. ; DEL CAÑIZO, C. ; GARCÍA-TABARÉS, E. ; REY-STOLLE, I. ; GRANER, F. ; KORTE, L. ; TUCCI, M. ; RATH, J. ; SINGH, U. P. ; TODOROV, T. ; GUNAWAN, O. ; RUBIO, S. ; PLAZA, J. L. ; DIÉGUEZ, E. ; HOFFMANN, B. ; CHRISTIANSEN, S. ; CIRLIN, G. E.: Inorganic photovoltaics – Planar and nanostructured

- devices. In: *Progress in Materials Science* 82 (2016), S. 294–404. <http://dx.doi.org/10.1016/j.pmatsci.2016.03.005>
- [10] ITRPV: *International Technology Roadmap for Photovoltaic (7. Edition)*: <http://itrpv.net/>. März 2016, zuletzt abgerufen am 29.08.2016
- [11] NIEPELT, R. ; HENSEN, J. ; STECKENREITER, V. ; BRENDDEL, R. ; KAJARI-SCHÖDER, S.: Kerfless exfoliated thin crystalline Si wafers with Al metallization layers for solar cells. In: *Journal of Materials Research* 30 (2015), Nr. 21, S. 3227–3240. <http://dx.doi.org/10.1557/jmr.2015.309>
- [12] BURSCHKA, J. ; PELLET, N. ; MOON, S.-J. ; HUMPHRY-BAKER, R. ; GAO, P. ; NAZEERUDDIN, M. K. ; GRÄTZEL, M.: Sequential deposition as a route to high-performance perovskite-sensitized solar cells. In: *Nature* 499 (2013), Nr. 7458, S. 316–319. <http://dx.doi.org/10.1038/nature12340>
- [13] LIU, M. ; JOHNSTON, M. B. ; SNAITH, H. J.: Efficient planar heterojunction perovskite solar cells by vapour deposition. In: *Nature* 501 (2013), Nr. 7467, S. 395–398. <http://dx.doi.org/10.1038/nature12509>
- [14] KATAGIRI, H. ; JIMBO, K. ; MAW, W. S. ; OISHI, K. ; YAMAZAKI, M. ; ARAKI, H. ; TAKEUCHI, A.: Development of CZTS-based thin film solar cells. In: *Thin Solid Films* 517 (2009), Nr. 7, S. 2455–2460. <http://dx.doi.org/10.1016/j.tsf.2008.11.002>
- [15] WANG, W. ; WINKLER, M. T. ; GUNAWAN, O. ; GOKMEN, T. ; TODOROV, T. K. ; ZHU, Y. ; MITZI, D. B.: Device Characteristics of CZTSSe Thin-Film Solar Cells with 12.6% Efficiency. In: *Advanced Energy Materials* 4 (2014), Nr. 7, S. 1301465. <http://dx.doi.org/10.1002/aenm.201301465>
- [16] LAPIERRE, R. R. ; CHIA, A. C. E. ; GIBSON, S. J. ; HAAPAMAKI, C. M. ; BOULANGER, J. ; YEE, R. ; KUYANOV, P. ; ZHANG, J. ; TAJIK, N. ; JEWELL, N. ; RAHMAN, K. M. A.: III-V nanowire photovoltaics: Review of design for high efficiency. In: *Physica Status Solidi - Rapid Research Letters* 7 (2013), Nr. 10, 815–830. <http://dx.doi.org/10.1002/pssr.201307109>
- [17] RICHARDSON, C. J. K. ; LEE, M. L.: Metamorphic epitaxial materials. In: *MRS Bulletin* 41 (2016), Nr. 03, S. 193–198. <http://dx.doi.org/10.1557/mrs.2016.7>
- [18] TOBIN, S. P. ; VERNON, S. M. ; BAJGAR, C. ; HAVEN, V. E. ; GEOFFROY, L. M. ; LILLINGTON, D. R.: High-efficiency GaAs/Ge monolithic tandem solar cells. In: *IEEE Electron Device Letters* 9 (1988), Nr. 5, S. 256–258. <http://dx.doi.org/10.1109/55.708>

- [19] BACHMANN, K. J. ; DIETZ, N. ; MILLER, A. E. ; VENABLES, D. ; KELLIHER, J. T.: Heteroepitaxy of lattice-matched compound semiconductors on silicon. In: *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films* 13 (1995), Nr. 3, S. 696. <http://dx.doi.org/10.1116/1.579810>
- [20] TAKAMOTO, T. ; AGUI, T. ; EIJI, I. ; KURITA, H.: High-efficiency InGaP/In_{0.01}Ga_{0.99}As tandem solar cells lattice-matched to Ge substrates. In: *Solar Energy Materials and Solar Cells* 66 (2001), Nr. 1-4, S. 511–516. [http://dx.doi.org/10.1016/S0927-0248\(00\)00213-0](http://dx.doi.org/10.1016/S0927-0248(00)00213-0)
- [21] KING, R. R. ; LAW, D. C. ; EDMONDSON, K. M. ; FETZER, C. M. ; KINSEY, G. S. ; YOON, H. ; SHERIF, R. A. ; KARAM, N. H.: 40% efficient metamorphic GaInP/GaInAs/Ge multijunction solar cells. In: *Applied Physics Letters* 90 (2007), Nr. 18, S. 183516. <http://dx.doi.org/10.1063/1.2734507>
- [22] KING, R. R. ; BHUSARI, D. ; LARRABEE, D. ; LIU, X.-Q ; REHDER, E. ; EDMONDSON, K. ; COTAL, H. ; JONES, R. K. ; ERMER, J. H. ; FETZER, C. M. ; LAW, D. C. ; KARAM, N. H.: Solar cell generations over 40% efficiency. In: *Progress in Photovoltaics: Research and Applications* 20 (2012), Nr. 6, S. 801–815. <http://dx.doi.org/10.1002/pip.1255>
- [23] LI, T. ; MASTRO, M. A. ; DADGAR, A.: *III-V compound semiconductors: Integration with silicon-based microelectronics*. 1. Auflage. Boca Raton, FL : CRC Press, 2011. – ISBN 978–1–4398–1523–6
- [24] PETROFF, P. M. ; LOGAN, R. A. ; SAVAGE, A.: Nonradiative Recombination at Dislocations in III-V Compound Semiconductors. In: *Physical review letters* 44 (1980), Nr. 4, S. 287–291. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.44.287>
- [25] YAMAGUCHI, M. ; AMANO, C.: Efficiency calculations of thin-film GaAs solar cells on Si substrates. In: *Journal of Applied Physics* 58 (1985), Nr. 9, S. 3601. <http://dx.doi.org/10.1063/1.335737>
- [26] CHU, S. N. G. ; NAKAHARA, S. ; PEARTON, S. J. ; BOONE, T. ; VERNON, S. M.: Antiphase domains in GaAs grown by metalorganic chemical vapor deposition on silicon-on-insulator. In: *Journal of Applied Physics* 64 (1988), Nr. 6, S. 2981. <http://dx.doi.org/10.1063/1.341561>
- [27] CARLIN, A. M. ; GRASSMAN, T. J. ; BRENNER, M. R. ; GRANDAL, J. ; RATCLIFF, C. ; YANG, L. ; MILLS, M. ; SHARMA, P. ; FITZGERALD, E. A. ; RINGEL, S. A.: Lattice-matched GaP/SiGe virtual substrates for low-dislocation density GaInP/GaAsP/Si solar cells. In: *Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), 2012 38th IEEE* (2012), S. 000918–000921. <http://dx.doi.org/10.1109/PVSC.2012.6317752>

- [28] BEELER, R. ; MATHEWS, J. ; WENG, C. ; TOLLE, J. ; ROUCKA, R. ; CHIZMESHYA, A.V.G. ; JUDAY, R. ; BAGCHI, S. ; MENÉNDEZ, J. ; KOUVETAKIS, J.: Comparative study of InGaAs integration on bulk Ge and virtual Ge/Si(100) substrates for low-cost photovoltaic applications. In: *Solar Energy Materials and Solar Cells* 94 (2010), Nr. 12, 2362–2370. <http://dx.doi.org/10.1016/j.solmat.2010.08.016>
- [29] FANG, Y.-Y. ; XIE, J. ; TOLLE, J. ; ROUCKA, R. ; D’COSTA, V. R. ; CHIZMESHYA, A. V. G ; MENENDEZ, J. ; KOUVETAKIS, J.: Molecular-based synthetic approach to new group IV materials for high-efficiency, low-cost solar cells and Si-based optoelectronics. In: *Journal of the American Chemical Society* 130 (2008), Nr. 47, 16095–16102. <http://dx.doi.org/10.1021/ja806636c>
- [30] FAUCHER, J. ; GERGER, A. ; TOMASULO, S. ; EBERT, C. ; LOCHTEFELD, A. ; BARNETT, A. ; LEE, M. L.: Single-junction GaAsP solar cells grown on SiGe graded buffers on Si. In: *Applied Physics Letters* 103 (2013), Nr. 19, 191901. <http://dx.doi.org/10.1063/1.4828879>
- [31] ZHAO, X. ; LI, D. ; CONRAD, B. ; WANG, L. ; SOERİYADI, A. H. ; DIAZ, M. ; LOCHTEFELD, A. ; GERGER, A. ; PEREZ-WURFL, I. ; BARNETT, A.: Material and device analysis of SiGe solar cell in a GaAsP–SiGe dual junction solar cell on Si substrate. In: *Solar Energy Materials and Solar Cells* 134 (2015), 114–121. <http://dx.doi.org/10.1016/j.solmat.2014.11.027>
- [32] GRASSMAN, T. J. ; CHMIELEWSKI, D. J. ; CARNEVALE, S. D. ; CARLIN, J. A. ; RINGEL, S. A.: GaAs_{0.75}>P_{0.25}/Si Dual-Junction Solar Cells Grown by MBE and MOCVD. In: *IEEE Journal of Photovoltaics* 6 (2016), Nr. 1, S. 326–331. <http://dx.doi.org/10.1109/JPHOTOV.2015.2493365>
- [33] GRASSMAN, T. J. ; CARLIN, A. M. ; RINGEL, S. A.: Metamorphic GaAsP and InGaP photovoltaic materials on Si for high-efficiency III-V/Si multijunction solar cells. In: *Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), 2010 35th IEEE* (2010), S. 002029–002033. <http://dx.doi.org/10.1109/PVSC.2010.5616938>
- [34] GRASSMAN, T. J. ; BRENNER, M. R. ; GONZALEZ, M. ; CARLIN, A. M. ; UNOCIC, R. R. ; DEHOFF, R. R. ; MILLS, M. J. ; RINGEL, S. A.: Characterization of Metamorphic GaAsP/Si Materials and Devices for Photovoltaic Applications. In: *IEEE Transactions on Electron Devices* 57 (2010), Nr. 12, S. 3361–3369. <http://dx.doi.org/10.1109/TED.2010.2082310>
- [35] GRASSMAN, T. J. ; CARLIN, A. M. ; GRANDAL, J. ; RATCLIFF, C. ;

- YANG, L. ; MILLS, M. J. ; RINGEL, S. A.: Spectrum-optimized Si-based III-V multijunction photovoltaics. In: *Proceedings SPIE 8256, Physics, Simulation, and Photonic Engineering of Photovoltaic Devices 82560* (2012). <http://dx.doi.org/10.1117/12.909658>
- [36] GRASSMAN, T. J. ; CARLIN, J. A. ; GALIANA, B. ; YANG, F. ; MILLS, M. J. ; RINGEL, S. A.: MOCVD-Grown GaP/Si Subcells for Integrated III-V/Si Multijunction Photovoltaics. In: *IEEE Journal of Photovoltaics* 4 (2014), Nr. 3, S. 972–980. <http://dx.doi.org/10.1109/JPHOTOV.2014.2308727>
- [37] TURNER, G. W.: Detrimental optical properties of germanium intermediate layers in monolithic tandem solar cell structures. In: *Solar Cells* 14 (1985), Nr. 2, S. 139–148. [http://dx.doi.org/10.1016/0379-6787\(85\)90036-5](http://dx.doi.org/10.1016/0379-6787(85)90036-5)
- [38] MARTÍ, A. ; ARAÚJO, G. L.: Limiting efficiencies for photovoltaic energy conversion in multigap systems. In: *Solar Energy Materials and Solar Cells* 43 (1996), Nr. 2, S. 203–222. [http://dx.doi.org/10.1016/0927-0248\(96\)00015-3](http://dx.doi.org/10.1016/0927-0248(96)00015-3)
- [39] BREMNER, S. P. ; LEVY, M. Y. ; HONSBURG, C. B.: Analysis of tandem solar cell efficiencies under AM1.5G spectrum using a rapid flux calculation method. In: *Progress in Photovoltaics: Research and Applications* 16 (2008), Nr. 3, S. 225–233. <http://dx.doi.org/10.1002/pip.799>
- [40] FRIEDMAN, D. J.: Progress and challenges for next-generation high-efficiency multijunction solar cells. In: *Current Opinion in Solid State and Materials Science* 14 (2010), Nr. 6, S. 131–138. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cossms.2010.07.001>
- [41] GREEN, M. A.: Silicon solar cells: state of the art. In: *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 371 (2013), Nr. 1996, 20110413. <http://dx.doi.org/10.1098/rsta.2011.0413>
- [42] ROYER, L.: Recherches expérimentales sur l'épitaxie ou orientation mutuelle de cristaux d'espèces différentes. In: *Bulletin de la Société française de minéralogie et* 51 (1928), S. 7–159
- [43] SCHNEIDER, H. G.: Bemerkung zur Terminologie des Begriffes Epitaxie. In: *Acta Crystallographica* 16 (1963), Nr. 12, S. 1261–1262. <http://dx.doi.org/10.1107/S0365110X63003340>
- [44] MARKOV, V.A ; PCHELYAKOV, O.P ; SOKOLOV, L.V ; STENIN, S.I ; STOYANOV, S.: Molecular beam epitaxy with synchronization of

- nucleation. In: *Surface Science* 250 (1991), Nr. 1-3, S. 229–234. [http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028\(91\)90725-8](http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028(91)90725-8)
- [45] VOIGTLÄNDER, B.: Fundamental processes in Si/Si and Ge/Si epitaxy studied by scanning tunneling microscopy during growth. In: *Surface Science Reports* 43 (2001), Nr. 5-8, S. 127–254. [http://dx.doi.org/10.1016/S0167-5729\(01\)00012-7](http://dx.doi.org/10.1016/S0167-5729(01)00012-7)
- [46] KLEBER, W. ; BAUTSCH, H.-J ; BOHM, J.: *Einführung in die Kristallographie*. 18. Auflage. Berlin : Verl. Technik, 1998. – ISBN 9783486598858
- [47] BAUER, E.: Phänomenologische Theorie der Kristallabscheidung an Oberflächen. II. In: *Zeitschrift für Kristallographie* 110 (1958), Nr. 1-6, S. 395–431. <http://dx.doi.org/10.1524/zkri.1958.110.1-6.395>
- [48] FRANK, F. C. ; VAN DER MERWE, J. H.: 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>
- [49] VOLMER, M. ; WEBER, A.: Keimbildung in übersättigten Gebilden. In: *Zeitschrift für Physikalische Chemie* 119 (1926), S. 277–301
- [50] STRANSKI, I. N. ; KRASTANOW, L.: Zur Theorie der orientierten Ausscheidung von Ionenkristallen aufeinander. In: *Monatshefte für Chemie* 71 (1937), Nr. 1, S. 351–364. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01798103>
- [51] LÜTH, H.: *Solid Surfaces, Interfaces and Thin Films*. 5. Auflage. Berlin and Heidelberg : Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2010 (Graduate texts in physics). – ISBN 3642135919
- [52] SPIESS, L.: *Moderne Röntgenbeugung: Röntgendiffraktometrie für Materialwissenschaftler, Physiker und Chemiker*. 2. Auflage. Wiesbaden : Teubner, 2008 (Studium). – ISBN 978-3-8351-0166-1
- [53] HULL, R. ; BEAN, J. C.: *Semiconductors and Semimetals*. Bd. 56: *Germanium Silicon: Physics and Materials*. San Diego : Academic Press, 1999. – ISBN 0-12-752164-X
- [54] CHIAROTTI, G.: Physics of Solid Surfaces: Subvolume a: Structure. 24 (1993), S. 21–26. <http://dx.doi.org/10.1007/b41604>
- [55] KROEMER, H.: Polar-on-nonpolar epitaxy. In: *Journal of Crystal Growth* 81 (1987), Nr. 1-4, S. 193–204. [http://dx.doi.org/10.1016/0022-0248\(87\)90391-5](http://dx.doi.org/10.1016/0022-0248(87)90391-5)
- [56] RUBEL, O. ; BARANOVSKII, S. D.: Formation energies of antiphase boundaries in GaAs and GaP: an ab Initio study. In: *International*

- journal of molecular sciences* 10 (2009), Nr. 12, S. 5104–5114. <http://dx.doi.org/10.3390/jms10125104>
- [57] HUDAIT, M. K. ; KRUPANIDHI, S. B.: Self-annihilation of antiphase boundaries in GaAs epilayers on Ge substrates grown by metal-organic vapor-phase epitaxy. In: *Journal of Applied Physics* 89 (2001), Nr. 11, 5972. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1368870>
- [58] LI, Yuan ; GILING, L. J.: A closer study on the self-annihilation of antiphase boundaries in GaAs epilayers. In: *Journal of Crystal Growth* 163 (1996), Nr. 3, S. 203–211. [http://dx.doi.org/10.1016/0022-0248\(95\)00975-2](http://dx.doi.org/10.1016/0022-0248(95)00975-2)
- [59] SHELDON, P. ; JONES, K. M. ; AL-JASSIM, M. M. ; YACOBI, B. G.: Dislocation density reduction through annihilation in lattice-mismatched semiconductors grown by molecular-beam epitaxy. In: *Journal of Applied Physics* 63 (1988), Nr. 11, S. 5609. <http://dx.doi.org/10.1063/1.340343>
- [60] VOLZ, K. ; STOLZ, W. ; DADGAR, A. ; KROST, A.: Growth of III/Vs on Silicon. Version: 2014 // 2015. <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-444-63304-0.00031-7>. In: KUECH, T. F. (Hrsg.) ; KUECH, Thomas F. (Hrsg.) ; NISHINAGA, T. (Hrsg.): *Handbook of crystal growth*. Amsterdam : North Holland and Elsevier, 2014 // 2015. – DOI 10.1016/B978-0-444-63304-0.00031-7. – ISBN 978-0-444-63304-0, S. 1249–1300
- [61] STRITE, S. ; BISWAS, D. ; KUMAR, N. S. ; FRADKIN, M. ; MORKOÇ, H.: Antiphase domain free growth of GaAs on Ge in GaAs/Ge/GaAs heterostructures. In: *Applied Physics Letters* 56 (1990), Nr. 3, S. 244. <http://dx.doi.org/10.1063/1.102818>
- [62] CHO, A. Y.: How molecular beam epitaxy (MBE) began and its projection into the future. In: *Journal of Crystal Growth* 201–202 (1999), S. 1–7. [http://dx.doi.org/10.1016/S0022-0248\(98\)01265-2](http://dx.doi.org/10.1016/S0022-0248(98)01265-2)
- [63] ARTHUR, J. R.: Molecular beam Epitaxy. In: *Surface Science* 500 (2002), Nr. 1–3, S. 189–217. [http://dx.doi.org/10.1016/S0039-6028\(01\)01525-4](http://dx.doi.org/10.1016/S0039-6028(01)01525-4)
- [64] MCCRAY, W.: MBE deserves a place in the history books: Commentary. In: *Nature Nanotechnology* 2 (2007), S. 259–261
- [65] HERMAN, M. A. ; SITTER, H.: *Springer series in materials science*. Bd. 7: *Molecular beam epitaxy: Fundamentals and current status*. 1. Auflage. Berlin, New York : Springer-Verlag, 1989. – ISBN 3540190759
- [66] POHL, U. W.: *Epitaxy of semiconductors: Introduction to physical*

- principles*. 1. Auflage. Berlin, New York : Springer, 2013 (Graduate texts in physics). – ISBN 978–3–642–32969–2
- [67] JOUSTEN, K.: *Wutz Handbuch Vakuumtechnik: Theorie und Praxis*. 8. Auflage. Wiesbaden : Vieweg+Teubner Verlag, 2004. – ISBN 978–3–322–96972–9
- [68] ASAI, M. ; UEBA, H. ; TATSUYAMA, C.: Heteroepitaxial growth of Ge films on the Si(100)-2×1 surface. In: *Journal of Applied Physics* 58 (1985), Nr. 7, S. 2577. <http://dx.doi.org/10.1063/1.335886>
- [69] EAGLESHAM, D. ; CERULLO, M.: Dislocation-free Stranski-Krastanow growth of Ge on Si(100). In: *Physical Review Letters* 64 (1990), Nr. 16, S. 1943–1946. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.64.1943>
- [70] MO, Y.-W ; SAVAGE, D. ; SWARTZENTRUBER, B. ; LAGALLY, M.: Kinetic pathway in Stranski-Krastanov growth of Ge on Si(001). In: *Physical Review Letters* 65 (1990), Nr. 8, S. 1020–1023. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.65.1020>
- [71] KANDEL, D. ; KAXIRAS, E.: Surfactant Mediated Crystal Growth of Semiconductors. In: *Physical Review Letters* 75 (1995), Nr. 14, S. 2742–2745. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.75.2742>
- [72] GRIMM, A. ; FISSEL, A. ; BUGIEL, E. ; WIETLER, T. F.: In situ observation of low temperature growth of Ge on Si(111) by reflection high energy electron diffraction. In: *Applied Surface Science* 370 (2016), S. 40–48. <http://dx.doi.org/10.1016/j.apsusc.2016.02.144>
- [73] MIKI, K. ; SAKAMOTO, K. ; SAKAMOTO, T.: Rheed Observation of Lattice Relaxation During Ge/Si(001) Heteroepitaxy. In: *MRS Proceedings* 148 (1989), S. 323–328. <http://dx.doi.org/10.1557/PROC-148-323>
- [74] DEELMAN, P. W. ; THUNDAT, T. ; SCHOWALTER, L. J.: AFM and RHEED study of Ge islanding on Si(111) and Si(100). In: *Applied Surface Science* 104-105 (1996), S. 510–515. [http://dx.doi.org/10.1016/S0169-4332\(96\)00195-X](http://dx.doi.org/10.1016/S0169-4332(96)00195-X)
- [75] DEELMAN, P. W. ; SCHOWALTER, L. J. ; THUNDAT, T.: In situ measurements of temperature-dependent strain relaxation of Ge/Si(111). In: *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films* 15 (1997), Nr. 3, S. 930. <http://dx.doi.org/10.1116/1.580626>
- [76] BOLKHOVITYANOV, Yu B. ; SOKOLOV, L. V.: Ge-on-Si films obtained by epitaxial growing: edge dislocations and their participation in plastic relaxation. In: *Semiconductor Science and Technology* 27 (2012), Nr. 4, S. 043001. <http://dx.doi.org/10.1088/0268-1242/27/4/043001>

- [77] ICHIKAWA, T. ; INO, S.: Rheed study on the Ge/Si(111) and Si/Ge(111) systems: Reaction of Ge with the Si(111)(7×7) surface. In: *Surface Science* 136 (1984), Nr. 2-3, S. 267–284. [http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028\(84\)90611-3](http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028(84)90611-3)
- [78] TAKAYANAGI, K. ; TANISHIRO, Y. ; TAKAHASHI, S. ; TAKAHASHI, M.: Structure analysis of Si(111)- 7×7 reconstructed surface by transmission electron diffraction. In: *Surface Science* 164 (1985), Nr. 2-3, S. 367–392. [http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028\(85\)90753-8](http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028(85)90753-8)
- [79] WANG, Y.-L ; GUO, H.-M ; QIN, Z.-H ; MA, H.-F ; GAO, H.-J: Toward a Detailed Understanding of Si(111)- 7×7 Surface and Adsorbed Ge Nanostructures: Fabrications, Structures, and Calculations. In: *Journal of Nanomaterials* 2008 (2008), Nr. 1, S. 1–18. <http://dx.doi.org/10.1155/2008/874213>
- [80] FISSEL, A.: Artificially layered heteropolytypic structures based on SiC polytypes: molecular beam epitaxy, characterization and properties. In: *Physics Reports* 379 (2003), Nr. 3-4, S. 149–255. [http://dx.doi.org/10.1016/S0370-1573\(02\)00632-4](http://dx.doi.org/10.1016/S0370-1573(02)00632-4)
- [81] 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>
- [82] 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>
- [83] MAES, J. W. ; SCHANNEN, O.F.Z. ; TROMMEL, J. ; WERNER, K. ; RADELAAR, S. ; BALK, P.: Detection of Misfit Strain Relaxation in MBE Grown Si_{1-x}Ge_x Films by Dynamic Monitoring of Rheed Diffraction Features. In: *MRS Proceedings* 263 (1992). <http://dx.doi.org/10.1557/PROC-263-427>
- [84] SUZUKI, M. ; SHIGETA, Y.: Growth of nanoscale Ge magic islands on Si()- 7×7 substrate. In: *Surface Science* 539 (2003), Nr. 1-3, S. 113–119. [http://dx.doi.org/10.1016/S0039-6028\(03\)00753-2](http://dx.doi.org/10.1016/S0039-6028(03)00753-2)
- [85] ASAOKA, H. ; YAMAZAKI, T. ; YOKOYAMA, Y. ; YAMAGUCHI, K.: Direct stress measurement of Si(111) 7×7 reconstruction. In: *Journal of Crystal Growth* 378 (2013), S. 37–40. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2012.12.124>
- [86] CARLISLE, J. ; MILLER, T. ; CHIANG, T.-C: Atomic origins of surface core levels on Si(111)-(7×7) studied by site-dependent Ge substitution.

- In: *Physical Review B* 45 (1992), Nr. 7, S. 3811–3814. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.45.3811>
- [87] CARLISLE, J. A. ; MILLER, T. ; CHIANG, T.-C.: Ge chemisorption and alloying on the Si(111)-(7×7) surface. In: *Physical Review B* 49 (1994), Nr. 19, S. 13600–13606. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.49.13600>
- [88] COPEL, M. ; REUTER, M. ; KAXIRAS, Efthimios ; 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>
- [89] 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>
- [90] 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>
- [91] WIETLER, T. F.: *Surfactant-modifizierte Epitaxie für Ge/Si-Heterobauelemente*. Dissertation, Leibniz Universität Hannover, 2010
- [92] GUNNELLA, R. ; CASTRUCCI, P. ; PINTO, N. ; DAVOLI, I. ; SÉBILLEAU, D. ; CRESCENZI, M. de: X-ray photoelectron-diffraction study of intermixing and morphology at the Ge/Si(001) and Ge/Sb/Si(001) interface. In: *Physical Review B* 54 (1996), Nr. 12, S. 8882–8891. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.54.8882>
- [93] HORN-VON HOEGEN, M. ; MÜLLER, B. H. ; AL-FALOU, A.: Strain relief by microroughness in surfactant-mediated growth of Ge on Si(001). In: *Physical Review B* 50 (1994), Nr. 16, S. 11640–11652. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.50.11640>
- [94] SCHMIDT, Th ; KROEGER, R. ; CLAUSEN, T. ; FALTA, J. ; JANZEN, A. ; KAMMLER, M. ; KURY, P. ; ZAHL, P. ; HORN-VON HOEGEN, M.: Surfactant-mediated epitaxy of Ge on Si(111): Beyond the surface. In: *Applied Physics Letters* 86 (2005), Nr. 11, S. 111910. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1882760>
- [95] EAGLESHAM, D. ; WHITE, A. ; FELDMAN, L. ; MORIYA, N. ; JACOBSON, D.: Equilibrium shape of Si. In: *Physical Review Letters* 70 (1993), Nr. 11, S. 1643–1646. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.70.1643>

- [96] HULL, Robert ; BEAN, John C.: Misfit dislocations in lattice-mismatched epitaxial films. In: *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences* 17 (1992), Nr. 6, 507–546. <http://dx.doi.org/10.1080/10408439208244585>
- [97] REINKING, D. ; KAMMLER, M. ; HORN-VON HOEGEN, M. ; HOFMANN, K. R.: Enhanced Sb segregation in surfactant-mediated-heteroepitaxy: High-mobility, low-doped Ge on Si. In: *Applied Physics Letters* 71 (1997), Nr. 7, S. 924. <http://dx.doi.org/10.1063/1.119690>
- [98] WANG, G. ; LOO, R. ; SIMOEN, E. ; SOURIAU, L. ; CAYMAX, M. ; HEYNS, M. M. ; BLANPAIN, B.: A model of threading dislocation density in strain-relaxed Ge and GaAs epitaxial films on Si (100). In: *Applied Physics Letters* 94 (2009), Nr. 10, S. 102115. <http://dx.doi.org/10.1063/1.3097245>
- [99] TETZLAFF, D.: *Kohlenstoff-unterstützte Germaniumepitaxie auf Silizium*. Dissertation, Leibniz Universität Hannover, 2013
- [100] 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>
- [101] WU, X. ; WEATHERLY, G.C: Cracking phenomena in $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{As}$ films on InP substrates. In: *Acta Materialia* 47 (1999), Nr. 12, S. 3383–3394. [http://dx.doi.org/10.1016/S1359-6454\(99\)00211-6](http://dx.doi.org/10.1016/S1359-6454(99)00211-6)
- [102] KAPLAN, R.: LEED study of the stepped surface of vicinal Si (100). In: *Surface Science* 93 (1980), Nr. 1, S. 145–158. [http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028\(80\)90052-7](http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028(80)90052-7)
- [103] ITOH, H. ; NARUI, S. ; ZHANG, Z. ; ICHONOKAWA, T.: Structure of double-atomic-height steps in Si(001) vicinal surfaces observed by scanning tunneling microscopy. In: *Surface Science Letters* 277 (1992), Nr. 3, S. L70–L76. [http://dx.doi.org/10.1016/0167-2584\(92\)90136-S](http://dx.doi.org/10.1016/0167-2584(92)90136-S)
- [104] ALCOTTE, R. ; MARTIN, M. ; MOEYAERT, J. ; CIPRO, R. ; DAVID, S. ; BASSANI, F. ; DUCROQUET, F. ; BOGUMILOWICZ, Y. ; SANCHEZ, E. ; YE, Z. ; BAO, X. Y. ; PIN, J. B. ; BARON, T.: Epitaxial growth of antiphase boundary free GaAs layer on 300 mm Si(001) substrate by metalorganic chemical vapour deposition with high mobility. In: *APL Materials* 4 (2016), Nr. 4, S. 046101. <http://dx.doi.org/10.1063/1.4945586>
- [105] SIEG, R. M. ; RINGEL, S. A. ; TING, S. M. ; FITZGERALD, E. A. ; SACKS, R. N.: Anti-phase domain-free growth of GaAs on offcut (001) Ge wafers by molecular beam epitaxy with suppressed Ge outdiffusion.

- In: *Journal of Electronic Materials* 27 (1998), Nr. 7, S. 900–907. <http://dx.doi.org/10.1007/s11664-998-0116-1>
- [106] SIEG, R. M. ; RINGEL, S. A. ; TING, S. M. ; SAMAVEDAM, S. B. ; CURRIE, M. ; LANGDO, T. ; FITZGERALD, E. A.: Toward device-quality GaAs growth by molecular beam epitaxy on offcut Ge/Si_{1-x}Ge_x/Si substrates. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* 16 (1998), Nr. 3, S. 1471. <http://dx.doi.org/10.1116/1.589968>
- [107] TING, S. M. ; FITZGERALD, E. A.: Metal-organic chemical vapor deposition of single domain GaAs on Ge/Ge_xSi_{1-x}/Si and Ge substrates. In: *Journal of Applied Physics* 87 (2000), Nr. 5, S. 2618. <http://dx.doi.org/10.1063/1.372227>
- [108] CHADI, D.: Stabilities of single-layer and bilayer steps on Si(001) surfaces. In: *Physical Review Letters* 59 (1987), Nr. 15, S. 1691–1694. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.59.1691>
- [109] ASPNES, D. E. ; IHM, J.: Biatomic steps on (001) silicon surfaces. In: *Physical review letters* 57 (1986), Nr. 24, S. 3054–3057. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.57.3054>
- [110] DOUCETTE, L. D. ; DA 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>
- [111] GRIFFIRH, J. E. ; KOCHANSKI, G. P.: The atomic structure of vicinal Si(001) and Ge(001). In: *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences* 16 (1990), Nr. 4, S. 255–289. <http://dx.doi.org/10.1080/10408439008243750>
- [112] SCHRÖDER-BERGEN, E. ; RANKE, W.: Steps on Si(001) vicinal surfaces tilted by various angles in the [10]-, [100]- and [20]-zones, investigated by high-resolution LEED. In: *Surface Science* 259 (1991), Nr. 3, S. 323–338. [http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028\(91\)90562-7](http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028(91)90562-7)
- [113] WASSERFALL, J. ; RANKE, W.: Azimuthal variation of the step distribution on vicinal Si(001) surfaces. In: *Surface Science* 315 (1994), Nr. 3, S. 227–236. [http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028\(94\)90127-9](http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028(94)90127-9)
- [114] RUHKOPF, Jasper: *Molekularstrahlepitaxie von Germanium auf vizi-nalen Siliziumsubstraten*. Diplomarbeit, Leibniz Universität Hannover, 2013
- [115] GUTAKOVSKII, A. K. ; KATKOV, A. V. ; KATKOV, M. I. ; PCHE-LYAKOV, O. P. ; REVENKO, M. A.: Influence of the step height

- of the vicinal surface of germanium on the formation of antiphase boundaries in a gallium-arsenide-germanium-gallium-arsenide(001) system. In: *Technical Physics Letters* 24 (1998), Nr. 12, 949–951. <http://dx.doi.org/10.1134/1.1262328>
- [116] TANOTO, H. ; YOON, S. F. ; LOKE, W. K. ; FITZGERALD, E. A. ; DOHRMAN, C. ; NARAYANAN, B. ; DOAN, M. T. ; TUNG, C. H.: Growth of GaAs on vicinal Ge surface using low-temperature migration-enhanced epitaxy. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* 24 (2006), Nr. 1, S. 152. <http://dx.doi.org/10.1116/1.2151220>
- [117] FITZGERALD, E. A. ; KUO, J. M. ; XIE, Y. H. ; SILVERMAN, P. J.: Necessity of Ga prelayers in GaAs/Ge growth using gas-source molecular beam epitaxy. In: *Applied Physics Letters* 64 (1994), Nr. 6, S. 733. <http://dx.doi.org/10.1063/1.111049>
- [118] MIZUGUCHI, K. ; HAYAFUJI, N. ; OCHI, S. ; MUROTANI, T. ; FUJIKAWA, K.: MOCVD GaAs growth on Ge (100) and Si (100) substrates. In: *Journal of Crystal Growth* 77 (1986), Nr. 1-3, 509–514. [http://dx.doi.org/10.1016/0022-0248\(86\)90345-3](http://dx.doi.org/10.1016/0022-0248(86)90345-3)
- [119] LI, Yuan ; SALVIATI, G. ; BONGERS, M.M.G. ; LAZZARINI, L. ; NASI, L. ; GILING, L. J.: On the formation of antiphase domains in the system of GaAs on Ge. In: *Journal of Crystal Growth* 163 (1996), Nr. 3, 195–202. [http://dx.doi.org/10.1016/0022-0248\(95\)00958-2](http://dx.doi.org/10.1016/0022-0248(95)00958-2)
- [120] LAZZARINI, L. ; NASI, L. ; SALVIATI, G. ; FREGONARA, C.Z ; LI, Y. ; GILING, L.J ; HARDINGHAM, C. ; HOLT, D.B: Antiphase disorder in GaAs/Ge heterostructures for solar cells. In: *Micron* 31 (2000), Nr. 3, S. 217–222. [http://dx.doi.org/10.1016/S0968-4328\(99\)00086-4](http://dx.doi.org/10.1016/S0968-4328(99)00086-4)
- [121] PUKITE, P. R. ; COHEN, P. J.: Suppression of antiphase domains in the growth of GaAs on Ge(100) by Molecular Beam Epitaxy. In: *Journal of Crystal Growth* 81 (1978), S. 214–220
- [122] SHELDON, P. ; YACOBI, B. G. ; JONES, K. M. ; DUNLAVY, D. J.: Growth and characterization of GaAs/Ge epilayers grown on Si substrates by molecular beam epitaxy. In: *Journal of Applied Physics* 58 (1985), Nr. 11, S. 4186. <http://dx.doi.org/10.1063/1.335551>
- [123] GUTAKOVSKY, A.K ; KATKOV, A.V ; KATKOV, M.I ; PCHELYAKOV, O.P ; REVENKO, M.A: Effect of Ga predeposition layer on the growth of GaAs on vicinal Ge(001). In: *Journal of Crystal Growth* 201-202 (1999), 232–235. [http://dx.doi.org/10.1016/S0022-0248\(98\)01328-1](http://dx.doi.org/10.1016/S0022-0248(98)01328-1)
- [124] CARLIN, J. A. ; HUDAIT, M. K. ; RINGEL, S. A. ; WILT, D. M. ; CLARK, E. B. ; LEITZ, C. W. ; CURRIE, M. ; LANGDO, T. ; FITZGERALD,

- E. A.: High efficiency GaAs-on-Si solar cells with high V_{OC} using graded GeSi buffers. In: *Photovoltaic Specialists Conference, 2000. Conference Record of the Twenty-Eighth IEEE* (2000), S. 1006–1011. <http://dx.doi.org/10.1109/PVSC.2000.916056>
- [125] LI, W. ; LAAKSONEN, S. ; HAAPAMAA, J. ; PESSA, M.: Growth of device-quality GaAs layer directly on (001) Ge substrates by both solid-source and gas-source MBE. In: *Journal of Crystal Growth* 227-228 (2001), S. 104–107. [http://dx.doi.org/10.1016/S0022-0248\(01\)00641-8](http://dx.doi.org/10.1016/S0022-0248(01)00641-8)
- [126] FAUCHER, J. ; MASUDA, T. ; LEE, M. L.: Initiation strategies for simultaneous control of antiphase domains and stacking faults in GaAs solar cells on Ge. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Nanotechnology and Microelectronics* 34 (2016), Nr. 4, S. 041203. <http://dx.doi.org/10.1116/1.4945659>
- [127] BRAUN, W.: *Applied RHEED: Reflection high-energy electron diffraction during crystal growth*. Bd. 154. 1. Auflage. Berlin [u.a.] : Springer, 1999. – ISBN 3-540-65199-3
- [128] INO, S.: Some New Techniques in Reflection High Electron Diffraction (RHEED) Application to Surface Structure Studies. In: *Japanese Journal of Applied Physics* 16 (1977), Nr. 6, S. 891–908. <http://dx.doi.org/10.1143/JJAP.16.891>
- [129] HENZLER, M. ; GÖPEL, W.: *Oberflächenphysik des Festkörpers*. 2. Auflage. Stuttgart : Teubner, 1994 (Teubner-Studienbücher. Physik). – ISBN 3519130475
- [130] 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>
- [131] HARRIS, J.J. ; A. JOYCE, B. ; DOBSON, P.J.: Oscillations in the surface structure of Sn-doped GaAs during growth by MBE. In: *Surface Science* 103 (1981), Nr. 1, S. L90–L96. [http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028\(81\)90091-1](http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028(81)90091-1)
- [132] DANILUK, A. ; MAZUREK, P. ; MIKOŁAJCZAK, P.: RHEED intensity oscillations observed during growth of Ge on Si(111) substrates. In: *Surface Science* 369 (1996), Nr. 1-3, S. 91–98. [http://dx.doi.org/10.1016/S0039-6028\(96\)00924-7](http://dx.doi.org/10.1016/S0039-6028(96)00924-7)
- [133] DEMTRÖDER, W.: *Experimentalphysik: Band 3: Atome, Moleküle und Festkörper*. 3. Auflage. Berlin : Springer, 2005. – ISBN 3540214739
- [134] HUNKLINGER, S.: *Festkörperphysik*. 2. Auflage. München and Wien : Oldenbourg, 2007. – ISBN 978-3486575620

- [135] KITTEL, C.: *Einführung in die Festkörperphysik*. 14. Auflage. München [u.a.] : Oldenbourg, 2006. – ISBN 3486577239
- [136] ASHCROFT, N. W. ; MERMIN, N. D.: *Festkörperphysik*. 2. Auflage. München and Wien : Oldenbourg, 2005. – ISBN 3486577204
- [137] BROGLIE, L. V.: Recherches sur la théorie des quanta. In: *Annales de Physique* 1925 (1924), Nr. 10–série, III, S. 22–128
- [138] BRAVAIS, A.: Mémoire sur les systèmes formés par des points distribués régulièrement sur un plan ou dans l'espace. In: *Journal de l'École Polytechnique* (1850), Nr. 19, S. 1–128
- [139] EWALD, P.: Zur Theorie der Interferenzen der Röntgenstrahlen in Kristallen. In: *Physikalische Zeitschrift* 14 (1913), Nr. 11, S. 465–472
- [140] ZHU, J.-H. ; BRUNNER, K. ; ABSTREITER, G.: Step characterization on vicinal Si surfaces by reflection high-energy electron diffraction at arbitrary azimuths. In: *Applied Surface Science* 137 (1999), Nr. 1-4, S. 191–196. [http://dx.doi.org/10.1016/S0169-4332\(98\)00481-4](http://dx.doi.org/10.1016/S0169-4332(98)00481-4)
- [141] TEGENKAMP, C. ; WOLLSCHLÄGER, J. ; PFNÜR, H. ; MEYER ZU HERINGDORF, F.-J ; HORN-VON HOEGEN, M.: Step and kink correlations on vicinal Ge(100) surfaces investigated by electron diffraction. In: *Physical Review B* 65 (2002), Nr. 23. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.65.235316>
- [142] FRIEDRICH, W. ; KNIPPING, P. ; LAUE, M. von: *Interferenz-Erscheinungen bei Röntgenstrahlen*. München : Königlich Bayrische Akademie der Wissenschaften, 1912
- [143] ECKERT, M.: Max von Laue and the discovery of X-ray diffraction in 1912. In: *Annalen der Physik* 524 (2012), Nr. 5, S. A83–A85. <http://dx.doi.org/10.1002/andp.201200724>
- [144] 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>
- [145] WILLIAMS, D. B. ; CARTER, C. B.: *Transmission electron microscopy: A textbook for materials science*. 2. Auflage. New York and London : Springer, 2009. – ISBN 978-0-387-76500-6
- [146] BRANTLEY, W. A.: Calculated elastic constants for stress problems associated with semiconductor devices. In: *Journal of Applied Physics* 44 (1973), Nr. 1, S. 534. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1661935>
- [147] 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)
- [148] ZAUMSEIL, P.: Characterization of the perfection of $\text{Si}_{1-x}\text{G}_x$ 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\(93\)90488-1](http://dx.doi.org/10.1016/0022-0248(93)90488-1)
- [149] PARRATT, L.: 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>
- [150] TOLAN, Metin: *Springer tracts in modern physics*. Bd. 148: *X-ray scattering from soft-matter thin films: Materials science and basic research*. 1. Auflage. Berlin and New York : Springer, 1999. – ISBN 978-3-540-65182-6
- [151] RUSKA, E. ; KNOLL, M.: Das Elektronenmikroskop. In: *Zeitschrift für Physik* 78 (1932), S. 318–339. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01342199>
- [152] ARDENNE, M.: Das Elektronen-Rastermikroskop. In: *Zeitschrift für Physik* 109 (1938), Nr. 9-10, S. 553–572. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01341584>
- [153] FULTZ, B. ; HOWE, J. M.: *Transmission electron microscopy and diffractometry of materials*. 3. Auflage. Berlin, New York : Springer, 2008. – ISBN 978-3-540-73886-2
- [154] BINNIG, G. ; ROHRER, H. ; GERBER, Ch ; WEIBEL, E.: Surface Studies by Scanning Tunneling Microscopy. In: *Physical Review Letters* 49 (1982), Nr. 1, S. 57–61. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.49.57>
- [155] HOFMANN, Philip: *Surface physics: An introduction*. Philip Hofmann, 2013. – ISBN 978-87-996090-0-0
- [156] NEDDERMEYER, H.: Scanning tunnelling microscopy of semiconductor surfaces. In: *Reports on Progress in Physics* 59 (1996), Nr. 6, 701–769. <http://dx.doi.org/10.1088/0034-4885/59/6/001>
- [157] 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>
- [158] WIESENDANGER, R.: *Scanning probe microscopy and spectroscopy: Methods and applications*. 1. Auflage. Cambridge : Cambridge University Press, 2012. – ISBN 0521428475

- [159] EATON, P. ; WEST, P.: *Atomic force microscopy*. 1. Auflage. Oxford [u.a.] : Oxford Univ. Press, 2010. – ISBN 978-0-19-957045-4
- [160] BOWEN, W. R. ; HILAL, N.: *Atomic force microscopy in process engineering: Introduction to AFM for improved processes and products*. Amsterdam [u.a.] : Elsevier/Butterworth-Heinemann, 2009. – ISBN 978-1-85617-517-3
- [161] HOFMANN, Siegfried: *Springer series in surface sciences*. Bd. 49: *Auger- and X-Ray Photoelectron Spectroscopy in Materials Science: A user-oriented guide*. 1. Auflage. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2013. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-27381-0>. – ISBN 978-3-642-27380-3
- [162] SCHWENDT, D.: *Charakterisierung von binären und ternären Seltene Erden Oxiden*. Dissertation, Leibniz Universität Hannover, 2012
- [163] SEAH, M. P. ; DENCH, W. A.: Quantitative electron spectroscopy of surfaces: A standard data base for electron inelastic mean free paths in solids. In: *Surface and Interface Analysis* 1 (1979), Nr. 1, S. 2–11. <http://dx.doi.org/10.1002/sia.740010103>
- [164] TANUMA, S. ; POWELL, C. J. ; PENN, D. R.: Calculations of electron inelastic mean free paths. IX. Data for 41 elemental solids over the 50 eV to 30 keV range. In: *Surface and Interface Analysis* 43 (2011), Nr. 3, S. 689–713. <http://dx.doi.org/10.1002/sia.3522>
- [165] YU, P. Y. ; CARDONA, M.: *Fundamentals of semiconductors: Physics and materials properties*. 4. Auflage. Berlin, New York : Springer, 2010 (Graduate texts in physics). – ISBN 978-3-642-00709-5
- [166] 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>
- [167] ANDRIEU, S.: Sb adsorption on Si(111) analyzed by ellipsometry and reflection high-energy electron diffraction: Consequences for Sb doping in Si molecular-beam epitaxy: Consequences for Sb doping in Si molecular-beam epitaxy. In: *Journal of Applied Physics* 69 (1991), Nr. 3, S. 1366. <http://dx.doi.org/10.1063/1.347274>
- [168] GUESMI, H. ; LAPENA, L. ; TRÉGLIA, G. ; MÜLLER, P.: Coverage dependence of Sb/Si(111) adsorption and desorption modes: Interplay between chemical interactions and site transitions. In: *Physical Review B* 77 (2008), Nr. 8. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.77.085402>

- [169] SLAWIG, D.: *Impact of Substrate Orientation on Carbon mediated epitaxy of Ge on Si*. Master Thesis, Leibniz Universität Hannover, 2016
- [170] 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>
- [171] 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)
- [172] NIWANO, M. ; KAGEYAMA, J. ; 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>
- [173] 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>
- [174] LIPPERT, G.: *Deutsche Hochschulschriften*. Bd. 1056: *Verunreinigung in der Siliziummolekularstrahlepitaxie*. Egelsbach and Frankfurt (Main) and Washington : Hänsel-Hohenhausen, 1995. – ISBN 3826710568
- [175] TABE, M.: UV ozone cleaning of silicon substrates in silicon molecular beam epitaxy. In: *Applied Physics Letters* 45 (1984), Nr. 10, S. 1073. <http://dx.doi.org/10.1063/1.95019>
- [176] 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>
- [177] REIMERS, C.: *Herstellung und Charakterisierung n-dotierter Epitaxialschichten auf Siliziumsubstraten*. Masterarbeit, Leibniz Universität Hannover, 2013
- [178] LESSMANN, A. ; DRUBE, W. ; MATERLIK, G.: Backreflection XSW and ARUPS studies of Sb/Ge(001)-2 × 1. In: *Surface Science* 323 (1995), Nr. 1-2, S. 109–117. [http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028\(94\)00640-7](http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028(94)00640-7)

- [179] NORDLING, C. ; SOKOLOWSKI, E. ; SIEGBAHN, K.: Precision Method for Obtaining Absolute Values of Atomic Binding Energies. In: *Physical Review* 105 (1957), Nr. 5, S. 1676–1677. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.105.1676>
- [180] SOKOLOWSKI, E. ; NORDLING, C. ; SIEGBAHN, K.: Chemical Shift Effect in Inner Electronic Levels of Cu Due to Oxidation. In: *Physical Review* 110 (1958), Nr. 3, S. 776. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.110.776>
- [181] PRABHAKARAN, K. ; OGINO, T.: Oxidation of Ge(100) and Ge(111) surfaces: an UPS and XPS study. In: *Surface Science* 325 (1995), Nr. 3, S. 263–271. [http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028\(94\)00746-2](http://dx.doi.org/10.1016/0039-6028(94)00746-2)
- [182] GWYDDION VERSION 2.31: In: *Open source software, www.gwyddion.net*
- [183] LAHA, A. ; BUGIEL, E. ; WANG, J. X. ; SUN, Q. Q. ; FISSEL, A. ; OSTEN, H. J.: Effect of domain boundaries on the electrical properties of crystalline Gd₂O₃ thin films. In: *Applied Physics Letters* 93 (2008), Nr. 18, 182907. <http://dx.doi.org/10.1063/1.3009206>
- [184] BUES, W. ; WARTENBERG, H. V.: Das System Ge/Geo/GeO₂. In: *Z. Anorg. Allg. Chem. (Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie)* 266 (1951), Nr. 6, S. 281–288. <http://dx.doi.org/10.1002/zaac.19512660602>
- [185] HOCH, M. ; JOHNSTON, H. L.: The Germanium-Oxygen System. In: *The Journal of Chemical Physics* 22 (1954), Nr. 8, S. 1376. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1740398>
- [186] DOI, T. ; ICHIKAWA, M. ; HOSOKI, S. ; NINOMIYA, K.: Anisotropic diffusion between the step-up and the step-down directions on a Si(001) surface. In: *Physical Review B* 53 (1996), Nr. 24, S. 16609–16614. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.53.16609>
- [187] DISMUKES, J. P. ; EKSTROM, L. ; PAFF, R. J.: Lattice Parameter and Density in Germanium-Silicon Alloys. In: *The Journal of Physical Chemistry* 68 (1964), Nr. 10, S. 3021–3027. <http://dx.doi.org/10.1021/j100792a049>
- [188] KASPER, E. ; SCHUH, A. ; BAUER, G. ; HOLLÄNDER, B. ; KIBBEL, H.: Test of Vegard's law in thin epitaxial SiGe layers. In: *Journal of Crystal Growth* 157 (1995), Nr. 1-4, S. 68–72
- [189] VEGARD, L.: Die Konstitution der Mischkristalle und die Raumfüllung der Atome. In: *Zeitschrift für Physik* 5 (1921), Nr. 1, S. 17–26. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01349680>
- [190] ICHIMIYA, A. ; COHEN, P. I.: *Reflection high-energy electron diffraction.*

1. Auflage. Cambridge and U.K, New York : Cambridge University Press, 2004. – ISBN 978–0521453738
- [191] FELTRIN, A. ; FREUNDLICH, A.: RHEED metrology of Stranski–Krastanov quantum dots. In: *Journal of Crystal Growth* 301-302 (2007), S. 38–41. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2006.11.294>
- [192] NABETANI, Y. ; ISHIKAWA, T. ; NODA, S. ; SASAKI, A.: Initial growth stage and optical properties of a three-dimensional InAs structure on GaAs. In: *Journal of Applied Physics* 76 (1994), Nr. 1, S. 347. <http://dx.doi.org/10.1063/1.358483>
- [193] OSTEN, H. J. ; KLATT, J. ; LIPPERT, G. ; BUGIEL, E.: Surfactant-mediated growth of germanium on Si(100) by MBE and SPE. In: *Journal of Crystal Growth* 127 (1993), Nr. 1-4, 396–400. [http://dx.doi.org/10.1016/0022-0248\(93\)90647-F](http://dx.doi.org/10.1016/0022-0248(93)90647-F)
- [194] LABELLA, V. P. ; BULLOCK, D. W. ; EMERY, C. ; DING, Z. ; THIBADO, P. M.: Enabling electron diffraction as a tool for determining substrate temperature and surface morphology. In: *Applied Physics Letters* 79 (2001), Nr. 19, S. 3065. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1416477>
- [195] FARRELL, H. H. ; PALMSTROM, C. J.: Reflection high energy electron diffraction characteristic absences in GaAs(100) (2×4)–As: A tool for determining the surface stoichiometry. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Nanotechnology and Microelectronics* 8 (1990), Nr. 4, S. 903. <http://dx.doi.org/10.1116/1.584940>
- [196] KÄHLER, Lars-Christian: *Präparation von virtuellen Germaniumsubstraten für die Heteroepitaxie*. Bachelorarbeit, Leibniz Universität Hannover, 2015
- [197] KIM, J. ; MCVITTIE, J. ; SARASWAT, K. ; NISHI, Y. ; LIU, S. ; TAN, S.: Germanium Surface Cleaning with Hydrochloric Acid. In: *ECS Transactions* 3 (2006), Nr. 7, S. 1191–1196. <http://dx.doi.org/10.1149/1.2355913>
- [198] KLESSE, W. M. ; SCAPPUCCI, G. ; CAPELLINI, G. ; SIMMONS, M. Y.: Preparation of the Ge(001) surface towards fabrication of atomic-scale germanium devices. In: *Nanotechnology* 22 (2011), Nr. 14, S. 145604. <http://dx.doi.org/10.1088/0957-4484/22/14/145604>
- [199] PONATH, P. ; POSADAS, A. B. ; HATCH, R. C. ; DEMKOV, A. A.: Preparation of a clean Ge(001) surface using oxygen plasma cleaning. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B: Nanotechnology and Microelectronics* 31 (2013), Nr. 3, S. 031201. <http://dx.doi.org/10.1116/1.4798390>

- [200] RÖVER, Kai-Sven: *Herstellung und Charakterisierung dünner Gatedielektrika auf Germanium*. Dissertation, Leibniz Universität Hannover, 2003
- [201] ONSIA, B. ; CONARD, T. ; GENDT, S. d. ; HEYNS, M. M. ; HOFLIJK, I. ; MERTENS, P. W. ; MEURIS, M. ; RASKIN, G. ; SIONCKE, S. ; TEERLINCK, I. ; THEUWIS, A. ; VAN STEENBERGEN, J. ; VINCKIER, C.: A Study of the Influence of Typical Wet Chemical Treatments on the Germanium Wafer Surface. In: *Solid State Phenomena* 103-104 (2005), S. 27–30. <http://dx.doi.org/10.4028/www.scientific.net/SSP.103-104.27>
- [202] ZHANG, X.-J. ; XUE G. ; AGARWAL, R. ; TSU, R. ; HASAN, M.-A. ; GREENE, J. E. ; ROCKETT, A.: Thermal desorption of ultraviolet–ozone oxidized Ge(001) for substrate cleaning. In: *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films* 11 (1993), Nr. 5, S. 2553. <http://dx.doi.org/10.1116/1.578606>
- [203] GOTTSCHALCH, V. ; HEINIG, W. ; BUTTER, E. ; ROSIN, H. ; FREYDANK, G.: H_3PO_4 — etching of 001-faces of InP, (GaIn)P, GaP, and Ga(AsP). In: *Kristall und Technik* 14 (1979), Nr. 5, S. 563–569. <http://dx.doi.org/10.1002/crat.19790140509>
- [204] STIRLAND, D. J.: Quantitative defect etching of GaAs on Si: Is it possible? In: *Applied Physics Letters* 53 (1988), Nr. 24, S. 2432. <http://dx.doi.org/10.1063/1.100211>
- [205] YAUNG, K. N. ; TOMASULO, S. ; LANG, J. R. ; FAUCHER, J. ; LEE, M. L.: Defect selective etching of $\text{GaAs}_y\text{P}_{1-y}$ photovoltaic materials. In: *Journal of Crystal Growth* 404 (2014), S. 140–145. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2014.07.005>
- [206] TAFTØ, J. ; SPENCE, J. C. H.: A simple method for the determination of structure-factor phase relationships and crystal polarity using electron diffraction. In: *Journal of Applied Crystallography* 15 (1982), Nr. 1, S. 60–64. <http://dx.doi.org/10.1107/S0021889882011352>
- [207] NARAYANAN, V. ; MAHAJAN, S. ; BACHMANN, K. J. ; WOODS, V. ; DIETZ, N.: Antiphase boundaries in GaP layers grown on (001) Si by chemical beam epitaxy. In: *Acta Materialia* 50 (2002), Nr. 6, S. 1275–1287. [http://dx.doi.org/10.1016/S1359-6454\(01\)00408-6](http://dx.doi.org/10.1016/S1359-6454(01)00408-6)
- [208] NÉMETH, I. ; KUNERT, B. ; STOLZ, W. ; VOLZ, K.: Ways to quantitatively detect antiphase disorder in GaP films grown on Si(001) by transmission electron microscopy. In: *Journal of Crystal Growth* 310 (2008), Nr. 23, S. 4763–4767. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2008.07.105>
- [209] LIN, Angie C. ; FEJER, M. M. ; HARRIS, James S.: Antiphase domain

- annihilation during growth of GaP on Si by molecular beam epitaxy. In: *Journal of Crystal Growth* 363 (2013), S. 258–263. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2012.10.055>
- [210] KUAN, T. S. ; CHANG, C.-A.: Electron microscope studies of a Ge–GaAs superlattice grown by molecular beam epitaxy. In: *Journal of Applied Physics* 54 (1983), Nr. 8, S. 4408. <http://dx.doi.org/10.1063/1.332688>
- [211] POSTHILL, J. B. ; TARN, J. C. L. ; DAS, K. ; HUMPHREYS, T. P. ; PARIKH, N. R.: Observation of antiphase domain boundaries in GaAs on silicon by transmission electron microscopy. In: *Applied Physics Letters* 53 (1988), Nr. 13, S. 1207. <http://dx.doi.org/10.1063/1.100021>
- [212] BARRETT, C.S.C. ; MARTIN, T. P. ; BAO, X.-Y. ; KENNON, E. L. ; GUTIERREZ, L. ; MARTIN, P. ; SANCHEZ, E. ; JONES, K. S.: Effect of bulk growth temperature on antiphase domain boundary annihilation rate in MOCVD-grown GaAs on Si(001). In: *Journal of Crystal Growth* 450 (2016), S. 39–44. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2016.06.021>
- [213] MONCHOUX, J. P. ; CHATAIN, D. ; WYNBLATT, P.: A study of gallium drops on germanium(111). In: *Applied Surface Science* 228 (2004), Nr. 1-4, S. 357–364. <http://dx.doi.org/10.1016/j.apsusc.2004.01.034>
- [214] SUGAVANESHWAR, R. P. ; NAGAO, T. ; NANDA, K. K.: Fabrication of Highly Dense Nanoholes by Self-Assembled Gallium Droplet on Silicon Surface. In: *Materials Express* 2 (2012), Nr. 3, S. 245–250. <http://dx.doi.org/10.1166/mex.2012.1070>
- [215] WERNER, K. ; BEYER, A. ; OELERICH, J. O. ; BARANOVSKII, S. D. ; STOLZ, W. ; VOLZ, K.: Structural characteristics of gallium metal deposited on Si (001) by MOCVD. In: *Journal of Crystal Growth* 405 (2014), S. 102–109. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2014.07.045>
- [216] PAN, Z. W. ; DAI, Z. R. ; MA, C. ; WANG, Z. L.: Molten Gallium as a Catalyst for the Large-Scale Growth of Highly Aligned Silica Nanowires. In: *Journal of the American Chemical Society* 124 (2002), Nr. 8, S. 1817–1822. <http://dx.doi.org/10.1021/ja017284n>
- [217] VARSHNI, Y. P.: Temperature dependence of the energy gap in semiconductors. In: *Physica* 34 (1967), Nr. 1, S. 149–154. [http://dx.doi.org/10.1016/0031-8914\(67\)90062-6](http://dx.doi.org/10.1016/0031-8914(67)90062-6)
- [218] WU, J. D. ; HUANG, Y. S. ; BRAMMERTZ, G. ; TIONG, K. K.: Optical characterization of thin epitaxial GaAs films on Ge substrates. In:

- Journal of Applied Physics* 106 (2009), Nr. 2, S. 023505. <http://dx.doi.org/10.1063/1.3173282>
- [219] BRAMMERTZ, G. ; MOLS, Y. ; DEGROOTE, S. ; MOTSNYI, V. ; LEYS, M. ; BORGHS, G. ; CAYMAX, M.: Low-temperature photoluminescence study of thin epitaxial GaAs films on Ge substrates. In: *Journal of Applied Physics* 99 (2006), Nr. 9, S. 093514. <http://dx.doi.org/10.1063/1.2194111>
- [220] KNUUTTILA, L. ; LANKINEN, A. ; LIKONEN, J. ; LIPSANEN, H. ; LU, X. ; MCNALLY, P. ; RIIKONEN, J. ; TUOMI, T.: Low Temperature Growth GaAs on Ge. In: *Japanese Journal of Applied Physics* 44 (2005), Nr. 11, S. 7777–7784. <http://dx.doi.org/10.1143/JJAP.44.7777>
- [221] MASSELINK, W. T. ; FISCHER, R. ; KLEM, J. ; HENDERSON, T. ; PEARRAH, P. ; MORKOÇ, H.: Polar semiconductor quantum wells on nonpolar substrates: (Al,Ga)As/GaAs on (100)Ge. In: *Applied Physics Letters* 45 (1984), Nr. 4, S. 457. <http://dx.doi.org/10.1063/1.95214>
- [222] MODAK, P. ; HUDAIT, M. K. ; HARDIKAR, S. ; KRUPANIDHI, S. B.: OMVPE growth of undoped and Si-doped GaAs epitaxial layers on Ge. In: *Journal of Crystal Growth* 193 (1998), Nr. 4, S. 501–509. [http://dx.doi.org/10.1016/S0022-0248\(98\)00600-9](http://dx.doi.org/10.1016/S0022-0248(98)00600-9)
- [223] SARMA, K. ; DALBY, R. ; ROSE, K. ; AINA, O. ; KATZ, W. ; LEWIS, N.: Ge diffusion at Ge/GaAs heterojunctions. In: *Journal of Applied Physics* 56 (1984), Nr. 10, S. 2703. <http://dx.doi.org/10.1063/1.333792>
- [224] EFTAXIAS, K. ; HADJICONTIS, V.: Comments on the Diffusion of Ga in Ge. In: *Physica Status Solidi (b)* 160 (1990), Nr. 1, S. K9–K12. <http://dx.doi.org/10.1002/pssb.2221600140>
- [225] SCHÖNE, Jan: *Kontrolle von Spannungsrelaxation und Defektbildung in metamorphen III-V Halbleiterheterostrukturen für hocheffiziente Solarzellen*. Dissertation, Christian-Albrechts-Universität Kiel, 2009
- [226] BOGUMILOWICZ, Y. ; HARTMANN, J. M. ; CIPRO, R. ; ALCOTTE, R. ; MARTIN, M. ; BASSANI, F. ; MOEYAERT, J. ; BARON, T. ; PIN, J. B. ; BAO, X. ; YE, Z. ; SANCHEZ, E.: Anti-phase boundaries–Free GaAs epilayers on “quasi-nominal” Ge-buffered silicon substrates. In: *Applied Physics Letters* 107 (2015), Nr. 21, S. 212105. <http://dx.doi.org/10.1063/1.4935943>
- [227] HARTMANN, J. M. ; ABBADIE, A. ; CHERKASHIN, N. ; GRAMPEIX, H. ; CLAVELIER, L.: Epitaxial growth of Ge thick layers on nominal and 6 degree off Si(001); Ge surface passivation by Si. In: *Semiconductor Science and Technology* 24 (2009), Nr. 5, S. 055002. <http://dx.doi.org/10.1088/0268-1242/24/5/055002>

-
- [228] CHOI, D. ; HARRIS, J. S. ; KIM, E. ; MCINTYRE, P. C. ; CAGNON, J. ; STEMMER, S.: High-quality III–V semiconductor MBE growth on Ge/Si virtual substrates for metal-oxide-semiconductor device fabrication. In: *Journal of Crystal Growth* 311 (2009), Nr. 7, 1962–1971. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2008.09.138>
- [229] GROENERT, M. E. ; LEITZ, C. W. ; PITERA, A. J. ; YANG, V. ; LEE, H. ; RAM, R. J. ; FITZGERALD, E. A.: Monolithic integration of room-temperature cw GaAs/AlGaAs lasers on Si substrates via relaxed graded GeSi buffer layers. In: *Journal of Applied Physics* 93 (2003), Nr. 1, S. 362. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1525865>
- [230] LIU, H. ; WANG, T. ; JIANG, Q. ; HOGG, R. ; TUTU, F. ; POZZI, F. ; SEEDS, A.: Long-wavelength InAs/GaAs quantum-dot laser diode monolithically grown on Ge substrate. In: *Nature Photonics* 5 (2011), Nr. 7, S. 416–419. <http://dx.doi.org/10.1038/NPHOTON.2011.120>
- [231] VOLZ, K. ; BEYER, A. ; WITTE, W. ; OHLMANN, Jens ; NÉMETH, Igor ; KUNERT, Bernardette ; STOLZ, Wolfgang: GaP-nucleation on exact Si (001) substrates for III/V device integration. In: *Journal of Crystal Growth* 315 (2011), Nr. 1, 37–47. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2010.10.036>
- [232] SKIBITZKI, O. ; PASZUK, A. ; HATAMI, F. ; ZAUMSEIL, P. ; YAMAMOTO, Y. ; .. SCHUBERT, M. ; TRAMPERT, A. ; TILLACK, B. ; TED M., W. ; HANNAPPEL, T. ; SCHROEDER, T.: Lattice-engineered SiGe buffer on Si(001) for GaP integration. In: *Journal of Applied Physics* 115 (2014), Nr. 10, S. 103501. <http://dx.doi.org/10.1063/1.4864777>
- [233] 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 (1918), 98–100. <http://eudml.org/doc/59018>

Nomenklatur

Symbole (römisch)

a_f	Gitterkonstante des aufwachsenden Films
a_{Ge}	Gitterkonstante Germanium (Volumenwert)
a_{\perp}	Gitterkonstante (out-of-plane)
a_{\parallel}	Gitterkonstante (in-plane)
a_s	Gitterkonstante des Substrats
a_{Si}	Gitterkonstante Silizium (Volumenwert)
$a_{f,\parallel}$	gemessene in-plane Gitterkonstante des aufwachsenden Films
$a_{s,\parallel}$	gemessene in-plane Gitterkonstante des Substrats
\vec{b}	Burgersvektor
b	Betrag des Burgersvektor
C	Elastische Konstante
c_i	Konzentration an i
D_A	doppel-atomare Stufe des Typs A
D_B	doppel-atomare Stufe des Typs B
d_{hkl}	Netzebenenabstand
$d_{Schicht}$	Dicke der Schicht
$d_{T,i}$	Terrassenbreite einer Si- oder Ge-Oberfläche
d_c	kritische Schichtdicke
e	Elementarladung
E_B	Bindungsenergie im Festkörper
E_F	Energie des Fermi-niveaus
E_g	Energie der Bandlücke

E_i	Energie des Niveaus i
E_k	Energie des Niveaus k
E_L	Energie des Leitungsbands
E_{phot}	Energie eines Photons
E_V	Energie des Valenzbands
E_{el}	Verspannungsenergie
f	Gitterfehlpassung
\vec{G}	reziproker Gittervektor
G_{\perp}	reziproke Gitterkoordinate (out-of-plane)
h	Plancksches Wirkungsquantum
h, k, l	Millersche Indizes
h_{APB}	Höhe der Antiphasengrenze
H_{DS}	Höhe einer doppel-atomaren Stufe
H_{ES}	Höhe einer mono-atomaren Stufe
I_E	Emissionsstrom (des Elektronenstrahlverdampfers)
\vec{K}	Streuvektor
\vec{k}_0	Wellenvektor (einfallend)
l_D	Diffusionslänge
m	Masse
N	Nachweisgrenze
n	Messpunkt
p	Druck
P_{Max}	maximale Leistung
R_i	Wachstumsrate von Si,Ge,Sb,C,GaAs
R_{rms}	quadratische Rauheit (rms)
R	Relaxationsgrad

S_A	mono-atomare Stufe des Typs A
S_B	mono-atomare Stufe des Typs B
t_C	Dauer der Kohlenstoffbeschichtung
T_{Mani}	Manipulator-temperatur
T_{Pyro}	pyrometer-bestimmte Temperatur
T_{Sub}	Substrattemperatur
U_b	Beschleunigungsspannung
V_{BEP}	BEP-Verhältnis von Arsen zu Gallium
x_c	Schwerpunkt

Symbole (griechisch)

$\alpha_{Ge}(T)$	thermischer Ausdehnungskoeffizient für Ge
$\alpha_{Si}(T)$	thermischer Ausdehnungskoeffizient für Si
β	Einfallswinkel
δ	Gangunterschied
$\Delta\gamma$	Differenz der Oberflächenenergien
δ_{kipf}	Substratverkipfung
ϵ_{Gitter}	Verspannung infolge der Gitterfehlpassung
$\epsilon_0(T)$	temperaturabhängige Verspannung
$\epsilon_{th}(T)$	thermisch induzierte Verspannung
γ_f	Oberflächenenergie des aufwachsenden Films
γ_i	Oberflächenenergie der Grenzfläche zwischen Substrat und Schicht
γ_s	Oberflächenenergie des Substrats
l_{dicke}	Halbwertsbreite (Beitrag der Schichtdicke)
l_{intr}	Halbwertsbreite (intrinsischer Beitrag)
l_{kipf}	Halbwertsbreite (Beitrag der Gitterverkipfung)
l_{kr}	Halbwertsbreite (Beitrag Probenkrümmung)
l_{mess}	Halbwertsbreite (gemessen)
l_{mono}	Halbwertsbreite (Beitrag des Monochromators)
l_{zerr}	Halbwertsbreite (Beitrag der Gitterverzerrung)
λ	Wellenlänge
λ_{imfp}	mittlere freie Weglänge
Λ	Bedeckung
μ_f	chemisches Potential des aufwachsenden Films
μ_s	chemisches Potential des Substrats
ν	Frequenz elektromagnetischer Strahlung

ϕ	azimutale Ausrichtung einer Probe (XRD)
φ	Beugungswinkel (TEM)
Φ_{Ana}	Austrittsarbeit des Analysators
ϕ_{mis}	azimutale Orientierung des Fehlschnitts
Φ_{Pr}	Austrittsarbeit der Probe
ρ	Dichte
$\rho_{Dot.}$	spezifischer Widerstand (infolge von Dotierung)
σ	thermische Leitfähigkeit
Θ	Einfallswinkel (Röntgenstrahlung)

Abbildungsverzeichnis

1.1	Solares Spektrum AM1,5	2
1.2	Bandlücke gegen Gitterkonstante für III-V-Verbindungen . .	4
1.3	Schematischer Aufbau von Tandemsolarzellen	6
1.4	Detaillierter Kontourplot für eine Tandemsolarzelle mit zwei pn-Übergängen unter unkonzentrierter, global terrestrischer Bestrahlung (AM1,5) nach [32]	7
2.1	Wachstumsbestimmende Prozesse bei der Epitaxie	11
2.2	Wachstumsmoden für Heteroepitaxie.	12
2.3	Schematische Darstellung der Verspannung heteroepitaktischer Schichten.	14
2.4	Antiphasengrenzen beim Wachstum von GaAs auf Ge(001). .	16
3.1	RHEED: Relaxationsprozesses von Ge auf Si(111).	19
3.2	Schematische Darstellung einer vizinalen Oberfläche mit doppel- atomarer Stufung.	26
3.3	Vizinale 2x1-rekonstruierte Oberfläche (gültig für Si(001) und Ge(001)).	28
4.1	Oberflächenstrukturen und zugehörige RHEED-Beugungsbilder.	31
4.2	Schematische Konstruktion der Ewaldkugel	32
4.3	Schematisches RHEED-Beugungsbild einer vizinalen Ge oder Si (001)-orientierten Oberfläche.	33
4.4	Schematische Darstellung der BRAGG-Bedingung	34
4.5	Verwendete Messtypen zur Röntgenbeugung (XRD).	36
4.6	Bestimmung der azimuthalen Orientierung des Fehlschnitts ϕ_{mis} .	38
4.7	Schematischer Aufbau eines Rasterelektronenmikroskops. . .	42
4.8	Rasterkraftmikroskopie: Aufbau und Lennard-Jones-Potential.	46
4.9	Anregungsprozess XPS	47
4.10	Mittlere freie Weglänge von Elektronen in einem Festkörper .	49
5.1	VG 80 S III-V MBE-System.	53
5.2	DCA S 1000 MBE-System.	54
5.3	Temperaturkalibration für VG 80 S und DCA S 1000.	55
5.4	RHEED-Oberflächenpräparation	60
5.5	Vergleich der Wachstumsvarianten: $\Theta - 2\Theta - Messung$	63
5.6	Einfluss des Substratfehlschnitts: $\Theta - 2\Theta - Messung$	65
5.7	Vergleich der Defektdichten aller mit SME-hergestellten Proben.	67
5.8	XPS Untersuchung der Ge-Oberfläche.	68
5.9	SIMS-Tiefenprofil (200 nm von der Oberfläche ausgehend) zweier Ge-Schichten mit SME hergestellt.	71
5.10	SME-Ge-Schicht zur Untersuchung der Oberfläche mit STM.	73
5.11	STM-Untersuchung einer SME-hergestellten Ge-Oberflächen.	74

5.12	RHEED-Aufnahmen der Probe SME600FD in $[-110]$ - bzw. $[1-10]$ -Richtung.	77
5.13	Optimierter Prozesslauf zur CME nach TETZLAFF [99].	80
5.14	Probe CME(F)50 nach der CME: RHEED und AFM.	82
5.15	Temperung von CME(F)50: $\Theta - 2\Theta - Messung$	83
5.16	RHEED-Aufnahmen in $[-110]$ - bzw. $[1-10]$ -Richtung der Probe CME(F)50-150 nach dem Ge-Wachstum.	84
5.17	SEM- und AFM-Aufnahmen der Probe CME(F)50-150	86
5.18	RHEED- und AFM-Aufnahme der Probe CME(F)80-150.	87
5.19	$\Theta - 2\Theta$ -Messungen der Probe CME(F)50-150 und CME(F)80-150.	88
6.1	RHEED-Aufnahmen der Oberflächenpräparation VS670F.	96
6.2	RHEED-Aufnahmen des GaAs-Wachstums (Probe VS630F-G3).	99
6.3	ω -Messung um den GaAs(002)-Reflex der GaAs-Schichten auf virtuellen Ge-Substraten.	100
6.4	TEM-Querschnittsaufnahmen bei 25.000-facher Vergrößerung des Systems GaAs/Ge/Si (1).	104
6.5	TEM-Querschnittsaufnahmen bei 25.000-facher Vergrößerung des Systems GaAs/Ge.	105
6.6	TEM-Querschnittsaufnahmen bei 100.000-facher Vergrößerung des Systems GaAs/Ge.	107
6.7	TEM-Querschnittsaufnahmen bei 25.000-facher Vergrößerung des Systems GaAs/Ge/Si (2).	109
6.8	Boxplot der Auswertung zu Antiphasengrenzen in GaAs.	111
6.9	Photolumineszenz-Spektren der Probe VS630F-G3 bei $T = 5 K$	113
6.10	Photolumineszenz-Spektren der Probe VS630-G3 bei $T = 5 K$	114
6.11	Diffusionsprofile von Ge in GaAs und von Ga in Ge aus unerschöpflicher Quelle.	116
7.1	REM-Aufnahmen der in Kapitel 6 untersuchten GaAs-Schichten.	136
7.2	TEM-Aufnahmen im Querschnitt der GaAs-Schichten auf virtuellen Ge-Substraten.	137

Tabellenverzeichnis

3.1	Materialparameter von Si, Ge und GaAs bei $T = 23^\circ C$. [23]	25
5.1	Parameter der thermischen Reinigung in der VG 80 S.	58
5.2	Schematischer Prozessablauf zur Herstellung der untersuchten Ge-Schichten für Kapitel 5.2	62
5.3	Probenübersicht der virtuellen Ge-Substrate hergestellt durch den zweistufigen Wachstumsprozess.	78
5.4	Übersicht der mit CME hergestellten virtuellen Ge-Substrate.	81
6.1	Reinigung virtueller Ge-Substrate.	95
6.2	Prozessparameter der GaAs-Epitaxie auf virtuellen Ge-Substraten.	98
6.3	Defektdichte der GaAs-Schichten bestimmt aus der Halbwertsbreite von ω -Messungen um den GaAs(002)-Reflex.	102
7.1	Probenübersicht I der in Kapitel 5.2 verwendeten Proben. . .	130
7.2	Probenübersicht II der in Kapitel 5.2 verwendeten Proben. .	131
7.4	Probenübersicht I der in Kapitel 5.3 verwendeten Proben. . .	132
7.5	Probenübersicht II der in Kapitel 5.3 verwendeten Proben. .	133
7.6	Probenübersicht I der in Kapitel 6 verwendeten Proben. . .	134
7.7	Probenübersicht II der in Kapitel 6 verwendeten Proben. . .	135

Publikationsverzeichnis

Artikel in Fachzeitschriften

- Katiyar, A., Grimm, A., Aluguri, R., Bar, R., Wietler, T. F., Osten, H. J., Ray, S. K.: *Optical Emission Characteristics of Compressively Strained Ge Films*; 12th International Conference on Fiber Optics and Photonics, OSA Technical Digest (online) (Optical Society of America, 2014), paper S5A.65; ISBN: 978-1-55752-882-7
- Grimm, A., Fissel, A., Bugiel, E., Wietler, T. F.: *In situ observation of low temperature growth of Ge on Si(111) by Reflection High Energy Electron Diffraction*; Applied Surface Science 370 (2016), 40-48; DOI: 10.1016/j.apsusc.2016.02.144
- Katiyar, A., Grimm, A., Bar, R., Schmidt, J., Wietler, T. F., Osten, H. J., Ray, S. K.: *Room Temperature Direct Band Gap Emission Characteristics of Surfactant Mediated Grown Compressively Strained Ge Films*; Nanotechnology 27 (2016), 435204; DOI: 10.1088/0957-4484/27/43/435204

Konferenzbeiträge

- Grimm, A., Kähler, L. C., Wietler, T. F.: *Surface preparation of virtual Germanium substrates on Si(001) via RHEED*; LNQE Nanoday 2015, Hannover, 01.10.2015
- Grimm, A., Kähler, L. C., Wietler, T. F.: *Surface preparation of virtual Germanium substrates on Si(001) via RHEED*; Deutscher MBE-Workshop, Paderborn, 21.09. - 22.09.2015
- Grimm, A., Fissel, A., Bugiel, E., Osten, H. J., Wietler, T. F.: *In situ observation of low temperature growth of Ge on Si(111) via RHEED*; 5th european conference on crystal growth (ECCG5), Bologna, Italien, 09.09. - 11.09.2015
- Grimm, A., Katiyar, A., Ray, S. K., Osten, H. J., Wietler, T. F.: *Room Temperature Photoluminescence of Strained Ge-layers*; Engineering of Functional Interfaces (EnFI), Hannover, 06.07. - 07.07.2015
- Grimm, A., Fissel, A., Bugiel, E., Osten, H. J., Wietler, T. F.: *In situ observation of low temperature growth of Ge on Si(111) via RHEED*; SPA-LEED Workshop, Hannover, 28.05. - 29.05.2015
- Grimm, A., Katiyar, A., Ray, S. K., Osten, H. J., Wietler, T. F.: *Room Temperature Photoluminescence of Strained Ge-layers*; LNQE Nanoday 2014, Hannover, 01.10.2014

- Katiyar, A., Grimm, A., Rakesh, A., Bar, R., Wietler, T. F., Osten, H. J., Ray, S. K.: *Optical Emission Characteristics of Compressively Strained Ge Films*; 12th International Conference on Fiber Optics and Photonics, IIT Kharagpur, India, 13.12 - 16.12.2014
- Grimm, A., Fissel, A., Wietler, T. F.: *In situ observation of epitaxial growth of Ge on Si(111)*; Deutscher MBE-Workshop, Dresden, 30.09. - 01.10.2013
- Grimm, A., Fissel, A., Wietler, T. F.: *In situ observation of epitaxial growth of Ge on Si*; 7th International Nanoscience Student Conference (INASCON), London, Vereinigtes Königreich, 19.08. - 22.08.2013
- Grimm, A., Schwendt, D., Osten, H. J.: *Structural investigation of epitaxial high-k gate dielectrics*; Dresden Microelectronics Academy, Dresden, 03.09. - 08.09.2012
- Grimm, A., Schwendt, D., Osten, H. J.: *Structural investigation of epitaxial high-k gate dielectrics*; Deutscher MBE-Workshop, Berlin, 05.10. - 06.10.2011



Curriculum Vitae

Andreas Grimm
geboren am 15.02.1987
in 25746 Heide

- seit 10 2013 Wissenschaftl. Mitarbeiter, Institut für Materialien
und Bauelemente der Elektronik,
Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover
- 04 2013 - 03 2016 Georg Christoph Lichtenberg Stipendiat,
Hannover School for Nanotechnology
- 10 2011 - 10 2013 Studium der Nanotechnologie, Gottfried Wilhelm Leibniz
Universität Hannover, Abschluss Master of Science:
*Einfluss der Wachstumstemperatur auf
die Epitaxie von Ge auf Si*
- 10 2008 - 01 2012 Studium der Nanotechnologie, Gottfried Wilhelm Leibniz
Universität Hannover, Abschluss Bachelor of Science:
*Charakterisierung des Spannungseinflusses
auf Seltene Erden Oxide*
- 08 2007 - 05 2008 Zivildienst, AWO Schleswig Holstein gGmbH
- 02 1999 - 07 2007 Allgemeine Hochschulreife,
Werner Heisenberg Gymnasium Heide (Holstein)

Danksagung

Vielen Dank an das LAND NIEDERSACHSEN für das Georg Christoph Lichtenberg Stipendium und an die GRADUIERTENAKADEMIE für das Promotionsabschlusstipendium. Beide Förderungen haben mir das Erstellen dieser Dissertation ermöglicht.

An dieser Stelle möchte ich mich bei meinen Referenten Prof. Dr.-Ing. Tobias F. Wietler und Prof. Dr. Christoph Tegenkamp für die Übernahme der Gutachtertätigkeit bedanken. Gleichmaßen bedanke ich mich bei meiner Prüfungskommission um Prof. Dr. H. Jörg Osten, der den Vorsitz der Prüfungskommission übernommen hat, sowie Prof. Dr. Herbert Pfnür und Prof. Dr.-Ing. Tobias F. Wietler.

Eine solche Arbeit ist das Ergebnis jahrelanger Arbeit, die zusammen mit Kollegen und Freunden geleistet wird. Daher möchte ich mich herzlich bei Tobias für seinen Rat, seine Unterstützung, unzählige Erklärungen und seinen Optimismus bedanken. Wissenschaftliches Arbeiten habe ich am INSTITUT FÜR MATERIALIEN UND BAUELEMENTE DER ELEKTRONIK gelernt. Genauso die Zusammenarbeit mit Kollegen*innen und den respektvollen Umgang miteinander. Deshalb bedanke ich bei allen Kollegen*innen für die Zusammenarbeit, die große Unterstützung und das ein oder andere gemeinsame Bier in den letzten drei Jahren.

Darüber hinaus möchte ich mich bei Dr. Fritz Schulze-Wischeler stellvertretend für die HANNOVER SCHOOL FOR NANOTECHNOLOGY für seine Unterstützung bedanken. Der interdisziplinäre Austausch mit anderen Stipendiaten der HSN hat meiner Doktorandenzeit eine weitere wertvolle Ebene hinzugefügt. Gleiches gilt für meine Kollegen*innen vom INDIAN INSTITUTE OF KHARAGPUR, Indien, die mir einen unschätzbaren Einblick in ihr Leben und ihre Kultur gegeben haben. Meinen Aufenthalt als Gastwissenschaftler am IIT KGP ist durch den DEUTSCHEN AKADEMISCHEN AUSTAUSCHDIENST durch ein Stipendium im Rahmen des Programms A NEW PASSAGE TO INDIA ermöglicht worden. Insbesondere gilt mein Dank Dr. Bala Ramani für die organisatorische Hilfe.

Zum Schluss sage ich Danke! Für die Unterstützung durch meine Familie und Freunde!

