

Molekularstrahlepitaxie und Charakterisierung unverspannter  
Silizium-Germanium-Zinn-Legierungen auf virtuellem Germanium-  
Substrat

Von der Fakultät Informatik, Elektrotechnik und Informationstechnik der  
Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde eines Doktor-Ingenieurs  
(Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von

Daniel Schwarz

aus Heilbronn

Hauptberichter: Prof. Dr. habil. Jörg Schulze

Mitberichter: Prof. Dr. Peter Michler

Tag der mündlichen Prüfung: 3. März 2022

Institut für Halbleitertechnik der Universität Stuttgart

2022



*Für meine Frau Natascha und unsere wunderbaren Kinder*



Inhaltsverzeichnis

<b>Abkürzungsverzeichnis</b>	<b>ix</b>
<b>Variablenverzeichnis</b>	<b>xiii</b>
<b>Natur- und Materialkonstanten</b>	<b>xvii</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>xix</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>xxix</b>
<b>Zusammenfassung</b>	<b>xxxiii</b>
<b>Abstract</b>	<b>xxxv</b>
<b>1. Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub>-Halbleiter-Heterostrukturen in der Nanoelektronik</b>	<b>37</b>
1.1. Historische Relevanz von Heterostrukturen	37
1.2. Gruppe-IV-Halbleiter-Heterostrukturen	41
1.3. Si <sub>x</sub> Ge <sub>1-x-y</sub> Sn <sub>y</sub> -Epitaxie anderer Forschungsgruppen	42
1.4. Zielsetzung und Struktur der Arbeit	45
<b>2. Technologische Grundlagen</b>	<b>47</b>
2.1. Grundlegendes Merkmal der Heteroepitaxie	47
2.2. Sn-Segregation	50
2.3. Methoden zur Charakterisierung von Halbleiterkristallen	53
2.3.1. Röntgendiffraktometrie	53
2.3.2. Rutherford Backscattering Spektroskopie	57
2.3.3. Transmissionen-Elektronen-Mikroskopie	59
2.3.4. Energiedispersive Röntgenspektroskopie	60
2.4. I(U)-Charakterisierung von p(i)n-Dioden	61
2.5. C(U)-Charakterisierung von p(i)n-Dioden	65
2.6. Materialparameter von Si <sub>x</sub> Ge <sub>1-x-y</sub> Sn <sub>y</sub>	68
2.6.1. Bandstruktur von Si <sub>x</sub> Ge <sub>1-x-y</sub> Sn <sub>y</sub>	68
2.6.2. Relative Permittivität $\epsilon_r$	72
2.6.3. Effektive Massen im Leitungsband $m_L$	72
2.6.4. Effektive Massen im Valenzband $m_V$	74
2.6.5. Effektive Zustandsdichten im Leitungs- und Valenzband $N_L$ und $N_V$	75
2.7. Probenbezeichnungssystem	77

<b>3. Voruntersuchungen zur <math>\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y</math>-Epitaxie</b>	<b>79</b>
3.1. Das A-MBE-System	79
3.2. Epitaxie des virtuellen Ge-Substrats	84
3.3. Probleme und Aspekte der $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxie	89
3.3.1. Thesen zur $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ Epitaxie	89
3.3.2. Messung der Substrattemperatur mittels Infrarot-Kamera	89
3.3.3. $\text{Ge}_{1-z}\text{Sn}_z$ -Wachstumsexperimente	92
3.3.4. Fazit der Substrattemperaturmessung mittels MIR-Kamera	97
3.4. Erste $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxiearbeiten am IHT	98
3.5. Post-Epitaktische Temperaturstabilität von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$	109
3.5.1. Variation der Proben temperatur	109
3.5.2. Isotherme HT-XRD Analyse zur Untersuchung der Langzeitstabilität	117
3.6. Zusammenfassung der Voruntersuchungen	121
<b>4. Charakterisierung und Anpassung des MBE-Systems</b>	<b>123</b>
4.1. Bedingungen für das gitterangepasste Wachstum von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$	123
4.2. Homogenität der Molekularstrahlflüsse	125
4.2.1. Homogenität der Molekularstrahlflüsse Si und Ge	125
4.2.2. Homogenität des Molekularstrahlflusses Sn	126
4.2.3. Zusammenfassung der Homogenität der Molekularstrahlflüsse	128
4.2.4. Resultierende Abweichung der Gitteranpassung	129
4.3. Reproduzierbarkeit der Gitteranpassung.	131
4.3.1. Konditionierung des Si-ESVs	131
4.3.2. Konstanter QMS-Sollwert der Si-Regelung	133
4.3.3. Konstante Leistung des Si-ESVs	134
4.4. Verbesserung der Substrattemperaturregelung mittels MIR-Pyrometrie	135
4.4.1. Kenndaten des MIR-Pyrometers	135
4.4.2. Einstellung von Emissivität und Transmissivität	136
4.4.3. Einfahren der Regelung mittels MIR-Pyrometrie	138
<b>5. Optimierung der Epitaxie von auf Ge gitterangepasstem <math>\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y</math></b>	<b>145</b>
5.1. Schichtaufbau und Epitaxieparameter	145
5.2. Analyse der Kristallqualität mittels XRD	149
5.2.1. Substrattemperaturvariation der Probenteilerie 2-2.5Sn	149

5.2.2.	Substrattemperaturvariation der Probenreihe 2-5.0Sn	153
5.2.3.	Substrattemperaturvariation der Probenreihe 2-7.5Sn	157
5.2.4.	Substrattemperaturvariation der Probenreihe 2-10.0Sn	160
5.2.5.	Temperaturvariation der Probenreihe 2-12.5Sn	163
5.2.6.	Substrattemperaturvariation der Probenreihe 2-15.0Sn	167
5.3.	Analyse der Schichtzusammensetzung mittels RBS	171
5.4.	Analyse der Kristallqualität mittels TEM	174
5.5.	Analyse der Schichtzusammensetzung mittels TEM-EDXS	176
5.6.	Fazit der Substrattemperaturvariation	179
<b>6.</b>	<b>Epitaxie und Herstellung von <math>\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y</math>-Dioden</b>	<b>181</b>
6.1.	Epitaxie von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Homodioden	181
6.1.1.	Schichtaufbau und Epitaxie	181
6.1.2.	Analyse der Kristallqualität mittels XRD	186
6.1.3.	Analyse der Zusammensetzung mittels RBS	191
6.2.	Epitaxie von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Heterodioden	195
6.2.1.	Schichtaufbau und Epitaxie	195
6.2.2.	Analyse der Kristallqualität mittels XRD	198
6.2.3.	TEM-Analysen	201
6.2.4.	Analyse der Zusammensetzung mittels RBS	204
6.3.	Prozessequenz zur Herstellung von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Dioden	207
6.3.1.	Prozessequenz P1-SiGeSn-Homopin	208
6.3.2.	Vereinfachungen der Prozessequenz P2-SiGeSn-Heteropin	214
<b>7.</b>	<b>Materialcharakterisierung von auf Ge gitterangepasstem <math>\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y</math></b>	<b>215</b>
7.1.	I(U)-Charakterisierung von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Homodioden	215
7.1.1.	I(U)-Charakterisierung der Probe 3-5.0Sn-200C	216
7.1.2.	I(U)-Charakterisierung der Probe 3-7.5Sn-200C	217
7.1.3.	I(U)-Charakterisierung der Probe 3-10.0Sn-200C	218
7.1.4.	I(U)-Charakterisierung der Probe 3-12.5Sn-160C	218
7.1.5.	I(U)-Charakterisierung der Probe 3-15.0Sn-160C	220
7.1.6.	Zusammenfassung und Vergleich	220
7.2.	C(U)-Charakterisierung von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Homodioden	222
7.3.	Berechnung der indirekten Bandlücke $E_{g,\text{SiGeSn}}^L$	227

7.4.	I(U)-Charakterisierung von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Heterodioden	230
7.4.1.	I(U)-Charakterisierung der Probe 4-5.0Sn	230
7.4.2.	I(U)-Charakterisierung der Probe 4-7.5Sn	231
7.4.3.	I(U)-Charakterisierung der Probe 4-10.0Sn	232
7.4.4.	I(U)-Charakterisierung der Probe 4-12.5Sn	233
7.4.5.	I(U)-Charakterisierung der Probe 4-15.0Sn	234
7.4.6.	Zusammenfassung der I(U)-Charakterisierung der Probenserie 4	235
7.5.	C(U)-Charakterisierung von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Heterodioden	237
7.6.	Berechnung des Leitungs- und Valenzbandversatzes $\Delta E_L$ und $\Delta E_V$	241
7.7.	Ermittelte Materialparameter von auf Ge gitterangepasstem $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$	246
<b>8.</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>247</b>
8.1.	Fazit der erreichten Ziele	247
8.2.	Ausblick auf die künftige Funktionalisierung von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$	249
<b>A.</b>	<b>Maskensatz</b>	<b>251</b>
<b>B.</b>	<b>Proben- und Prozessübersicht</b>	<b>255</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>259</b>
	<b>Publikationsliste</b>	<b>265</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>269</b>
	<b>Eidesstattliche Erklärung</b>	<b>271</b>

## Abkürzungsverzeichnis

In der vorliegenden Arbeit wurden die folgenden chemischen Symbole und Summenformeln verwendet.

Al	Aluminium
Ar	Argon
B	Bor
BHF	Gepufferte Fluorwasserstoffsäure
BN	Bornitrid
C	Kohlenstoff
CF <sub>4</sub>	Tetrafluormethan. Gasförmiger Ätzreaktant zum plasmaunterstützten Ätzen von beispielsweise Halbleiterschichten wie Germanium
CHF <sub>3</sub>	Fluoroform. Gasförmiger Ätzreaktant zum plasmaunterstützten Ätzen von beispielsweise Siliziumdioxid
CO	Kohlenmonoxid
GaN	Verbindungshalbleiter bestehend aus den Elementen Gallium und Stickstoff
Ge	Germanium
Ge <sub>1-z</sub> Sn <sub>z</sub>	Legierungshalbleiter bestehend aus Germanium und Zinn mit ( $0 < x < 1$ )
GeO <sub>2</sub>	Germaniumdioxid
H <sub>2</sub>	Molekularer Wasserstoff
HBr	Bromwasserstoff. Gasförmiger Ätzreaktant zum plasmaunterstützten Ätzen von beispielsweise Silizium
HCl	Chlorwasserstoffsäure (auch Salzsäure), in dieser Arbeit stets mit einer Konzentration von 9 %
HF	Fluorwasserstoffsäure, in dieser Arbeit stets mit einer Konzentration von 2,5 %
HMDS	Hexamethyldisilazan
InGaAs	III/V Verbindungshalbleiter bestehend aus den Elementen Indium, Gallium und Arsen
InSb	Verbindungshalbleiter bestehend aus den den Elementen Indium und Antimon
N <sub>2</sub>	Molekularer Stickstoff (Distickstoff)
Sb	Antimon
Si	Silizium
Si <sub>1-w</sub> Ge <sub>w</sub>	Legierungshalbleiter bestehend aus Silizium und Germanium mit ( $0 < x < 1$ )

## Abkürzungsverzeichnis

---

Si <sub>28</sub>	Silizium-Isotop mit der Massenzahl 28
Si <sub>30</sub>	Silizium-Isotop mit der Massenzahl 30
SiO	Siliziumoxid
SiO <sub>2</sub>	Siliziumdioxid
Si <sub>x</sub> Ge <sub>1-x-y</sub> Sn <sub>y</sub>	Legierungshalbleiter aus Silizium, Germanium und Zinn mit $0 < x < 1$ und $0 < y < 1$
Sn	Zinn
SnCl <sub>4</sub>	Zinntetrachlorid, ein gasförmiger Präkursor aus Zinn und Chlor
SnD <sub>4</sub>	Gasförmiger Präkursor bestehend aus Zinn und Deuterium
SnF <sub>2</sub>	Zinnfluorid.
SnO <sub>2</sub>	Zinndioxid
Ti	Titan
TiO <sub>2</sub>	Titandioxid
ZnSe	Zinkselenid
α-Sn	Im Diamantgitter kristallisierende Phase des Zinns
β-Sn	Metallische Phase des Zinns

Desweiteren wurden in der vorliegenden Arbeit die folgenden Akronyme verwendet.

AFM	Atomic Force Microscopy (engl. für Rasterkraftmikroskopie, ein Verfahren zur Untersuchung der Oberflächenstruktur)
BSE	Backscattered Electrons (engl. für Rückstreuielektronen)
CMOS	Complementary Metal Oxide Semiconductor (engl. für komplementäre Metall-Oxid-Halbleiter-Technologie)
DI-Wasser	Deionisiertes Wasser
EDXS	Energy Dispersive X-ray Spectroscopy (engl. für energiedispersive Röntgenspektroskopie)
ESV	Elektronenstrahlverdampfer
FZJ	Forschungszentrum Jülich, Kooperationspartner des IHT im Rahmen der Arbeit
Ge-VS	Virtuelles Germanium-Substrat
HAXPES	Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy (engl. für harte Röntgen Photoelektronenspektroskopie)
HBT	Heterobipolartransistor
HZDR	Helmholtzzentrum Dresden Rossendorf, Kooperationspartner des IHT im Rahmen der Arbeit
ICP-RIE	Inductive Coupled Plasma Reactive Ion Etching (engl. für induktiv gekoppeltes plasmareaktives Ionenätzen)
IR	Infrarot
MBE	Molecular Beam Epitaxie (engl. für Molekularstrahlepitaxie)
MIR	Mittlerer Infrarotbereich ( $8 \mu\text{m} \leq \lambda \leq 13 \mu\text{m}$ )
ML	Monolage
MODFET	Modulationsdotierter Feldeffekttransistor
NIR	Nah-Infrarotbereich ( $800 \text{ nm} \leq \lambda \leq 2500 \text{ nm}$ )
PECVD	Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition (engl. für Plasmaunterstützte Gasphasenabscheidung)
QMS	Quadrupolmassenspektrometer
RBS	Rutherford Backscattering Spectroscopy (engl. für Rutherford-Rückstreuenspektroskopie)
RPCVD	Reduced Pressure Chemical Vapor Deposition (engl. für Niederdruck-Gasphasenabscheidung)
RSM	Reciprocal Space Map (engl. für reziproke Ortskarte, eine Darstellungsform von XRD-Ergebnissen)
TA	Thermischer Ausheilschritt, Prozessschritt zur Formierung des virtuellen Ge-Substrats

## Abkürzungsverzeichnis

---

TD	Threading Dislocation (engl. für Durchstoßverstetzung), eine Art von Defekt im Volumen eines Halbleiterkristalls , Thermische Desorption, Prozessschritt zur Entfernung von nativem Siliziumdioxid
TDD	Threading Dislocation Density (engl. für Durchstoßverstedungsdichte), Dichte an Durchstoßversetzungen pro Quadratcentimeter bei Betrachtung der Substratoberfläche
TEM	Transmissionselektronenmikroskopie
TEOS	Tetraethylorthosilikat. Flüssiger Präkursor, welcher mit einem Trägergas (hier Argon) zur plasmaunterstützten Gasphasenabscheidung von Siliziumdioxid verwendet wird)
VCSEL	Vertical-Cavity Surface Emitting Laser (engl. für Oberflächenemitter)
XRD	X-Ray Diffraction (engl. für Röntgendiffraktometrie)

## Variablenverzeichnis

In der vorliegenden Arbeit wurden die folgenden Variablen und Formelzeichen verwendet.

$a_{\parallel,A}$	Laterale Gitterkonstante eines Materials A
$a_{\parallel,B}$	Laterale Gitterkonstante eines Materials B
$a_{\perp}$	Vertikale Gitterkonstante eines Materials
$a_{0,A}$	Relaxierte Gitterkonstante eines Materials A
$a_{0,B}$	Relaxierte Gitterkonstante eines Materials B
$A_M$	Fläche der kreisförmigen Mesa einer Diode
$b_i$	Quadratischer Korrekturfaktor im Rahmen der linearen Interpolation von Materialparametern, auch Bowing-Parameter genannt.
$C_{Open}$	Kapazität einer Open-Struktur zur Messung der Kapazität der Aluminiumkontaktfläche einer Diode zum Substrat
$C_{Pad}$	Kapazität der Aluminiumkontaktfläche einer Diode zum Substrat, wird im Rahmen der Kapazitäts-Spannungs-Charakterisierung extrahiert
$C_S$	Sperrschichtkapazität einer Diode
$c_{Ge}$	Ge-Konzentration einer $Si_xGe_{1-x-y}Sn_y$ -Legierung
$c_{Si}$	Si-Konzentration einer $Si_xGe_{1-x-y}Sn_y$ -Legierung
$c_{Sn}$	Sn-Konzentration einer $Si_xGe_{1-x-y}Sn_y$ -Legierung
$d_{Ge-VS}$	Dicke des virtuellen Ge-Substrats
$d_{Si-Puffer}$	Dicke des standardgemäß aufgewachsenen Si-Puffers
$\Delta E_{FV,Ge}$	Lage des Ferminiveaus im p-Ge-Gebiet eines Ge-SiGeSn-pn-Übergangs
$\Delta E_{LF,SiGeSn}$	Lage des Ferminiveaus im n-SiGeSn-Gebiet eines Ge-SiGeSn-pn-Übergangs
$E_{g,A}$	Bandlücke eines Materials A
$E_{g,B}$	Bandlücke eines Materials B
$E_{g,SiGeSn}$	Bandlücke von $Si_xGe_{1-x-y}Sn_y$
$\Delta E_L$	Leitungsbandversatz, Abstand der Leitungsbandkanten der Materialien A und B am Heteroübergang A-B
$\Delta E_V$	Valenzbandversatz, Abstand der Valenzbandkanten der Materialien A und B am Heteroübergang A-B
$E_L$	Leitungsbandkante
$E_V$	Valenzbandkante
$f$	Frequenz der aufmodulierten Wechselspannung im Rahmen der Kapazitäts-Spannungs-Charakterisierung einer Diode
$F_{Ge}$	Germanium-Molekularstrahlfluss im Rahmen des Epitaxieprozesses

## Variablenverzeichnis

---

$F_{\text{Si}}$	Silizium-Molekularstrahlfluss im Rahmen des Epitaxieprozesses
$F_{\text{SiGeSn}}$	Summe der Molekularstrahlflüsse von Silizium, Germanium und Zinn als Gesamtfluss im Rahmen der Epitaxie von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$
$F_{\text{Sn}}$	Zinn-Molekularstrahlfluss im Rahmen des Epitaxieprozesses
$G$	Kapazität des für die Kapazitäts-Spannungs-Charakterisierung angenommenen Ersatzschaltbildes, Leitwert des für die Kapazitäts-Spannungs-Charakterisierung angenommenen Ersatzschaltbildes
$h$	Kristallebenenabstand
$I$	Der bei der Charakterisierung einer Diode gemessene Gleichstrom durch die Diode
$I_{\text{Emiss,ESV}}$	Emissionsstrom des Si-Elektronenstrahlverdampfers, Regelparameter zur Einstellung der Verdampferleistung
$I_{\text{max}}$	Durch Begrenzung eingestellter, maximaler Strom durch eine Diode während der Charakterisierung
$I_{\text{On}}/I_{\text{Off}}$	Verhältnis zwischen dem Strom im leitenden und im sperrenden Zustand einer Diode
$I_{\text{Off}}$	Gleichstrom einer Diode im sperrenden Zustand bei $U = -1 \text{ V}$
$I_{\text{On}}$	Gleichstrom einer Diode im leitenden Zustand bei $U = 1 \text{ V}$
$I_{\text{S}}$	Sperrsättigungsstrom einer Diode
$J_{-1\text{V}}$	Sperrstromdichte einer Diode bei einer angelegten Spannung von $U = -1 \text{ V}$
$M_L$	Entartungsfaktor eines Materials. Gibt die Anzahl der äquivalenten Leitungsbandminima eines Materials an
$m_L$	Effektive Masse eines Elektrons im Leitungsband eines Materials
$m_V$	Effektive Masse eines Lochs im Valenzband eines Materials
$m_l$	Effektive Masse eines Elektrons für longitudinale Bewegung im Leitungsband eines Materials
$m_{lh}$	Effektive Masse eines leichten Lochs im Valenzband (light hole)
$m_{hh}$	Effektive Masse eines schweren Lochs im Valenzband (heavy hole)
$m_t$	Effektive Masse eines Elektrons für transversale Bewegung im Leitungsband eines Materials
$n$	Konzentration eines Elements im Volumen des Halbleiterkristalls
$n_S$	Konzentration eines Elements auf der Epitaxieoberfläche
$N_{A,i-\text{Ge}}$	Hintergrunddotierung von Ge, welches mit der A-MBE aufgewachsen wurde
$N_{A,\text{Ge}}$	Akzeptorkonzentration einer Ge-Schicht
$N_{A,\text{SiGeSn}}$	Akzeptorkonzentration einer SiGeSn-Schicht
$N_{D,\text{SiGeSn}}$	Donatorkonzentration einer SiGeSn-Schicht

## Variablenverzeichnis

---

$N_V$	Effektive Zustandsdichte im Valenzband eines Materials
$N_L$	Effektive Zustandsdichte im Leitungsband eines Materials
$N_{TDD}$	Durchstoßversetzungsdichte
$q_x$	Reziproke laterale Gitterkoordinate
$q_z$	Reziproke vertikale Gitterkoordinate
$r_M$	Radius der kreisförmigen Mesa einer Diode
$R_{Ge}$	Wachstumsrate von Ge während des Epitaxieprozesses
$R_S$	Serienwiderstand einer Diode
$R_{Si}$	Wachstumsrate von Si während des Epitaxieprozesses
$R_{SiGeSn}$	Gesamtwachstumsrate von $Si_xGe_{1-x}Sn_y$ während des Epitaxieprozesses
$S$	Segregationskoeffizient
$t$	Dauer eines Prozessteilschritts während des Epitaxieprozesses
$t_{Kühl}$	Definierte Abkühldauer ab einer bestimmten Substrattemperatur im Rahmen eines Epitaxieprozesses
$T_{Quellen}$	Arbeitstemperatur der Molekularstrahlquellen
$t_{Rampe}$	Dauer einer Parameterrampe, also eines graduellen Anstiegs bzw. Abfalls des Parametersollwerts im Rahmen eines Epitaxieprozesses
$T_S$	Substrattemperatur während des Epitaxieprozesses
$\Delta T_S$	Differenz zwischen einer Substrattemperatur $T_S$ und dem eigentlichen Sollwert der Substrattemperatur $T_S$ im Rahmen eines Epitaxieprozesses, hervorgerufen durch bspw. Überhitzen
$T_{S,Kühl}$	Substrattemperatur, welche im Rahmen eines Epitaxieprozesses durch Abkühlen erreicht werden soll
$\Delta T_{S,Kühl}$	Differenz zwischen einer Substrattemperatur $T_{S,Kühl}$ und dem eigentlichen Sollwert der Substrattemperatur $T_S$ im Rahmen eines Epitaxieprozesses
$\Delta T_{S,o}$	Oberer Schwellwert einer Zweipunktregelung zur Regelung der Substrattemperatur im Rahmen eines Epitaxieprozesses
$\Delta T_{S,u}$	Unterer Schwellwert einer Zweipunktregelung zur Regelung der Substrattemperatur im Rahmen eines Epitaxieprozesses
$U$	An eine Diode zur Charakterisierung angelegte Gleichspannung
$\Delta U$	Schrittweite der zur Charakterisierung an eine Diode angelegten Spannung
$u_{AC}$	Im Rahmen der Kapazitäts-Spannungs-Charakterisierung einer Diode auf eine Gleichspannung aufmodulierte Wechselspannung
$U_{bi}$	Built-In-Spannung eines pn-Übergangs
$U_{Dn}$	Diffusionsspannung im n-Gebiet eines pn-Übergangs
$U_{Dp}$	Diffusionsspannung im p-Gebiet eines pn-Übergangs

## Variablenverzeichnis

---

$U_M$	Umfang der kreisförmigen Mesa einer Diode
$X_{\min}$	Channeling-Verhältnis im Rahmen der RBS-Analyse
$x_{p,Ge}$	Weite der Raumladungszone im p-Ge-Gebiet eines Ge-SiGeSn-pn-Übergangs
$x_{n,SiGeSn}$	Weite der Raumladungszone im n-SiGeSn-Gebiet eines Ge-SiGeSn-pn-Übergangs
$2\theta$	Winkel zwischen ein- und ausfallender Röntgenstrahlung bei der XRD-Analyse
$\varepsilon_{\parallel}$	Laterale Verspannung einer epitaktischen Schicht
$\varepsilon_{r,Ge}$	Relative Permittivität von Ge
$\varepsilon_{r,Si}$	Relative Permittivität von Si
$\varepsilon_{r,Sn}$	Relative Permittivität von Sn
$\varepsilon_{r,SiGeSn}$	Relative Permittivität von SiGeSn
$\epsilon$	Emissivität eines Materials; wird für die Einstellung eines Pyrometers benötigt.
$\eta$	Idealitätsfaktor einer Diode, es gilt: $1 \leq \eta \leq 2$
$\lambda_{Cu\ K-\alpha}$	Wellenlänge der Cu K- $\alpha$ Röntgenstrahlung
$\rho$	Spezifischer Schichtwiderstands eines für die Epitaxie verwendeten Si-Substrats
$\omega$	Einfallswinkel der Röntgenstrahlung bei der XRD-Analyse
$\mu$	Verhältnis der Elastizitätskonstanten $C_{11}$ und $C_{12}$

## Natur- und Materialkonstanten

In der vorliegenden Arbeit wurden die nachfolgenden Natur- und Materialkonstanten verwendet. Die Daten wurden dabei den rechtsseitig angegebenen Quellen entnommen.

Boltzmann-Konstante	: $k_B = 1,380658 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$	[1]
Elektrische Feldkonstante	: $\epsilon_0 = 8,854187817 \cdot 10^{-12} \text{ As} \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$	[1]
Elementarladung	: $q = 1,60217733 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	[1]
Ruhemasse des Elektrons	: $m_e = 9,1093897 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$	[1]
Indirekte Bandlücke von Ge ( $T = 300 \text{ K}$ )	: $E_{g,\text{Ge}} = 0,660 \text{ eV}$	[2]
Elektronenaffinität von Ge ( $T = 300 \text{ K}$ )	: $\chi_{\text{SiGeSn}} = 4,0 \text{ eV}$	[3]
Effektive Masse im Ge-Leitungsband ( $T = 300 \text{ K}$ )	: $m_{L,\text{Ge}} = 0,220$	[4]
Effektive Masse im Si-Leitungsband ( $T = 300 \text{ K}$ )	: $m_{L,\text{Si}} = 0,372$	[4]
Effektive Masse im Sn-Leitungsband ( $T = 300 \text{ K}$ )	: $m_{L,\text{Sn}} = 0,024$	[5]
Effektive Masse im Ge-Valenzband ( $T = 300 \text{ K}$ )	: $m_{V,\text{Ge}} = 0,590$	[6]
Effektive Masse im Si-Valenzband ( $T = 300 \text{ K}$ )	: $m_{V,\text{Si}} = 0,294$	[6]
Effektive Masse im Sn-Valenzband ( $T = 300 \text{ K}$ )	: $m_{V,\text{Sn}} = 0,058$	[7]
Effektive Zustandsdichte im Ge- Leitungsband ( $T = 300 \text{ K}$ )	: $N_{L,\text{Ge}} = 1,04 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$	[2]
Effektive Zustandsdichte im Si- Leitungsband ( $T = 300 \text{ K}$ )	: $N_{L,\text{Si}} = 2,8 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$	[2]
Effektive Zustandsdichte im Ge- Valenzband ( $T = 300 \text{ K}$ )	: $N_{V,\text{Ge}} = 6,0 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	[2]
Effektive Zustandsdichte im Si- Valenzband ( $T = 300 \text{ K}$ )	: $N_{V,\text{Si}} = 1,03 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$	[2]

## Natur- und Materialkonstanten

---

Gitterkonstante Ge ( $T = 300$ K)	: $a_{0,\text{Ge}} = 5,64613 \cdot 10^{10}$ m	[2]
Gitterkonstante Si ( $T = 300$ K)	: $a_{0,\text{Si}} = 5,43095 \cdot 10^{10}$ m	[2]
Gitterkonstante Sn ( $T = 300$ K)	$a_{0,\text{Si}} = 5,43095 \cdot 10^{10}$ m	[2]
Intrinsische Ladungsträgerdichte in Ge ( $T = 300$ K)	: $n_{i,\text{Ge}} = 2,4 \cdot 10^{13}$ cm <sup>-3</sup>	[2]
Intrinsische Ladungsträgerdichte in Si ( $T = 300$ K)	: $n_{i,\text{Si}} = 1,45 \cdot 10^{10}$ cm <sup>-3</sup>	[2]
Relative Dielektrizitätszahl Ge	: $\epsilon_{r,\text{Ge}} = 15,8$	[8]
Relative Dielektrizitätszahl Si	: $\epsilon_{r,\text{Si}} = 11,7$	[8]
Relative Dielektrizitätszahl Sn	: $\epsilon_{r,\text{Sn}} = 24,0$	[9]
Elastizitätskonstanten von Ge	: $C_{11} = 1,289 \cdot 10^{11}$ Pa	[10]
( $T = 300$ K)	: $C_{12} = 4,830 \cdot 10^{10}$ Pa	[10]

---

**Abbildungsverzeichnis**

Abb. 1-1:	Übersicht der Arten von Heteroübergängen (Eigene Darstellung, vgl. [2, S. 58]).	38
Abb. 1-2:	Banddiagramm einer exemplarischen Heterostruktur des Typs I.	39
Abb. 2-1:	Schematische Darstellung der drei möglichen Wachstumsmodi der Heteroepitaxie, a) Pseudomorph verspannt, b) Teilrelaxiert, c) Vollständig Relaxiert. (Eigene Darstellung nach [40] Bild 13.19)	48
Abb. 2-2:	Schematische Darstellung der möglichen Versetzungslinien bei der Heteroepitaxie. a) Linienversetzungen b) Durchstoßversetzungen (Eigene Darstellung nach Fig. 2.4 in [41])	48
Abb. 2-3:	Schematische Darstellung der Anlagerung eines Adatoms an einer Kristallstufe.	50
Abb. 2-4:	Schematische Darstellung des Überwachsens eines eingebauten Adatoms mit einer neuen Kristallstufe.	51
Abb. 2-5:	Schematische Darstellung des segregierten Adatoms.	51
Abb. 2-6:	Exemplarisches RSM einer Si-Ge-Ge <sub>1-z</sub> Sn <sub>z</sub> -Heterostruktur.	55
Abb. 2-7:	Schematische Darstellung der RSM-Reflexform und der daraus möglichen Aussagen über die makroskopische Kristallstruktur (Grafik entnommen aus [40] S. 480)	56
Abb. 2-8:	Exemplarisches 2 $\theta$ -Spektrum ohne Anzeichen von Polykristallinität	57
Abb. 2-9:	Exemplarisches RBS-Spektrum einer Si <sub>x</sub> Ge <sub>1-x-y</sub> Sn <sub>y</sub> -Schicht. Das Random-Signal (durchgezogene Linie) eignet sich zur Analyse der Zusammensetzung. Das Channeling-Signal (Strichlinie) eignet sich zur Bewertung der Kristallqualität.	58
Abb. 2-10:	Exemplarische TEM-Aufnahme einer relaxierten Ge-Schicht auf einem Si-Substrat.	60
Abb. 2-11:	Exemplarische I(U)-Charakteristik einer Ge-Diode des Typs <i>pin</i> mit $r_M = 5 \mu\text{m}$ der Probe <i>3-0.0Sn-GeRef</i>	62
Abb. 2-12:	Exemplarische I(U)-Charakteristik einer Ge-Diode des Typs <i>pin</i> mit $r_M = 5 \mu\text{m}$ der Probe <i>3-0.0Sn-GeRef</i>	64
Abb. 2-13:	Unterschied zwischen der Dioden-Struktur (links) und der Open-Struktur (rechts) (Quelle der Grafik: Abb. 6.3 in [46]).	66
Abb. 2-14:	Bandstrukturen der Legierungselemente Si, Ge und Sn nach Moontragoon et al. (Grafik entnommen aus [21]).	68
Abb. 2-15:	Legierungsdiagramm der Bandlücke von Si <sub>x</sub> Ge <sub>1-x-y</sub> Sn <sub>y</sub> in Abhängigkeit der Si-Konzentration $c_{\text{Si}}$ und Sn-Konzentration $c_{\text{Sn}}$ . (Daten zur Berechnung entnommen aus [21])	70

Abb. 2-16:	Berechneter Verlauf der Bandlücken $E_{g,\text{SiGeSn}}^L$ , $E_{g,\text{SiGeSn}}^X$ und $E_{g,\text{SiGeSn}}^F$ in Abhängigkeit der Sn-Konzentration $c_{\text{Sn}}$ von auf Ge gitterangepasstem $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ .	71
Abb. 2-17:	Erläuternde Grafik des Probenbezeichnungssystems	77
Abb. 3-1:	a) Seitenansicht des verwendeten A-MBE-Systems, b) Blick in die Kammer auf die verfügbaren Molekularstrahlquellen. Die Sn-Quelle ist dabei außerhalb des Blickfeldes am linken Rand.	80
Abb. 3-2:	Vergleich des Planck'schen Schwarzkörperstrahlungsspektrums mit der Absorption von Si	82
Abb. 3-3:	Schichtstapel eines exemplarischen Ge-VS.	84
Abb. 3-4:	Prozessübersicht der vier Hauptschritte zur Herstellung eines Ge-VS.	85
Abb. 3-5:	TEM-Aufnahme der Probe 2-5.0Sn-200C mit farblich hervorgehobenem Ge-VS.	87
Abb. 3-6:	Transmissionsspektrum des verwendeten ZnSe-Fensters. (Quelle der Absorptionsdaten: [60] S. 5-27)	91
Abb. 3-7:	Exemplarische MIR-Kameraaufnahme des Substrats bei $T_s = 330\text{ °C}$ .	91
Abb. 3-8:	Schichtstapel der Probenteilserie 1.0.	92
Abb. 3-9:	Verlauf der Substrattemperatur, gemessen mit dem Thermoelement (durchgezogene Linie) und der MIR-Kamera (Strichlinie), während der Epitaxie des Si-Puffers, des Ge-VS und des Ge-Puffers der Probe 1.0-GeSn-8.0Sn-1.	93
Abb. 3-10:	Vergleich des Verlaufs der mit dem Thermoelement gemessenen Substrattemperatur der Proben 1.0-GeSn-8.0Sn-1 (rot) und 1.0-GeSn-8.0Sn-2 (blau).	94
Abb. 3-11:	Vergleich des Verlaufs der mit der MIR-Kamera gemessenen Substrattemperatur der Proben 1.0-GeSn-8.0Sn-1 (rot) und 1.0-GeSn-8.0Sn-2 (blau).	95
Abb. 3-12:	Vergleich der $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Proben 1.0-GeSn-8.0Sn-1 (rot) und 1.0-GeSn-8.0Sn-2 (blau).	96
Abb. 3-13:	REM-Aufnahme der Probe 1.0-GeSn-8.0Sn-1, a) Strukturaufnahme, b) Materialkontrast.	97
Abb. 3-14:	Schematische Darstellung des Schichtstapels der $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserie 1.	99
Abb. 3-15:	Vergleich der $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probenteilserie 1.1. Die rosa-farbene, strich-linierte Linie markiert zur Verdeutlichung die anzunehmende Position des Reflexes einer relaxierten Ge-Schicht.	101

---

Abb. 3-16:	Vergleich der $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probenteilserie 1.2. Die rosa-farbene, strich-linierte Linie markiert zur Verdeutlichung die anzunehmende Position des Reflexes einer relaxierten Ge-Schicht.	102
Abb. 3-17:	Komplettübersicht der RSMs des $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ zugehörigen Reflexes der Probenserie 1.1. a) Probe 1.1-5.0Sn; b) Probe 1.1-10.0Sn; c) Probe 1.1-15.0Sn.	102
Abb. 3-18:	Komplettübersicht der RSMs des $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ zugehörigen Reflexes der Probenserie 1.2. a) Probe 1.2-7.5Sn; b) Probe 1.2-10.0Sn; c) Probe 1.2-12.5Sn; d) Probe 1.2-15.0Sn.	103
Abb. 3-19:	Übersicht der RBS-Spektren der Probenteilserie 1.2.	104
Abb. 3-20:	TEM-Aufnahme der Probe 1.1-5.0Sn.	106
Abb. 3-21:	TEM-EDXS-Aufnahme der Probe 1.1-5.0Sn. V.l.n.r: ADF-TEM-Aufnahme, Si-EDXS-Spektrum, Ge-EDXS-Spektrum, Sn-EDXS-Spektrum.	106
Abb. 3-22:	Übersicht der TEM-Aufnahmen der Proben 1.1-5.0Sn, 1.2-7.5Sn, 1.1-10.0Sn und 1.2-12.5Sn.	107
Abb. 3-23:	Vergleich der $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probe 1.1-5.0Sn bei $T_S = 30^\circ\text{C}$ , vor dem vollständigen Temperatur-messzyklus (schwarz) und nach dem vollständigen Temperaturmesszyklus bis $T_S = 680^\circ\text{C}$ (pink).	110
Abb. 3-24:	Zerlegung des $2\theta$ - $\omega$ -Spektrums des $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ zugehörigen Reflexes der Probe 1.1-5.0Sn in einzelne Gaußprofile.	111
Abb. 3-25:	Verlauf der vertikalen Gitterkonstante $a_{\perp}$ und Intensität $I$ der Probe 1.1-5.0Sn in Abhängigkeit der Temperatur über einen vollständigen Temperaturmesszyklus hinweg.	111
Abb. 3-26:	Vergleich der $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probe 1.2-7.5Sn bei $T_S = 30^\circ\text{C}$ , vor dem vollständigen Temperatur-messzyklus (rot) und nach dem vollständigen Temperaturmesszyklus bis $T_S = 650^\circ\text{C}$ (pink)	112
Abb. 3-27:	Zerlegung des $2\theta$ - $\omega$ -Spektrums des $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ zugehörigen Reflexes der Probe 1.2-7.5Sn in einzelne Gaußprofile.	113
Abb. 3-28:	Verlauf der vertikalen Gitterkonstante $a_{\perp}$ und Intensität $I$ der Probe 1.2-7.5Sn in Abhängigkeit der Temperatur über einen vollständigen Temperaturmesszyklus hinweg.	113
Abb. 3-29:	Vergleich der $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probe 1.1-10.0Sn bei $T_S = 30^\circ\text{C}$ , vor dem vollständigen Temperatur-messzyklus (grün) und nach dem vollständigen Temperaturmesszyklus bis $T_S = 570^\circ\text{C}$ (pink).	114
Abb. 3-30:	Zerlegung des $2\theta$ - $\omega$ -Spektrums des $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ zugehörigen Reflexes der Probe 1.1-10.0Sn in einzelne Gaußprofile.	115
Abb. 3-31:	Verlauf der vertikalen Gitterkonstante $a_{\perp}$ und Intensität $I$ der Probe 1.1-10.0Sn in Abhängigkeit der Temperatur über einen vollständigen Temperaturmesszyklus hinweg.	115

Abb. 3-32:	Vergleich der $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probe <i>1.2-12.5Sn</i> bei $T_S = 30\text{ }^\circ\text{C}$ , vor dem vollständigen Temperatur-messzyklus (blau) und nach dem vollständigen Temperaturmesszyklus bis $T_S = 570\text{ }^\circ\text{C}$ (pink).	116
Abb. 3-33:	Zerlegung des $2\theta$ - $\omega$ -Spektrums des $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ zugehörigen Reflexes der Probe <i>1.2-12.5Sn</i> in einzelne Gaußprofile.	116
Abb. 3-34:	Verlauf der vertikalen Gitterkonstante $a_\perp$ und Intensität $I$ der Probe <i>1.2-12.5Sn</i> in Abhängigkeit der Temperatur über einen vollständigen Temperaturmesszyklus hinweg.	117
Abb. 3-35:	Verlauf der Intensität des $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ zugehörigen Reflexes der Proben <i>1.1-5.0Sn</i> , <i>1.2-7.5Sn</i> und <i>1.2-12.5Sn</i> über der Haltedauer $t$ bei verschiedenen Tempertemperaturen $T_S$ .	118
Abb. 3-36:	Verlauf der Intensität des $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ zugehörigen Reflexes der Probe <i>1.2-7.5Sn</i> über der Haltedauer $t$ bei verschiedenen Temperaturen $T_S$ .	119
Abb. 3-37:	Verlauf der Intensität des $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ zugehörigen Reflexes der Probe <i>1.2-12.5Sn</i> über der Haltedauer $t$ bei verschiedenen Temperaturen $T_S$ .	119
Abb. 4-1:	Schichtstruktur zur Untersuchung der Verteilung der Molekularstrahlflüsse Si und Ge.	125
Abb. 4-2:	Homogenität der Schichtdicke der hergestellten Schichtstruktur von Si (links) und Ge (rechts).	126
Abb. 4-3:	Schichtstruktur zur Untersuchung der Verteilung des Molekularstrahlflusses Sn.	127
Abb. 4-4:	Radiale Abhängigkeit der ermittelten Sn-Konzentration der hergestellten Schichtstruktur.	128
Abb. 4-5:	Prozentuale Abweichung der Molekularstrahlflüsse über dem Substratradius $r$ .	129
Abb. 4-6:	Verteilung der residualen Verspannung $\varepsilon_{\parallel}$ einer im Zentrum des Substrats perfekt auf Ge gitterangepassten $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht.	130
Abb. 4-7:	Schematische Darstellung des Abdampfprozesses des Si-Tiegels innerhalb des Si-ESVs. a) Ebene Schmelzoberfläche, b) eingegrabene Schmelzoberfläche.	132
Abb. 4-8:	Vergleich der $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probenserie <i>4</i> zur qualitativen Bewertung der Reproduzierbarkeit der Bedingung zur Gitteranpassung auf Ge.	133
Abb. 4-9:	Vergleich der $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probenserie <i>2-X.XSn-200C</i> zur qualitativen Bewertung der Reproduzierbarkeit der Bedingung zur Gitteranpassung auf Ge.	134
Abb. 4-10:	Schematische Darstellung der Einbauposition der MIR-Kamera und des MIR-Pyrometers und den auftretenden Strahlquellen	135

Abb. 4-11:	Vergleich der Emissivität von Si hervorgerufen durch Gitterschwingungen (links) und freie Ladungsträger (rechts). (Grafiken entnommen aus [63]).	137
Abb. 4-12:	Verlauf der Substrattemperatur $T_S$ , gemessen mit dem MIR-Pyrometer, bei ausgeschalteter Substratheizung und Abkühlen bis $T_S = 130$ °C.	138
Abb. 4-13:	Verlauf der Substrattemperatur $T_S$ , gemessen mit dem MIR-Pyrometer, bei ausgeschalteter Substratheizung und Abkühlen bis $T_S = 160$ °C.	139
Abb. 4-14:	Verlauf der Substrattemperatur $T_S$ , gemessen mit dem MIR-Pyrometer, mit aktiver Regelung der Substratheizung und Abkühlen bis $T_S = 145$ °C.	140
Abb. 4-15:	Verlauf der Substrattemperatur $T_S$ für unterschiedliche Regelstrategien.	141
Abb. 4-16:	Vergleich der Programmsequenzen für a) die Epitaxie bei $T_S \gg 100$ °C. b) die Epitaxie bei $T_S \approx 100$ °C.	142
Abb. 4-17:	Verlauf der Substrattemperatur $T_S$ , gemessen mit dem MIR-Pyrometer, mit aktiver Zweipunktregelung durch stochastische Abkühlphasen.	143
Abb. 5-1:	Schematische Darstellung des Schichtstapels der Probenserie 2	146
Abb. 5-2:	Vergleich der $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probe 2-2.5Sn-150C und der Ge-Referenzprobe 2-0.0Sn-Ref ohne obere $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht.	149
Abb. 5-3:	Differenz der $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Proben 2-2.5Sn-150C und 2-0.0Sn-Ref.	150
Abb. 5-4:	Vergleich der $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probenteilserie 2-2.5Sn. Die rosafarbene Strichlinie markiert zur Verdeutlichung den Reflex, welcher der Ge-Pufferschicht zugeordnet werden kann.	151
Abb. 5-5:	Ergebnis der Poly-Analyse der Probe 2-2.5Sn-150C als $2\theta$ -Spektrum. Der Einfallswinkel beträgt $\omega = 3$ °.	152
Abb. 5-6:	a) Komplettübersicht der Reflexe des RSMs der Probe 2-2.5Sn-200C. b) Detailausschnitt des $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ zugehörigen Reflexes des RSMs der Probe 2-2.5Sn-200C.	153
Abb. 5-7:	Vergleich der $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probenteilserie 2-5.0Sn. Die rosafarbene Strichlinie markiert zur Verdeutlichung den Reflex, welcher der Ge-Pufferschicht zugeordnet werden kann.	154
Abb. 5-8:	Ergebnis der Poly-Analyse der Probe 2-5.0Sn-160C als $2\theta$ -Spektrum. Der Einfallswinkel beträgt $\omega=3$ °.	155
Abb. 5-9:	a) Komplettübersicht der Reflexe des RSMs der Probe 2-5.0Sn-200C. b) Detailausschnitt des $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ zugehörigen Reflexes des RSMs der Probe 2-5.0Sn-200C.	156

Abb. 5-10:	Vergleich der $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probenteilserie 2-7.5Sn. Die rosa-farbene Strichlinie markiert zur Verdeutlichung den Reflex, welcher der Ge-Pufferschicht zugeordnet werden kann.	157
Abb. 5-11:	a) Mikroskopieaufnahme der Oberfläche der Probe 2-7.5Sn-300C, b) Mikroskopieaufnahme der Oberfläche der Probe 2-7.5Sn-200C.	158
Abb. 5-12:	Ergebnis der Poly-Analyse der Probe 2-7.5Sn-160C als $2\theta$ -Spektrum. Der Einfallswinkel beträgt $\omega=3^\circ$ .	159
Abb. 5-13:	Komplettübersicht der Reflexe des RSMs der Probe 2-7.5Sn-200C. b) Detailausschnitt des $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ zugehörigen Reflexes des RSMs der Probe 2-7.5Sn-200C.	160
Abb. 5-14:	Vergleich der $2\theta$ $\omega$ -Spektren der Probenteilserie 2-10.0Sn. Die rosa-farbene Strichlinie markiert zur Verdeutlichung den Reflex, welcher der Ge-Pufferschicht zugeordnet werden kann.	161
Abb. 5-15:	Ergebnis der Poly-Analyse der Probe 2-10.0Sn-160C als $2\theta$ -Spektrum.	162
Abb. 5-16:	Komplettübersicht der Reflexe des RSMs der Probe 2-10.0Sn-200C. b) Detailausschnitt des $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ zugehörigen Reflexes des RSMs der Probe 2-10.0Sn-200C.	162
Abb. 5-17:	Vergleich der $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probenteilserie 2-12.5Sn. Die rosa-farbene Strichlinie markiert zur Verdeutlichung den Reflex, welcher der Ge-Pufferschicht zugeordnet werden kann.	164
Abb. 5-18:	Ergebnis der Poly-Analyse der Probe 2-12.5Sn-160C als $2\theta$ -Spektrum.	165
Abb. 5-19:	Komplettübersicht der Reflexe des RSMs der Probe 2-12.5Sn-160C. b) Detailausschnitt des $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ zugehörigen Reflexes des RSMs der Probe 2-12.5Sn-160C.	165
Abb. 5-20:	Komplettübersicht der Reflexe des RSMs der Probe 2-12.5Sn-200C. b) Detailausschnitt des $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ zugehörigen Reflexes des RSMs der Probe 2-12.5Sn-200C.	166
Abb. 5-21:	Vergleich der $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probenteilserie 2-15.0Sn. Die rosa-farbene Strichlinie markiert zur Verdeutlichung den Reflex, welcher der Ge-Pufferschicht zugeordnet werden kann.	168
Abb. 5-22:	Ergebnis der Poly-Analyse der Probe 2-12.5Sn-160C als $2\theta$ -Spektrum.	169
Abb. 5-23:	Komplettübersicht der Reflexe des RSMs der Probe 2-15.0Sn-200C. b) Detailausschnitt des $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ zugehörigen Reflexes des RSMs der Probe 2-15.0Sn-200C.	169
Abb. 5-24:	Vergleich der RBS-Spektren der Probenteilserie 2-XXSn-200C. Die durchgezogene Linie zeigt das „Random“-Signal und die Strichlinie das „Channeling“-Signal.	171

Abb. 5-25:	Vergleich der TEM-Aufnahmen der Proben <i>2-5.0Sn-200C</i> (a) und <i>4-5.0Sn</i> (b).	174
Abb. 5-26:	TEM-EDXS Aufnahme der Probe <i>2-10.0Sn-200C</i> . V.l.n.r: TEM - Aufnahme, Si-EDXS-Spektrums, Ge-EDXS-Spektrum, Sn-EDXS-Spektrum.	176
Abb. 5-27:	TEM-EDXS Aufnahme der Probe <i>2-15.0Sn-200C</i> . V.l.n.r: TEM-Aufnahme, Si-EDXS-Spektrums, Ge-EDXS-Spektrum, Sn-EDXS-Spektrum.	177
Abb. 5-28:	EDXS-Spektren der Legierungsphase <i>SiGeSn</i> und der separierten Phasen <i>SiSn</i> und <i>SiGe</i> .	177
Abb. 6-1:	Schichtstapel der $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserie 3.	181
Abb. 6-2:	Verlauf der Substrattemperatur während der Epitaxie des Ge-Diodenstruktur der Probe <i>3-0.0Sn-GeRef</i> , gemessen mit dem Thermoelement (Strichlinie) und dem MIR-Pyrometer (durchgezogene Linie).	183
Abb. 6-3:	Übersicht der Prozessparameter der Probe <i>3-7.5Sn-200C</i> .	185
Abb. 6-4:	Vergleich der $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Proben <i>3-5.0Sn-200C</i> bis <i>3-12.5Sn-200C</i> .	186
Abb. 6-5:	Mikroskopaufnahme der Oberfläche der Probe <i>3-12.5Sn-200C</i> .	187
Abb. 6-6:	Vergleich der $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Proben <i>3-12.5Sn-200C</i> , <i>3-12.5Sn-180C</i> und <i>3-12.5Sn-160C</i> .	188
Abb. 6-7:	Vergleich der $2\theta$ -Spektren der Proben <i>3-12.5Sn-160C</i> , <i>3-12.5Sn-180C</i> und <i>3-12.5Sn-200C</i> (oben) mit dem simulierten $2\theta$ -Spektrum von metallischem $\beta$ -Sn	189
Abb. 6-8:	$2\theta$ - $\omega$ -Spektrum der Probe <i>3-15.0Sn-160C</i> .	189
Abb. 6-9:	$2\theta$ -Spektrum der Probe <i>3-15.0Sn-160C</i>	190
Abb. 6-10:	Zusammenfassung der RBS-Spektren der Probenserie 3.	192
Abb. 6-11:	Schichtstapel der $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserie 4	195
Abb. 6-12:	Verlauf Epitaxie-Parameter der Probe <i>4-7.5Sn</i> : Substrattemperatur $T_S$ , gemessen mit dem Thermoelement. Zusätzlich ist der Verlauf der Molekularstrahlflüsse dargestellt, um die Wachstumsphasen der einzelnen Schichten hervorzuheben.	197
Abb. 6-13:	Vergleich der $2\theta$ - $\omega$ -Spektren des symmetrischen (004)-Reflexes der Probenserie 4.	198
Abb. 6-14:	Komplettübersicht der XRD-RSM-Spektren des asymmetrischen $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y(224)$ -Reflexes der Probenserie 4.	200
Abb. 6-15:	Ergebnisse der TEM-Analyse der Probe <i>4-10.0Sn</i> . a) Übersichtsaufnahme. b) Vergrößerte Detailaufnahme	202
Abb. 6-16:	Ergebnisse der TEM-Analyse der Probe <i>4-12.5Sn</i> . a) Übersichtsaufnahme. b) Vergrößerte Detailaufnahme	202

Abb. 6-17:	Übersichts-TEM-Aufnahme der Probe <i>4-15.0Sn</i> .	203
Abb. 6-18:	TEM-Aufnahme eines größeren Ausschnitts der Probe xxx zur Veranschaulichung der hohen Durchstoßversetzungsdichte.	204
Abb. 6-19:	Vergleich der RBS-Spektren der Probenserie 4. Das Random-Signal ist dabei mit einer durchgezogenen Linie und das Channeling-Signal mit einer Strichlinie dargestellt.	206
Abb. 6-20:	a) Schematische Darstellung der finalen Bauteilstruktur, b) Allgemeine Prozesssequenz.	208
Abb. 6-21:	Schematische Darstellung des Prozessschritts "Reinigung der Probenoberfläche"	209
Abb. 6-22:	Schematische Darstellung des Prozessschritts "Strukturierung der Mesa mittels Fotolithografie "	209
Abb. 6-23:	Schematische Darstellung des Prozessschritts "Ätzung der Mesa-Struktur"	211
Abb. 6-24:	Schematische Darstellung des Prozessschritts "Passivierung der Mesa-Oberfläche mittels Siliziumdioxid"	211
Abb. 6-25:	Schematische Darstellung des Prozessschritts "Öffnen der Kontaktlöcher"	212
Abb. 6-26:	Schematische Darstellung des Prozessschritts "Abscheidung der Metallisierung aus Titan und Aluminium "	213
Abb. 6-27:	Schematische Darstellung des Prozessschritts "Strukturierung der Metallisierung"	213
Abb. 6-28:	Legende der schematischen Grafiken zur Darstellung der Prozessschritte	214
Abb. 7-1:	Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung der Probe <i>3-5.0Sn-200C</i> , a) J(U)-Charakteristik, b) $J_0(U)$ -Charakteristik	216
Abb. 7-2:	Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung der Probe <i>3-7.5Sn-200C</i> , a) J(U)-Charakteristik, b) $J_0(U)$ -Charakteristik	217
Abb. 7-3:	Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung der Probe <i>3-10.0Sn-200C</i> , a) J(U)-Charakteristik, b) $J_0(U)$ -Charakteristik	218
Abb. 7-4:	Vergleich der AFM-Aufnahmen der Probe <i>3-12.5Sn-160C</i> a) Probenoberfläche der geätzten Probe b) Probenoberfläche der ungeätzten Probe.	219
Abb. 7-5:	Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung der Probe <i>3-12.5Sn-160C</i> , a) J(U)-Charakteristik, b) $J_0(U)$ -Charakteristik	219
Abb. 7-6:	Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung der Probe <i>3-15.0Sn-200C</i> , a) J(U)-Charakteristik, b) $J_0(U)$ -Charakteristik	220
Abb. 7-7:	Vergleich der Ergebnisse der J(U)-Charakteristiken der Probenserie 3.	221

Abb. 7-8:	Normierte $C_S(U)$ -Charakteristiken von Dioden mit $r_M = 20, 40, 80 \mu\text{m}$ der Probe 3-5.0Sn-200C.	222
Abb. 7-9:	Vergleich der normierten $CS(U)$ -Charakteristiken von Dioden mit $r_M = 80 \mu\text{m}$ der Probenserie 3.	223
Abb. 7-10:	Vergleich der normierten $C_S^{-2}(U)$ -Charakteristiken von Dioden mit $r_M = 80 \mu\text{m}$ der Probenserie 3	223
Abb. 7-11:	Box-Whisker-Darstellung der extrahierten Built-In-Spannungen $U_{bi}$ der Proben 3-5.0Sn-200C, 3-7.5Sn-200C und 3-10.0Sn-200C.	224
Abb. 7-12:	Dotiercharakteristik einer Diode des Feldes A1 des Typs <i>pib</i> mit $r_M = 80 \mu\text{m}$ der Probe 3-5.0Sn-200C.	225
Abb. 7-13:	Box-Whisker-Darstellung der extrahierten Akzeptorkonzentration $N_{A,\text{SiGeSn}}$ der Probenserie 3.	225
Abb. 7-14:	Zu erwartendes Banddiagramm der Diodenstruktur der Probenserie 3.	227
Abb. 7-15:	Übersicht der indirekten Bandlücke $E_{g,\text{SiGeSn}}^L$ von auf Ge gitterangepasstem $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ in Abhängigkeit der Zusammensetzung im Vergleich mit den theoretischen Arbeiten von Moontragoon, Soref und Ikonic [21] und Sun, Soref und Cheng [69].	229
Abb. 7-16:	Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung der Probe 4-5.0Sn, a) J(U)-Charakteristik, b) $J_0(U)$ -Charakteristik.	231
Abb. 7-17:	Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung der Probe 4-7.5Sn, a) J(U)-Charakteristik, b) $J_0(U)$ -Charakteristik.	232
Abb. 7-18:	Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung der Probe 4-10.0Sn, a) J(U)-Charakteristik, b) $J_0(U)$ -Charakteristik.	233
Abb. 7-19:	Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung der Probe 4-12.5Sn, a) J(U)-Charakteristik, b) $J_0(U)$ -Charakteristik.	233
Abb. 7-20:	Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung der Probe 4-15.0Sn, a) J(U)-Charakteristik, b) $J_0(U)$ -Charakteristik	234
Abb. 7-21:	Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung der Probenserie 4, a) J(U)-Charakteristik, b) $J_0(U)$ -Charakteristik.	235
Abb. 7-22:	Normierte $C_S(U)$ Charakteristiken von Dioden mit $r_M = 20, 40, 80 \mu\text{m}$ der Probe 4-5.0Sn.	237
Abb. 7-23:	Vergleich der $C_S(U)$ -Charakteristiken von Dioden der Probenserie 4 mit $r_M = 80 \mu\text{m}$ .	238
Abb. 7-24:	Vergleich der $C_S^{-2}(U)$ -Charakteristiken von Dioden der Probenserie 4 mit $r_M = 80 \mu\text{m}$ .	238
Abb. 7-25:	Box-Whisker-Darstellung der extrahierten Built-In-Spannungen $U_{bi}$ der Proben 4-5.0Sn, 4-7.5Sn, 4-10.0Sn und 4-12.5Sn.	239
Abb. 7-26:	Akzeptorkonzentrations-Charakteristik einer Diode des Feldes A3 des Typs <i>pib</i> mit $r_M = 80 \mu\text{m}$ der Probe 4-5.0Sn.	240

Abb. 7-27:	Box-Whisker-Darstellung der extrahierten Akzeptorkonzentration $N_{A,Ge}$ der Probenserie 4.	240
Abb. 7-28:	Zu erwartendes Banddiagramm der Heterostruktur der Probenserie 4. Annahme: Heteroübergang Typ I.	241
Abb. 7-29:	Detailliertes Banddiagramm der Heterostruktur der Probe 4-5.0Sn.	244
Abb. 7-30:	Detailliertes Banddiagramm der Heterostruktur der Probe 4-7.5Sn.	244
Abb. 7-31:	Detailliertes Banddiagramm der Heterostruktur der Probe 4-10.0Sn.	245
Abb. 8-1:	Banddiagramm einer Ge-Si <sub>0,37</sub> Ge <sub>0,53</sub> Sn <sub>0,10</sub> -Heterostruktur	248
Abb. 8-2:	Berechnete Bandlücke von Si <sub>x</sub> Ge <sub>1-x-y</sub> Sn <sub>y</sub> , basierend auf Simulationen von Moontragoon, Soref und Ikonic vgl. [21] (Eigene Darstellung, Daten entnommen aus [21])	249
Abb. A-1:	Gesamtübersicht des verwendeten Maskensatzes <i>SiGePIN2009</i>	251
Abb. A-2:	Gesamtübersicht des verwendeten Maskensatzes <i>SiGePIN2009</i>	252
Abb. A-3:	Übersicht der einzelnen Maskenebenen des verwendeten Maskensatzes <i>SiGePIN2009</i>	253
Abb. A-4:	Vergleich der Strukturen des Typs <i>pib</i> und des Typs <i>pin</i>	253
Abb. A-5:	Vergleich der Strukturen des Typs <i>pib</i> und des Typs <i>pib_open</i>	254
Abb. A-6:	Vergleich der Strukturen des Typs <i>pib</i> und des Typs <i>pib_short</i>	254

Tabellenverzeichnis

Tab. 1-1:	Übersicht der Arbeitsgruppen, welche sich mit der Epitaxie und theoretischen Betrachtungen von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ beschäftigen.	42
Tab. 2-1:	Daten der Bandlücken und Bowingparameter der theoretischen Berechnungen der $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Bandlücke nach Moontragoon, Soref und Ikonic. (Daten entnommen aus: [21])	70
Tab. 2-2:	Relative Permittivität $\epsilon_r$ der Legierungselemente Si, Ge und $\alpha$ -Sn. (Daten entnommen aus: Si, Ge [7], $\alpha$ -Sn [8])	72
Tab. 2-3:	Relative Permittivität $\epsilon_{r,\text{SiGeSn}}$ der in dieser Arbeit verwendeten $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Zusammensetzungen.	72
Tab. 2-4:	Effektive Masse im Leitungsband $m_L$ der Legierungselemente Si, Ge und $\alpha$ -Sn. (Daten entnommen aus: Si, Ge [3], $\alpha$ -Sn [4])	73
Tab. 2-5:	Effektive Masse im Leitungsband $m_{L,\text{SiGeSn}}$ der in dieser Arbeit verwendeten $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Zusammensetzungen	74
Tab. 2-6:	Effektive Masse im Valenzband $m_V$ der Legierungselemente Si, Ge und $\alpha$ -Sn. (Daten entnommen aus: Si [5], Ge [47], $\alpha$ -Sn [6]).	74
Tab. 2-7:	Effektive Masse im Valenzband $m_{V,\text{SiGeSn}}$ der in dieser Arbeit verwendeten $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Zusammensetzungen.	75
Tab. 2-8:	Entartungsfaktor $M_L$ der Legierungselemente Si, Ge und $\alpha$ -Sn. (Daten entnommen aus: [2])	76
Tab. 2-9:	Entartungsfaktor $M_{L,\text{SiGeSn}}$ effektive Zustandsdichte im Leitungs- und Valenzband $N_{L,\text{SiGeSn}}$ und $N_{V,\text{SiGeSn}}$ für die in dieser Arbeit verwendeten $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Zusammensetzungen.	76
Tab. 3-1:	Probenübersicht der Probenteilserie 1.0	92
Tab. 3-2:	Übersicht der Proben und deren $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht-Zusammensetzungen der $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserie 1.	100
Tab. 3-3:	Übersicht der angestrebten und mittels RBS ermittelten tatsächlichen Zusammensetzung der $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht der Probenteilserie 1.2.	105
Tab. 3-4:	Übersicht der für die HT-XRD-Analyse verwendeten Proben und deren $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht-Zusammensetzungen der $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserie 1.	109
Tab. 5-1:	Vollständige Probenübersicht der Probenserie 2	148
Tab. 5-2:	Übersicht der aus der XRD-RSM-Analyse extrahierten Kristallparameter $a_\perp$ , $a_\parallel$ , $a_0$ und $\epsilon_\parallel$ der Probe 2-2.5Sn-200C.	153
Tab. 5-3:	Übersicht der aus der XRD-RSM-Analyse extrahierten Kristallparameter $a_\perp$ , $a_\parallel$ , $a_0$ und $\epsilon_\parallel$ der Probe 2-5.0Sn-200C.	156
Tab. 5-4:	Übersicht der aus der XRD-RSM-Analyse extrahierten Kristallparameter $a_\perp$ , $a_\parallel$ , $a_0$ und $\epsilon_\parallel$ der Probe 2-7.5Sn-200C.	160

Tab. 5-5:	Übersicht der aus der XRD-RSM-Analyse extrahierten Kristallparameter $a_{\perp}$ , $a_{\parallel}$ , $a_0$ und $\varepsilon_{\parallel}$ der Probe 2-10.0Sn-200C.	163
Tab. 5-6:	Übersicht der aus der XRD-RSM-Analyse extrahierten Kristallparameter $a_{\perp}$ , $a_{\parallel}$ , $a_0$ und $\varepsilon_{\parallel}$ der Probe 2-12.5Sn-160C.	166
Tab. 5-7:	Übersicht der aus der XRD-RSM-Analyse extrahierten Kristallparameter $a_{\perp}$ , $a_{\parallel}$ , $a_0$ und $\varepsilon_{\parallel}$ der Probe 2-12.5Sn-160C.	167
Tab. 5-8:	Übersicht der aus der XRD-RSM-Analyse extrahierten Kristallparameter $a_{\perp}$ , $a_{\parallel}$ , $a_0$ und $\varepsilon_{\parallel}$ der Probe 2-15.0Sn-160C.	170
Tab. 5-9:	Ergebnisse der RBS-Analyse der $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ Probenteilserie 2-X.XSn-200C.	172
Tab. 5-10:	Übersicht der angestrebten und mittels TEM-EDXS ermittelten tatsächlichen Zusammensetzung der $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht der Probenserie 2-X.X-200C.	178
Tab. 5-11:	Bewertungsmatrix zur qualitativen Bewertung der Substrattemperatur zur Epitaxie von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$	180
Tab. 6-1:	Übersicht der hergestellten Proben und der Zusammensetzung der $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht der $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserie 3.	182
Tab. 6-2:	Bewertungsmatrix zur qualitativen Bewertung der Substrattemperatur zur Epitaxie von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ .	190
Tab. 6-3:	Zusammenfassung der aus der RBS-Messung extrahierten tatsächlichen Schichtzusammensetzungen, Schichtdicken und Kristallparameter der $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserie 3.	193
Tab. 6-4:	Übersicht der Proben und deren $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht-Zusammensetzungen der SiGeSn-Probenserie 4.	196
Tab. 6-5:	Zusammenfassung der aus der XRD-RSM-Analyse extrahierten Kristallparameter $a_{\perp}$ , $a_{\parallel}$ , $a_0$ und $\varepsilon_{\parallel}$ der Probenserie 4.	201
Tab. 6-6:	Zusammenfassung der Ergebnisse der RBS-Analyse. Es wurde die tatsächliche Dicke und Zusammensetzung der $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht bestimmt. Die aus der tatsächlichen Zusammensetzung resultierende Gitterkonstante $a_{0,\text{RBS}}$ steht der mittels XRD bestimmten Gitterkonstante $a_{0,\text{XRD}}$ gegenüber.	205
Tab. 6-7:	Übersicht der durchgeführten Prozessläufe und der dabei prozessierten Proben der Probenserie 3, 4	207
Tab. 7-1:	Aus den Ergebnissen der I(U)-Charakterisierung der Probenserie 3 extrahierte Diodenparameter.	221
Tab. 7-2:	Aus den Ergebnissen der I(U)-Charakterisierung der Probenserie 4 extrahierte Diodenparameter.	236
Tab. 7-3:	Leitungs- und Valenzbandversätze $\Delta E_L$ und $\Delta E_V$ der in Abb. 7-28 dargestellten Heterostruktur.	243

Tab. 7-4:	Elektronenaffinität $q\chi_{\text{SiGeSn}}$ in Abhängigkeit der $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Zusammensetzung.	245
Tab. 7-5:	Die indirekte Bandlücke $E_{g,\text{SiGeSn}}^L$ die Leitungs- und Valenzbandversätze $\Delta E_L$ und $\Delta E_V$ und die Elektronenaffinität $q\chi_{\text{SiGeSn}}$ in Abhängigkeit der $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Zusammensetzung.	246
Tab. 7-6:	Die relative Permittivität $\varepsilon_{r,\text{SiGeSn}}$ , die effektiven Massen im Leitungs- und Valenzband $m_{L,\text{SiGeSn}}$ und $m_{V,\text{SiGeSn}}$ und die effektiven Zustandsdichten im Leitungs- und Valenzband $N_{L,\text{SiGeSn}}$ und $N_{V,\text{SiGeSn}}$ in Abhängigkeit der $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Zusammensetzung	246
Tab. B-1:	Proben-ID-Zuordnung Probenserie 1	255
Tab. B-2:	Proben-ID-Zuordnung Probenserie 2	256
Tab. B-3:	Proben-ID-Zuordnung Probenserie 3	256
Tab. B-4:	Proben-ID-Zuordnung Probenserie 4	257
Tab. B-5:	Prozess-ID-Zuordnung zu den Prozessbezeichnungen	257



### Zusammenfassung

Einige hoch-performante Bauelemente in der modernen Mikro- und Nanoelektronik sind Heterostrukturbauelementen. Die auch als Heterobauelemente bekannten Strukturen sind gekennzeichnet durch mindestens eine, meist mehrere Grenzflächen unterschiedlicher Halbleitermaterialien, sog. Heteroübergänge, welche die Eigenschaften des Bauelements maßgeblich bestimmen. Typische Beispiele für Heterobauelemente sind der sog. Separate Confinement Heterostruktur-Laser, der High Electron Mobility Transistor oder der Hetero-Bipolartransistor. Die beiden erstgenannten Heterobauelemente werden dabei häufig mit Verbindungshalbleitern der dritten und fünften Hauptgruppe realisiert, was deren Herstellung teuer und aufwändig macht. Das für den Hetero-Bipolartransistor häufig verwendete Materialsystem Silizium-Germanium erlaubt jedoch lediglich die Herstellung verspannter Heterostrukturen, was für einige Anwendungen nachteilig ist.

Diese Arbeit befasst sich mit der Molekularstrahlepitaxie und Charakterisierung von unverspannten Silizium-Germanium-Zinn-Schichten auf virtuellen Germanium-Substraten. Silizium-Germanium-Zinn erlaubt dabei die Entkopplung der Gitterkonstante und der Bandlücke des Legierungshalbleiters. Dies ermöglicht wiederum die Epitaxie von unverspannten, sog. gitterangepassten, Hetero-Strukturen. Die theoretisch vorausgesagte direkte Bandlücke von Silizium-Germanium-Zinn für bestimmte Zusammensetzungen macht es zu einem potenziellen Kandidaten für die Realisierung der Silizium-integrierten Lichtquelle, einem wichtigen Baustein für die Silizium-Photonik.

Zunächst werden in der vorliegenden Arbeit einige Voruntersuchungen diskutiert, um die Möglichkeiten und Probleme der Epitaxie von Silizium-Germanium-Zinn zu beleuchten. Das Hauptaugenmerk liegt dabei auf der bereits bekannten Temperaturempfindlichkeit von Silizium-Germanium-Zinn-Legierungen. Eine Erweiterung des verwendeten Molekularstrahlepitaxie-Systems zur präzisen Messung und Regelung der Substratoberflächentemperatur ermöglicht daraufhin eine umfangreiche Untersuchung zur Optimierung der Parameter der Silizium-Germanium-Zinn-Epitaxie. Die dabei hergestellten Schichten werden mittels geeigneter Kristallanalyseverfahren umfangreich charakterisiert. Die Optimierung zeigt dabei eine deutliche Verbesserung der Kristallqualität und der Reproduzierbarkeit der hergestellten Silizium-Germanium-Zinn-Legierungen.

Unter Anwendung des optimierten Epitaxieprozesses werden erste Silizium-Germanium-Zinn-Heterobaelemente hergestellt. Die Arbeit beschränkt sich dabei auf Legierungszusammensetzungen die in einer Gitteranpassung auf Germanium resultieren. Die hergestellten Bauelemente werden anschließend zur Bestimmung der elektrischen Eigenschaften der Silizium-Germanium-Zinn-Legierung mithilfe der Strom-Spannungs- als auch der Kapazitäts-Spannungs-Charakterisierung umfassend charakterisiert. Dabei können für die Konzeptionierung von Silizium-Germanium-Zinn-Heterostrukturen wichtige Materialparameter experimentell bestimmt werden. Diese sind die indirekte Bandlücke von Silizium-Germanium-Zinn und die Leitungs- und Valenzbandversätze am Heteroübergang zu Germanium. Es wird dabei gezeigt, dass sich an der Grenzfläche zwischen Silizium-Germanium-Zinn und Germanium ein sog. Typ II Heteroübergang ausbildet. Die Ergebnisse bilden eine wichtige Basis für die künftige Realisierung von Silizium-Germanium-Zinn-Heterobaelementen.

## Abstract

Some high performance devices in modern micro- and nanoelectronics are heterostructure devices. The structures also known as hetero devices are characterized by at least one mostly several interfaces between different semiconductor materials, so-called heterojunctions. The heterojunctions determine significantly the properties of the device. Typical examples are the so-called separate confinement heterostructure laser, the high-electron-mobility transistor or the heterojunction bipolar transistor. The first two hetero devices mentioned are often realized with compound semiconductors of the third and fifth main group, which makes their production expensive and complex. The silicon-germanium material system frequently used for the heterobipolar transistor, however, only allows the production of strained heterostructures, which is disadvantageous for some applications.

This work considers the molecular beam epitaxy and characterization of unstrained silicon-germanium-tin layers on virtual germanium substrates. Silicon-germanium-tin allows the decoupling of its lattice constant and bandgap. This in turn enables the epitaxy of unstrained, so-called lattice-matched, heterostructures. The theoretical predicted direct bandgap of silicon-germanium-tin for certain compositions makes it a potential candidate for the realization of the silicon-integrated light source, a key component for silicon photonics.

First of all, some preliminary investigations are discussed in this thesis in order to highlight the possibilities and problems of the epitaxy of silicon-germanium-tin. The main focus is on the already known temperature sensitivity of silicon-germanium-tin alloys. An extension of the used molecular beam epitaxy system for the precise measurement and control of the substrate surface temperature enables an extensive investigation to optimize the parameters of the silicon-germanium-tin epitaxy. The layers produced in this way are extensively characterized by means of suitable crystal analysis methods. The optimization shows a clear improvement of the crystal quality and reproducibility of the silicon-germanium-tin alloys.

Using the optimized epitaxy process, first silicon-germanium-tin hetero devices are produced. The work is limited to alloy compositions that result in the already mentioned

lattice-matching to germanium. The manufactured devices are then comprehensively characterized in order to determine the electrical properties of the silicon-germanium-tin alloy using current-voltage and capacitance-voltage characterization. In this context, important material parameters can be determined experimentally for the conception of silicon-germanium-tin heterostructures. These are the indirect band gap of silicon-germanium-tin and the conduction band offset and valence band offset at the heterojunction to germanium. It is shown that a so-called type II heterojunction is formed at the interface between silicon-germanium-tin and germanium. The results are an important basis for the future implementation of silicon-germanium-tin hetero components.

## 1. Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub>-Halbleiter-Heterostrukturen in der Nanoelektronik

*Dieses Kapitel dient zur Motivation der vorliegenden Arbeit. Um die Relevanz von Heterostrukturen zu verstehen, wird zunächst der historische Hintergrund bis hin zu deren Bedeutung in der modernen Mikro- und Nanoelektronik diskutiert.*

*Anschließend erfolgt eine erste Eingliederung der Arbeit in den aktuellen Forschungsstand und eine Vorstellung möglicher Anwendungen von Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub>-Heterostrukturen. Der letzte Teil des Kapitels zeigt die Struktur der vorliegenden Arbeit auf.*

### 1.1. Historische Relevanz von Heterostrukturen

Unter Halbleiter-Heterostrukturen versteht man im Allgemeinen Strukturen mit der Grenzschicht mindestens zweier verschiedener Halbleiter mit unterschiedlichen Eigenschaften, sog. Halbleiter-Heteroübergängen. Der Einfachheit halber werden diese im Folgenden nur noch als Heterostrukturen bezeichnet. Das Konzept, unterschiedliche Halbleiter zu kombinieren erlaubt dabei die Eigenschaften eines Bauelements wesentlich zu verbessern.

Die ersten Überlegungen zur Verwendung von Halbleiter-Heterostrukturen wurden von Herbert Krömer bereits 1957 ausgearbeitet. [11] Das Konzept behandelte dabei die Verwendung eines Emitters mit größerer Bandlücke zur Steigerung des Verstärkungsfaktors von Bipolartransistoren. Das Konzept ist heute bekannt als Hetero-Bipolartransistor. Herbert Krömer war es auch, der die Grundlagen zur Realisierung von Halbleiter-Heterostrukturen schuf und hierfür zusammen mit Zhores I. Alferov im Jahre 2000 mit dem Nobelpreis für Physik ausgezeichnet wurde. Die beiden gelten daher zu Recht als die „Väter“ der Halbleiter-Heterostrukturen. Krömers Gedanke war die Struktur hoch performanter Bauelemente grundlegend zu verändern. „Sie geht dabei über von einer Aneinanderreihung von Halbleiterschichten, separiert von Heteroübergängen in eine Aneinanderreihung von Heteroübergängen, separiert von Halbleiterschichten.“ (eigene Übersetzung aus [12]) Es kann dabei zwischen drei verschiedenen Typen von Heteroübergängen, wie in Abb. 1-1 dargestellt, unterschieden werden vgl. [2, S. 58]: Bei einem Heteroübergang des Typs I liegen Leitungs- und Valenzbandkante  $E_L$  und  $E_V$  eines

Materials  $A$  mit einer Bandlücke kleiner als der Bandlücke  $B$   $E_{g,A} < E_{g,B}$  energetisch zwischen Leitungs- und Valenzband des Materials  $B$ . Hingegen liegen bei einem Heteroübergang des Typs II das Leitungs- und Valenzband des Materials  $A$  energetisch unterhalb des Leitungs- und Valenzbands des Materials  $B$ . Die Abstände sind dabei jedoch noch so gering, dass es einen Überlapp der energetisch verbotenen Zonen gibt. Dies ist bei einem Hetero-übergang des Typs III nicht mehr der Fall. Hier liegt das Leitungsband des Materials  $A$  energetisch unterhalb des Valenzbands des Materials  $B$ . Man spricht deshalb auch von einem „Broken-Gap“-Heteroübergang.

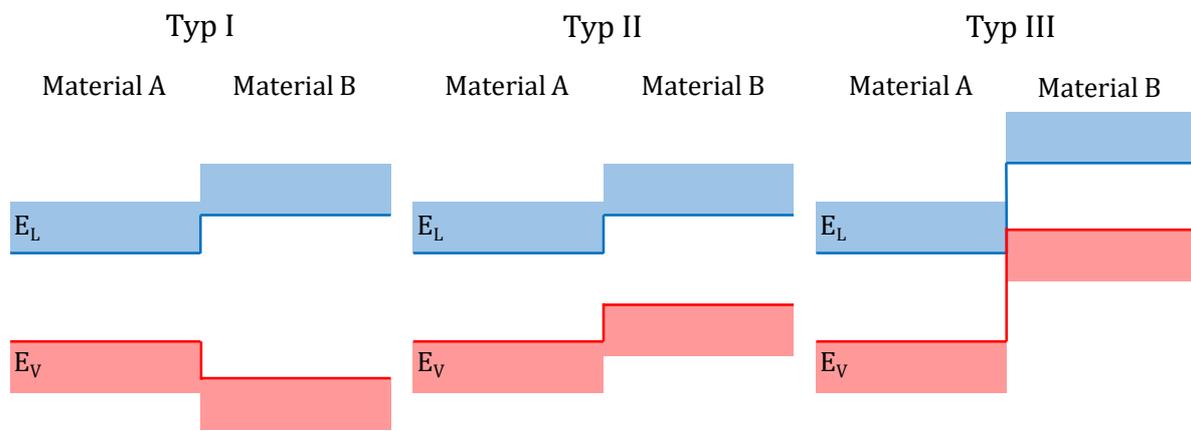


Abb. 1-1: Übersicht der Arten von Heteroübergängen (Eigene Darstellung, vgl. [2, S. 58]).

Die Anforderungen an ein Materialsystem zur Realisierung von Heterostrukturen sind dabei sehr hoch. Die Materialien müssen zunächst zueinander kompatibel sein, damit sie epitaktisch aufeinander gewachsen werden können. Außerdem erfordern Halbleiter-Heterostrukturen scharfe, definierte Übergänge zwischen den beiden Materialien. Dies erhöht daher auch die technologischen Anforderungen. Mögliche Materialsysteme sind daher zunächst III/V-Verbindungshalbleiter wie beispielsweise InGaAs, GaN oder InSb. Außerdem können Gruppe IV-Legierungshalbleiter, wie beispielsweise  $\text{Si}_{1-w}\text{Ge}_w$ ,  $\text{Ge}_{1-z}\text{Sn}_z$  oder wie in der vorliegenden Arbeit  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zur Realisierung von Halbleiter-Heterostrukturen verwendet werden. Aufgrund der hohen technologischen Anforderungen konnten die ersten Heterostrukturen erst mit der Verfügbarkeit der Molekularstrahlepitaxie (engl. molecular beam epitaxy – MBE) realisiert werden. Die MBE, an deren Entwicklung Herbert Krömer zudem maßgeblich beteiligt war, erlaubt die Herstellung atomar scharfer Materialübergänge und ist daher bestens den genannten Anforderungen gewachsen. Darüber hinaus handelt es sich bei MBE um ein ausgezeichnetes Werkzeug

zur Erforschung neuer Materialsysteme, da sie sehr flexible Herstellungsprozesse ermöglicht. In der vorliegenden Arbeit kommt daher ebenfalls MBE zur Epitaxie der Heterostrukturen zum Einsatz.

Die Eignung eines Materialsystems bzw. einer Materialkombination als Heteroübergang für eine bestimmte Anwendung hängt dabei maßgeblich von der oben beschriebenen Art des sich bei der Materialkombination ausbildenden Heteroübergangs ab. Maßgeblich entscheidend hierfür sind die Bandlücken der beiden involvierten Materialien  $E_{g,A}$  und  $E_{g,B}$  und der Leitungs- und Valenzbandversätze  $\Delta E_L$  und  $\Delta E_V$ . Zur Verdeutlichung ist in Abb. 1-2 das Banddiagramm eines Typ I Heteroübergangs exemplarisch mit den genannten materialspezifischen Parametern dargestellt.

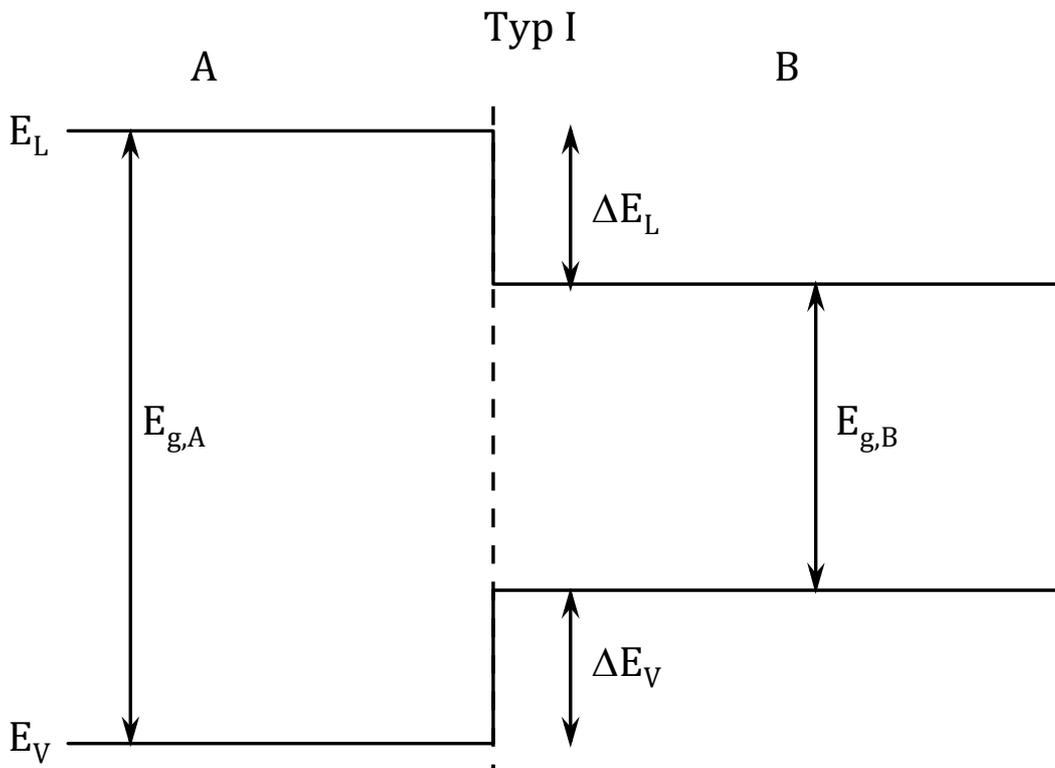


Abb. 1-2: Banddiagramm einer exemplarischen Heterostruktur des Typs I.

Die möglichen Anwendungen sind dabei vielfältig und umfassen zumeist höchstperformante nano-elektronische Bauelemente. Typische Beispiele sind der bereits erwähnte Hetero-Bipolartransistor (HBT) [2, S. 282], der modulationsdotierte Feldeffekttransistor (MODFET) [2, S. 401] oder der Heterostruktur-Laser bis hin zum Oberflächenemitter (engl. Vertical-Cavity Surface Emitting Laser – VCSEL) [2, S. 655]. Die Einsatzge-

biete der genannten Bauelemente sind meist Hochfrequenz-Anwendungen zur elektro-optischen Datenübertragung. Grundsätzlich sind Heterostrukturen das essenzielle Kernelement einiger höchst-performerer Heterobauelemente in der modernen Mikro- und Nanoelektronik.

## 1.2. Gruppe-IV-Halbleiter-Heterostrukturen

Das Feld der Heterostrukturen beschränkte sich zunächst auf III/V-Verbindungshalbleiter. Die ersten Gruppe-IV- Heterostrukturen basierten auf dem Si<sub>1-w</sub>Ge<sub>w</sub>-Materialsystem. Der Vorteil von Gruppe-IV- Heterostrukturen ist dabei so offensichtlich wie auch bedeutend. Sie erlauben die monolithische Integration auf Si, dem in der Mikro- und Nanoelektronik dominierenden Material, und daher eine deutliche Kostenreduktion.

Ein erheblicher Nachteil von Si und Ge ist jedoch deren indirekte Bandlücke, was deren Anwendung für Halbleiter-Heterostruktur-Laser exkludiert. An dieser Stelle kommt das Materialsystem Ge<sub>1-z</sub>Sn<sub>z</sub> ins Spiel. Bei einer Zugabe von 8 % bis 10 % Sn zu Ge ergibt sich je nach Verspannungszustand bereits ein direkter Halbleiter [13], [14], weshalb Ge<sub>1-z</sub>Sn<sub>z</sub> in den letzten Jahren das wichtigste Feld der Gruppe-IV basierten Halbleiterforschung war [15]–[19]. Ein weiterer Vorteil von Ge<sub>1-z</sub>Sn<sub>z</sub> ist die Erhöhung der Ladungsträgermobilitäten durch die Zugabe von Sn. Da Ge bereits die höchste bekannte Löcher-Mobilität aufweist wird Ge<sub>1-z</sub>Sn<sub>z</sub> als mögliches Kanal-Material künftiger p-FETs gehandelt [20]. Die größten Probleme bei der Realisierung von Ge<sub>1-z</sub>Sn<sub>z</sub>-Heterostrukturen ist jedoch die Kopplung zwischen Gitterkonstante und Bandlücke. Hierdurch sind Ge<sub>1-z</sub>Sn<sub>z</sub>-Heterostrukturen auf Ge stets kompressiv verspannt, was der Transition zum direkten Halbleiter entgegenwirkt. Hinzu kommt der Effekt der Sn-Segregation, welcher sowohl von der Wachstumstemperatur als auch vom Verspannungsgrad der Schicht beeinflusst wird.

Das essenzielle Ziel ist daher die Entkopplung der Bandlücke und Gitterkonstante des Materials. Das erlaubt wiederum die Herstellung von gitterangepassten Heterostrukturen und darüber hinaus Strain- und Bandgap-Engineering. [21], [22]. Dies wird durch die Legierung der Elemente Si, Ge und Sn zu Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> ermöglicht. Obwohl Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> bereits 1986 theoretisch vorausgesagt wurde [23] steht die Erforschung des Materialsystems im Vergleich zu Si<sub>1-w</sub>Ge<sub>w</sub> und Ge<sub>1-z</sub>Sn<sub>z</sub> noch am Anfang. Außerdem wird im Laufe der Arbeit noch ersichtlich, dass der Epitaxie von Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> einige Hürden entgegenstehen. Basierend auf den vorausgesagten Eigenschaften von Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> werden hauptsächlich zwei mögliche Anwendungen erforscht: Der Si integrierbare Heterostruktur-Laser [24]–[26] und Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub>-Feldeffekttransistoren für künftige Technologieknoten.

### 1.3. Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub>-Epitaxie anderer Forschungsgruppen

Dieser Abschnitt dient dazu die Arbeiten zur Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> Epitaxie des Instituts für Halbleitertechnik (IHT) und insbesondere die vorliegende Arbeit in den aktuellen Stand der Forschung einzugliedern.

Die Idee zur Epitaxie von Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub>, also der Legierung von Si, Ge und Sn, resultiert aus den bekannten Problemen der Temperaturempfindlichkeit der Ge<sub>1-z</sub>Sn<sub>z</sub>-Epitaxie [27], [28]. Doch während die Zahl der Forschungsgruppen und -arbeiten, welche sich mit Ge<sub>1-z</sub>Sn<sub>z</sub> beschäftigen stetig steigt gibt es aktuell recht wenige Forschungsgruppen, die die Epitaxie von Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> erforschen. Die derzeit an Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> forschenden Arbeitsgruppen sind in Tab. 1-1 aufgelistet. Dabei wird unterschieden zwischen der Epitaxie mittels MBE und mittels Niederdruck-Gasphasenabscheidung (engl. reduced pressure chemical vapor deposition – RPCVD).

<b>Gruppenleiter</b>	<b>Universität</b>	<b>Epitaxieverfahren</b>
R. Soref	University of Massachusetts Boston, USA	Theorie 1991
Chang & Chuang	University of Illinois at Urbana, Illinois, USA	Theorie 2007
J. Schulze	Universität Stuttgart, Deutschland	MBE
S. Zaima	Nagoya Universität, Japan	MBE
D. Buca	Forschungszentrum Jülich, Deutschland	RPCVD
J. M. Hartmann	CEA-Leti, Frankreich	RPCVD
O. Moutanabbir	Polytechnique Montreal, Kanada	RPCVD
J. Kouvetakis	Arizona State University, USA	RPCVD

Tab. 1-1: Übersicht der Arbeitsgruppen, welche sich mit der Epitaxie und theoretischen Betrachtungen von Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> beschäftigen.

Die ersten Ideen und theoretischen Betrachtungen zu den Eigenschaften von Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> erfolgten bereits 1986 durch Richard Soref und Clive Perry [21], [23]. Der Gedanke war es die Probleme der Legierung von Ge und Sn durch die hohe Gitterfehlpassung zu umgehen [21]. Außerdem bietet sich das Materialsystem zur Herstellung von gitterangepassten Heterostrukturen, sowohl für optische als auch elektronische Bauelemente, an [21].

Die erste Synthese von Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> Schichten gelang 2003 mittels RPCVD durch die Gruppe von John Kouvetakis an der Arizona State University [29]. Bemerkenswert ist hierbei, dass im Gegensatz zu anderen Forschungsgruppen, welche sich mit der Epitaxie Sn-basierter Gruppe-IV Halbleiter beschäftigen, SnD<sub>4</sub> statt SnCl<sub>4</sub> als Sn Präkursor verwendet wurde. Die maximalen Si und Sn Konzentrationen lagen bei 14 % bzw. 6 %. Im Jahre 2004 erfolgten dann die ersten experimentellen Daten bezüglich der optischen und strukturellen Eigenschaften von Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> [30].

Ab 2007 folgten immer mehr theoretische Arbeiten zur Simulation von Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> Heterostrukturen zur Verwendung in optoelektronischen Bauelementen. Obwohl bis heute einige Veröffentlichungen zur Epitaxie und Funktionalisierung von Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> Strukturen mittels RPCVD entstanden [14]–[16], [19]–[21] wurde bisher der angestrebte elektrisch gepumpte Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub>-Laser noch nicht realisiert.

Der RPCVD basierten Epitaxieforschung von Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> steht die MBE basierte Epitaxie, zu der auch diese Arbeit gehört, gegenüber. Neben der Arbeitsgruppe am IHT der Universität Stuttgart gibt es nach aktuellem Wissenstand weltweit nur eine weitere Forschungsgruppe, die mittels MBE die Epitaxie von Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> erforscht: Die Arbeitsgruppe von Shigeaki Zaima an der Nagoya Universität in Japan. Genau wie am IHT verwendet diese Gruppe einen Elektronenstrahlverdampfer zur Verdampfung von Si und Effusionszellen für Ge und Sn.

Darüber hinaus ist die Gruppe um Zaima aktuell die einzige Forschungsgruppe neben dem IHT, welche bisher die Epitaxie von Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> mit ausreichend hohen Si und Sn Konzentrationen zur Erfüllung der Gitteranpassung auf Ge erreicht haben. Es wurden daher, ähnlich wie am IHT, erste Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub>-Strukturen hergestellt, um unterschiedliche Untersuchungsschwerpunkte zu verfolgen. Zunächst wurden 2013 erste Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub>-

Schichten hergestellt und anschließend mittels Röntgendiffraktometrie (engl. X-ray diffraction – XRD), Raman-Spektroskopie und Rutherford-Rückstreuungsspektroskopie (engl. Rutherford backscattering spectroscopy – RBS) charakterisiert [34]–[36]. Im gleichen Zeitraum begannen auch die Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> Arbeiten am IHT. Eine systematische Optimierung der Wachstumsparameter blieb jedoch aus und ist daher das Ziel der vorliegenden Arbeit und wird in Kapitel 5 behandelt.

Darüber hinaus wurden erste Ge- Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub>-Heterostrukturen hergestellt und mittels harte Röntgen Photoelektronenspektroskopie (engl. hard X-ray photoelectron spectroscopy – HAXPES) analysiert, um das Vorliegen des Typ I Heteroübergangs zwischen Ge und Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> nachzuweisen [37]–[39]. Im Vergleich zur vorliegenden Arbeit wurden jedoch überwiegend optische Analyseverfahren zur Charakterisierung der hergestellten Heterostrukturen verwendet.

Im Gegensatz dazu stellt diese Arbeit den Anspruch, das Materialsystem mittels elektrischer Analyseverfahren anhand von elektrischen Bauelementen zu charakterisieren. Dies hat den Vorteil, dass das Material sowohl charakterisiert als auch funktionalisiert, also auf seine Eignung in elektrischen Bauelementen und Prozessierbarkeit untersucht wird. Dieser Aspekt wird umfassend in Kapitel 6 dargestellt und diskutiert.

#### 1.4. Zielsetzung und Struktur der Arbeit

Das Ziel dieser Arbeit ist die systematische Untersuchung und Optimierung der Epitaxie von Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub>. Aufgrund der sehr gut etablierten virtuellen Ge-Substrattechnologie (Ge-VS) am IHT beschränkt sich die Arbeit zunächst auf die Epitaxie von auf Ge gitterangepasstem Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub>. Im Vorfeld werden in Kapitel 3 zunächst einige Voruntersuchungen zur Ge<sub>1-z</sub>Sn<sub>z</sub>- und Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub>-Epitaxie diskutiert, um Handlungsweisen für die Arbeit aus den Ergebnissen abzuleiten. Anschließend erfolgt in Kapitel 4 eine umfangreiche Charakterisierung des verwendeten MBE-Systems, um die Probleme der Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub>-Epitaxie zu erkennen und diese durch die anschließend beschriebene Anpassung des MBE-Systems zu beheben. Die darauf aufbauende, systematische Optimierung der Epitaxie Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> ist Teil von Kapitel 5.

Ein zweiter Schwerpunkt der Arbeit liegt in der Epitaxie und Herstellung erster Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub>-Heterostruktur-Bauelemente. Die Arbeit beschränkt sich hierbei allerdings auf einfache Bauelemente wie Dioden. In Kapitel 6 ist daher der dafür notwendige Epitaxieprozess detailliert beschrieben. Anhand verschiedenster Analyseverfahren wird anschließend die Qualität der Bauelementstrukturen und deren Eignung zur nachfolgenden Prozessierung untersucht. Abschließend wird der Prozess zur Herstellung der elektrischen Bauelemente vorgestellt.

Diese hergestellten Bauelemente werden im letzten Teil der Arbeit zur Charakterisierung des Materialsystems verwendet. Der Schwerpunkt der Materialcharakterisierung in Kapitel 7 liegt dabei auf der Bestimmung der für das Design von Heteroübergängen wichtigen Materialparametern; der Bandlücke  $E_{g,\text{SiGeSn}}$  und der Leitungs- und Valenzbandversätze  $\Delta E_L$  und  $\Delta E_V$ .

Der abschließende Ausblick der Arbeit in Kapitel 8 zeigt Möglichkeiten im Bereich der Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub>-Epitaxie auf, um in Zukunft auch virtuelle Ge<sub>1-z</sub>Sn<sub>z</sub>-Substrate mittels MBE herzustellen. Dies ermöglicht daraufhin auch Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub>-Zusammensetzungen ausserhalb der Gitteranpassung auf Ge zu adressieren und somit weitere Anwendungen von Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> zu erschließen.



## 2. Technologische Grundlagen

*Dieses Kapitel bildet die technologischen Grundlagen zur Auswertung und Diskussion der in dieser Arbeit vorgestellten Ergebnisse. Zunächst werden dabei die Grundlagen der Heteroepitaxie geschaffen. Der zweite Teil des Kapitels befasst sich mit Methoden zur Analyse der Kristallqualität der hergestellten Schichten. Im letzten Teil des Kapitels werden die Grundlagen der elektrischen Materialcharakterisierung thematisiert.*

### 2.1. Grundlegendes Merkmal der Heteroepitaxie

Die Heteroepitaxie ist gekennzeichnet durch die Epitaxie von mindestens zwei Materialien  $A$  und  $B$  mit unterschiedlichen Eigenschaften.

Die (Hetero-)Epitaxie kann grundsätzlich in drei verschiedene Wachstumsmodi unterschieden werden. Beim Frank-van-der-Merwe Wachstum bilden die Atome auf der Substratoberfläche zuerst eine vollständige Monolage (ML) bevor eine neue Monolage beginnt. Es wächst also eine Schicht nach der anderen, weshalb man auch von Schichtwachstum spricht. Im Gegensatz dazu steht das Volmer-Weber-Wachstum. Hierbei entstehen an mehreren Stellen auf der Substratoberfläche Kristallkeime, welche zu Inseln aufwachsen. Im weiteren Verlauf wachsen diese Inseln zu einem geschlossenen Film zusammen. Man spricht deshalb auch von Insel-Wachstum. Die Kombination dieser beiden Wachstumsmodi stellt das Stranski-Krastanov-Wachstum dar. Nach dem Wachstum einzelner Monolagen im Schichtwachstum formieren sich Inseln auf diesen Monolagen. [40] Dieser Wachstumsmodus liegt bei der Gruppe-IV-Heteroepitaxie vor.

Im Rahmen der Gruppe-IV Heteroepitaxie unterscheiden sich üblicherweise die Gitterkonstanten  $a_{0,A}$  und  $a_{0,B}$ , wodurch es zur Ausbildung unterschiedlicher Spannungszustände kommen kann. Typische Beispiele hierfür sind die Heteroepitaxie von  $\text{Si}_{1-w}\text{Ge}_w$  auf Si oder  $\text{Ge}_{1-z}\text{Sn}_z$  auf Ge.

Im Falle von pseudomorphem Wachstum gleichen sich die laterale Gitterkonstante der aufgewachsenen Schicht  $B$  und des (virtuellen) Substrats  $A$   $a_{\parallel,A} = a_{\parallel,B}$  (vgl. Abb. 2-1 a). Bei Überschreiten einer kritischen Schichtdicke kommt es zunächst zur Teilrelaxation (siehe Abb. 2-1 b). Wird die Schichtdicke weiter erhöht, ist die Schicht ab einem gewissen

Punkt vollständig relaxiert (siehe Abb. 2-1 c). Dieser Zustand ist dadurch gekennzeichnet, dass die laterale Gitterkonstante  $B$  dessen Gitterkonstante  $a_{0,B} = a_{\parallel,B}$  gleicht.

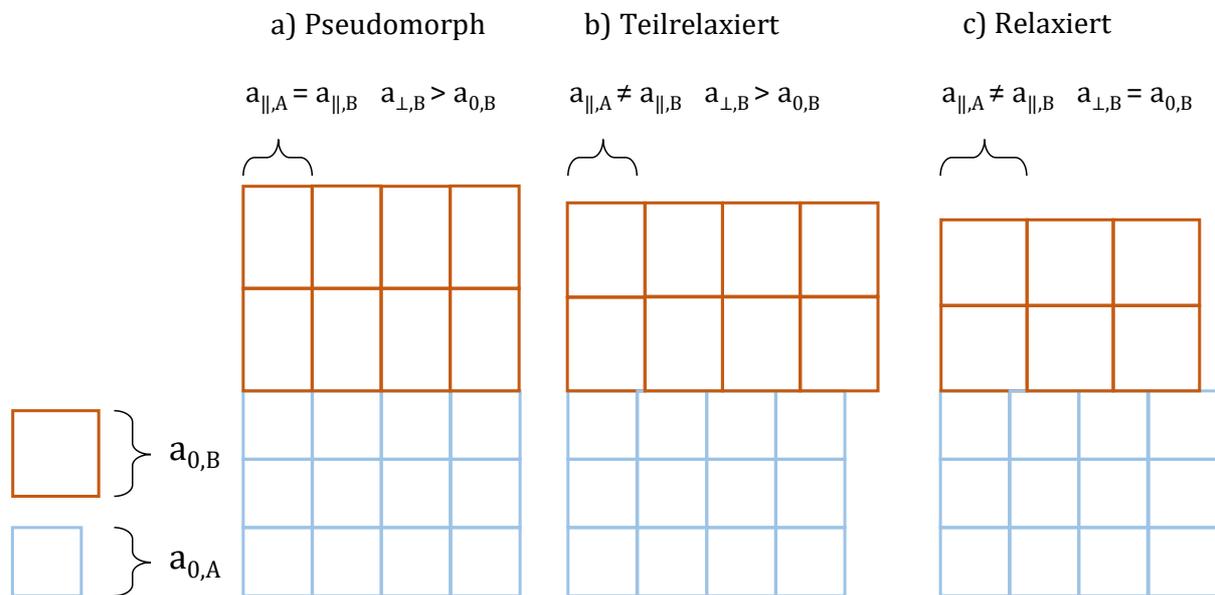


Abb. 2-1: Schematische Darstellung der drei möglichen Wachstumsmodi der Heteroepitaxie, a) Pseudomorph verspannt, b) Teilrelaxiert, c) Vollständig Relaxiert. (Eigene Darstellung nach [41] Bild 13.19)

Die Relaxation einer zunächst pseudomorph aufgewachsenen Schicht erfordert die Ausbildung von Linienversetzungen (engl. – misfit dislocation) (siehe Abb. 2-2 a). Es handelt sich dabei um eine offene, „gerissene“ Bindung im Kristall, welche sich an dieser Stelle linienförmig durch den Kristall zieht.

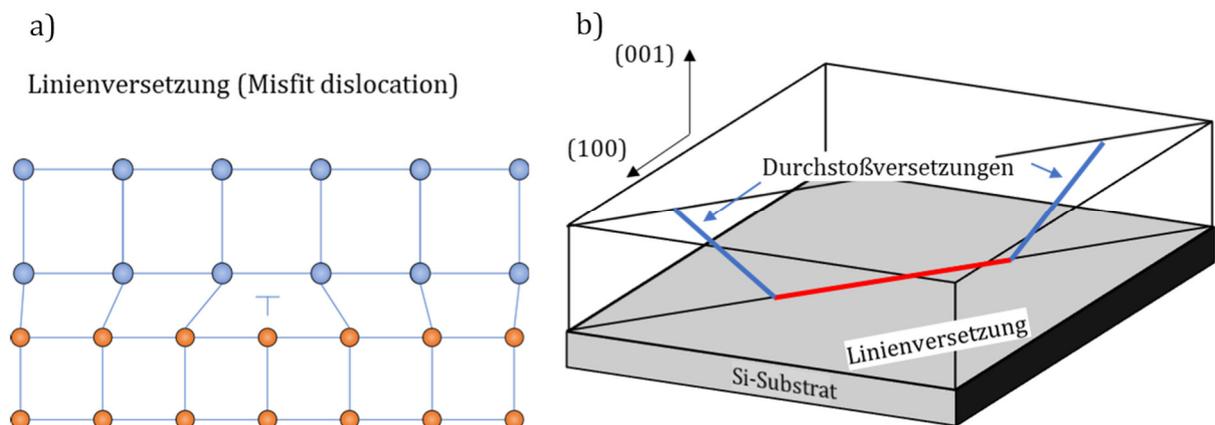


Abb. 2-2: Schematische Darstellung der möglichen Versetzungslinien bei der Heteroepitaxie. a) Linienversetzungen b) Durchstoßversetzungen (Eigene Darstellung nach Fig. 2.4 in [42])

An den Enden einer Linienversetzung ragen stets zwei Durchstoßversetzungen (engl. threading dislocation – TD) aus der Ebene heraus, welche sich entlang der (111)-Richtung

durch den Kristall ziehen (siehe Abb. 2-2 b). Aufgrund der offenen Bindungen handelt es sich dabei um einen hochleitfähigen Kanal. Durchstößt eine Durchstoßversetzung das elektrische Bauteil beeinflusst sie dessen Verhalten nachteilig. Es ist dabei von größter Priorität die Durchstoßversetzungsdichte innerhalb der aktiven Schicht so gering wie möglich zu halten. Bei den hier durchgeführten Epitaxie-Experimenten wird dabei stets auch die Durchstoßversetzungsdichte  $N_{\text{TDD}}$  (engl. threading dislocation density – TDD) analysiert.

Zur quantitativen Analyse des Verspannungszustandes einer Heterostruktur wird nachfolgend die Röntgendiffraktometrie vorgestellt und verwendet.

### 2.2. Sn-Segregation

Der Begriff Segregation im Rahmen der Epitaxie meint im Allgemeinen den Effekt der Oberflächen-Segregation. Der Effekt tritt dabei nicht nur bei der Epitaxie von Sn-Legierungen, sondern auch im Rahmen der Dotierung mittels Ko-Evaporation von Matrixmaterial und Dotierstoff auf. Eine ausführliche theoretische Beschreibung der Segregation von Sb während der Epitaxie von Sb-dotierten Si erfolgte 1988 durch H. Jorke [43].

Das Verständnis des Effektes erfordert dabei die Betrachtung der auf der Substratoberfläche stattfindenden Prozesse während des Epitaxieprozesses. Als Beispiel für die folgenden Erläuterungen dient der Einbau eines Sb-Atoms in eine Si-Matrix.

Da bei der Präparation der Substrate der Kristall nie exakt entlang einer Kristallebene durchtrennt wird besteht die Substratoberfläche aus einzelnen Kristallstufen. Sobald ein Atom eines Molekularstrahls auf die Substratoberfläche trifft, wird es von dieser zunächst adsorbiert und wird so zum Adatom (blau in Abb. 2-3). Anschließend diffundiert das Adatom auf der Oberfläche entlang. Ist die Oberflächendiffusionslänge größer als die Länge der Kristallstufen kann es an dieser anlagern und wird in den Kristall eingebaut (siehe Abb. 2-3). Dies ist anzustrebende Idealfall im Rahmen der monokristallinen Epitaxie. Im Falle einer zu geringen Oberflächendiffusionslänge kommt es statistisch gesehen entweder zur Desorption des Adatoms oder zur Keimbildung auf der Oberfläche. Die Oberflächendiffusionslänge wird dabei vom Material selbst und von der Oberflächentemperatur bestimmt.

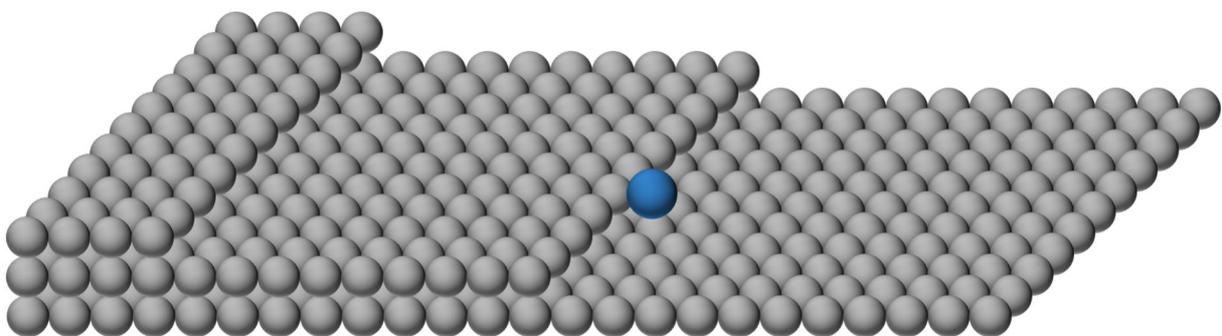


Abb. 2-3: Schematische Darstellung der Anlagerung eines Adatoms an einer Kristallstufe.

Im weiteren Verlauf wird die betreffende Kristalllage von einer weiteren überwachsen und eine neue Kristallstufe trifft oberhalb des eingebauten Adatoms auf dieses (siehe Abb. 2-4). Anschließend können statistisch mehrere Fälle auftreten.

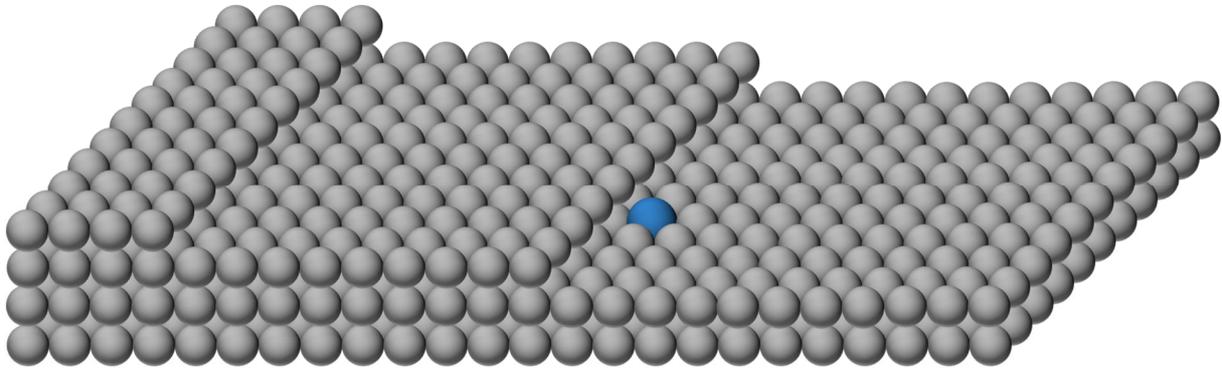


Abb. 2-4: Schematische Darstellung des Überwachsens eines eingebauten Adatoms mit einer neuen Kristallstufe.

Aufgrund der unterschiedlichen Größe des eingebauten Adatoms und der umgebenden Matrix ist es an dieser Stelle für die Oberfläche energetisch günstiger, wenn das eingebaute Adatom einen Platz mit einem Matrixatom der darüberliegenden Kristallstufe tauscht. Dies ist der eigentliche Effekt der Segregation. Das eingebaute Atom wird aus der Kristallmatrix segregiert und liegt nun wieder als Adatom auf der Substratoberfläche auf (siehe Abb. 2-5).

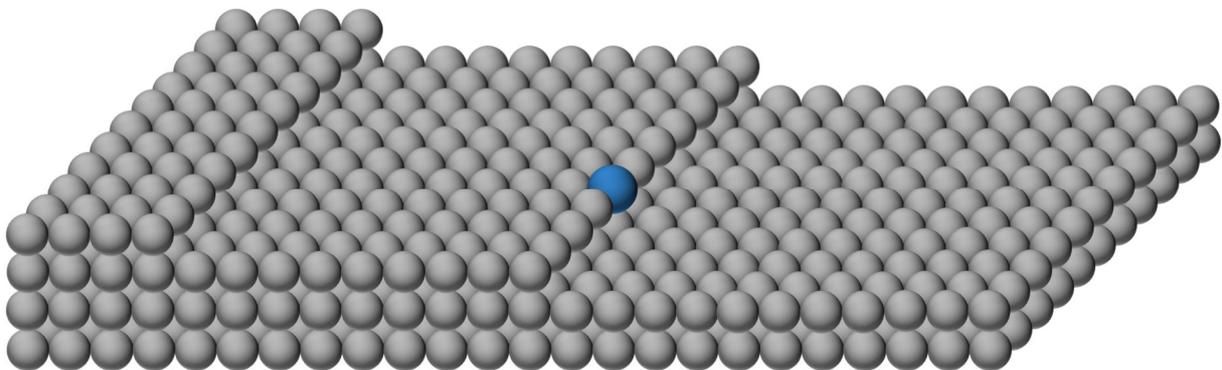


Abb. 2-5: Schematische Darstellung des segregierten Adatoms.

Die Segregation wird dabei stark von der Substrattemperatur beeinflusst. Der Prozess setzt sich dabei so lange fort, bis sich ein Gleichgewichtszustand auf der Substratoberfläche einstellt. Statistisch gesehen werden dabei trotz Segregation einzelne Atome in die Matrix eingebaut. Der Effekt wird dabei von H. Jorke [43] durch den Segregationskoeffizient  $S$  quantifiziert, welcher das Verhältnis aus in den Kristall

eingebauter Atome  $n$  zu auf der Oberfläche vorhandener Adatome  $n_s$  nach Gleichung (2-1) angibt.

$$S = \frac{n_s}{n} \quad (2-1)$$

Ein Faktor von  $S = 100$  gibt daher an, dass von 100 Adatomen lediglich eines in die Kristallmatrix eingebaut wird. Es kommt daher bis zum Erreichen der notwendigen Oberflächenkonzentration zu einem graduellen Anstieg der Volumenkonzentration des betreffenden Elements. Im Rahmen der Dotierung mittels Ko-Evaporation führt der Effekt dabei meistens lediglich zu einem Ausschmieren des Dotierprofils. Um dennoch ein rechteckförmiges Dotierprofil zu erreichen, muss die notwendige Oberflächenkonzentration vor Beginn der Ko-Evaporation auf die Probe abgeschieden werden.

Aufgrund der stark unterschiedlichen Größen des Sn-Atoms und des Ge-Atoms, aus welchem die Kristallmatrix hauptsächlich besteht, unterliegt der Einbau von Sn-Atomen bei der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxie ebenfalls stark der Segregation. Aufgrund der deutlich höheren, angestrebten Sn-Volumenkonzentrationen kommt es dabei sehr schnell zu einer vollständigen Bedeckung der Substratoberfläche mit Sn. Dies führt in vielerlei Hinsicht zu Problemen. Zum einen bilden Sn-Atome auf der Oberfläche beim Aufeinandertreffen Cluster der metallischen  $\beta$ -Sn-Phase. Außerdem geht die für die Epitaxie notwendige Kristallinformation verloren, sobald die Oberfläche vollständig mit Sn-Atomen bedeckt ist. Es kommt folglich zu einer hohen Zahl an Punktdefekten im Kristallvolumen als auch zum Zusammenbruch des Epitaxieprozesses. Die Sn-Segregation ist im Rahmen der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxie daher der dominante Störeffekt und zum Erreichen einer optimalen Kristallqualität zwingend zu minimieren.

Aus diesem Grund wird die Temperatursensitivität der Sn-Segregation und die dabei auftretenden Probleme im Rahmen eines  $\text{Ge}_{1-z}\text{Sn}_z$ -Epitaxieexperimentes in Kapitel 3 noch eingehend untersucht.

## 2.3. Methoden zur Charakterisierung von Halbleiterkristallen

### 2.3.1. Röntgendiffraktometrie

Das wichtigste Werkzeug zur Analyse der Kristallqualität am IHT ist die Röntgendiffraktometrie (X-ray diffraction – XRD). Die genaue Funktionsweise und Theorie hinter XRD ist in [41] zu finden. An dieser Stelle werden nur die in dieser Arbeit durchgeführten XRD-Analyseverfahren und die Methoden zur Auswertung der Ergebnisse vorgestellt.

#### ❖ $2\theta$ - $\omega$ -Abtastung

Bei der  $2\theta$ - $\omega$ -Abtastung wird der Röntgeneinfallswinkel  $\omega$  und der Winkel zwischen ein- und ausfallender Strahlung  $2\theta$  gleichermaßen so verändert, dass der Einfallswinkel stets dem Ausfallswinkel der Strahlung gleicht. Auf diese Weise lässt sich der Abstand der einzelnen Kristallebenen  $h$  nach Gleichung (2-2) bestimmen.

$$h = \frac{\lambda_{\text{Cu K-}\alpha}}{2 \cdot \sin(\theta)} \quad (2-2)$$

Dabei entspricht die Wellenlänge  $\lambda$  der charakteristischen Wellenlänge der Cu K- $\alpha$  Strahlung  $\lambda_{\text{Cu K-}\alpha} = 1,54059 \text{ \AA}$ . In dieser Arbeit wird dabei stets der symmetrische Si(004)-Reflex des Diamantgitters gemessen. Durch den Zusammenhang zwischen dem Kristallebenenabstand  $h$  und der Gitterkonstante  $a_0$  im Diamantgitter kann auf diese Weise die vertikale Gitterkonstante  $a_{\perp}$  nach Gleichung (2-3) berechnet werden.

$$a_{\perp} = 4 \cdot h = \frac{2\lambda_{\text{Cu K-}\alpha}}{\sin(\theta)} \quad (2-3)$$

Die Form und Breite der gemessenen Reflexe eignen sich außerdem zur quantitativen Bewertung der Kristallqualität, da sie die statistische Verteilung des Lagenabstandes der einzelnen Kristallebenen widerspiegeln.

Aufgrund der statistischen Schwankungen der Röntgenstrahlung verschiebt sich das  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum entlang der x-Achse von Messung zu Messung. Da das verwendete Si-Substrat als nahezu perfekt angesehen werden kann wird der Si(004)-Reflex daher zur Korrektur des  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrums verwendet. Der theoretische erwartete Brechungswinkel des Si(004) Reflexes beträgt  $2\theta = 69,1287^\circ$ . Bei einer Messung wird daher das

$2\theta$ - $\omega$ -Spektrum so korrigiert, dass der tatsächlich gemessene Si(004)-Reflex auf diesem Winkel zum Liegen kommt.

### ❖ *Reciprocal Space Map*

Bei der Epitaxie von Heterostrukturen ist neben der Kristallqualität die laterale Gitterkonstante  $a_{\parallel}$  von größter Bedeutung, da nur mithilfe ihrer Kenntnis Rückschlüsse auf den Spannungszustand der Struktur möglich sind. Die Bestimmung von  $a_{\parallel}$  ist jedoch mit der  $2\theta$ - $\omega$ -Abtastung des symmetrischen (004)-Reflexes nicht möglich. Dies erfordert die Aufnahme einer Reciprocal Space Map (RSM). Hierzu erfolgt bei unterschiedlichen Einfallswinkeln  $\omega$  eine  $2\theta$ - $\omega$ -Abtastung des asymmetrischen  $(\bar{2}24)$ -Reflexes [41]. Die Kurvenschar wird anschließend über den Koordinaten des reziproken Gitters  $q_x$  und  $q_z$  dargestellt. Zur übersichtlichen Darstellung werden die Koordinaten auf Basis der geometrischen Verhältnisse des Reflexes im Diamantgitter mithilfe von Gleichung (2-4) und (2-5) in die laterale Gitterkoordinate  $a_x = a_{\parallel}$  und die vertikale Gitterkoordinate  $a_z = a_{\perp}$  umgerechnet.

$$a_{\perp} = \frac{4}{q_z} \quad (2-4)$$

$$a_{\parallel} = -\frac{\sqrt{8}}{q_x} \quad (2-5)$$

Exemplarisch für die beiden Grenzfälle des Spannungszustandes einer Heterostruktur zeigt Abb. 2-6 exemplarisch ein RSM einer pseudomorph verspannten  $\text{Ge}_{1-z}\text{Sn}_z$ -Schicht auf einem relaxierten virtuellen Ge-Substrat. Die beiden Spannungszustände sind dabei durch die Relaxationslinie und die Pseudomorphielinie gekennzeichnet.

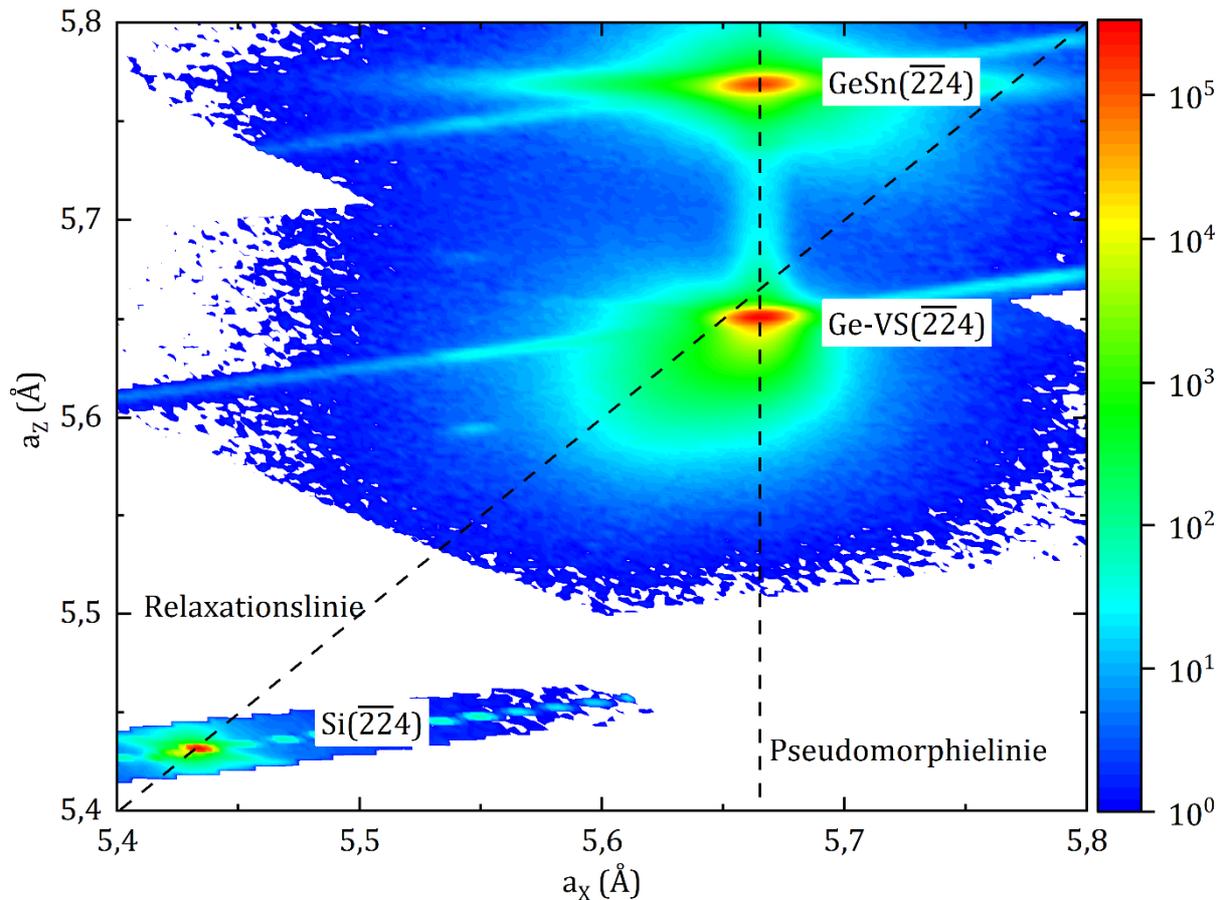


Abb. 2-6: Exemplarisches RSM einer Si-Ge-Ge<sub>1-z</sub>Sn<sub>z</sub>-Heterostruktur.

Zur Quantifizierung des Spannungszustandes einer Schicht muss im nächsten Schritt zunächst die relaxierte Gitterkonstante  $a_0$  aus der vertikalen und lateralen Gitterkonstante  $a_{\perp}$  und  $a_{\parallel}$  berechnet werden. Die hierfür verwendete Beziehung gemäß Gleichung (2-6) (Gleichung (2) in [44]).

$$a_0 = a_{\perp} \cdot \frac{1}{1 + 2\mu} + a_{\parallel} \cdot \frac{2\mu}{1 + 2\mu} \quad (2-6)$$

Dabei ist der Faktor  $\mu$  das Verhältnis der Elastizitätskonstanten  $C_{11}$  und  $C_{12}$  nach Gleichung (2-7). Der Einfachheit halber wird für  $C_{11}$  und  $C_{12}$  die Werte von Ge [10] verwendet.

$$\mu = \frac{C_{12}}{C_{11}} = \frac{4,83 \cdot 10^{10} \text{ Pa}}{1,289 \cdot 10^{11} \text{ Pa}} = 0,3747 \quad (2-7)$$

Anschließend kann die laterale Verspannung  $\varepsilon_{\parallel}$  der aufgewachsenen Schicht berechnet werden. Sie ist nach Gleichung (2-8) definiert als Differenz aus lateraler Gitterkonstante  $a_{\parallel}$  und relaxierter Gitterkonstante  $a_0$ , bezogen auf  $a_0$ .

$$\varepsilon_{\parallel} = \frac{a_{\parallel} - a_0}{a_0} \quad (2-8)$$

Eine negative Verspannung  $\varepsilon_{\parallel} < 0$  entspricht demnach einer Druckverspannung, während eine positive Verspannung  $\varepsilon_{\parallel} > 0$  einer Zugverspannung entspricht. Die in dieser Arbeit angestrebte Gitteranpassung resultiert in  $\varepsilon_{\parallel} = 0$ .

Neben der quantitativen Auswertung des RSMs zur Bestimmung der Kristallparameter erlaubt die Form der sichtbaren Reflexe Rückschlüsse auf die makroskopische Kristallstruktur wie beispielsweise Mosaizität, Inselwachstum und Verspannung. Zur Verdeutlichung dient die aus [41, S. S. 480] entnommene Abb. 2-7.

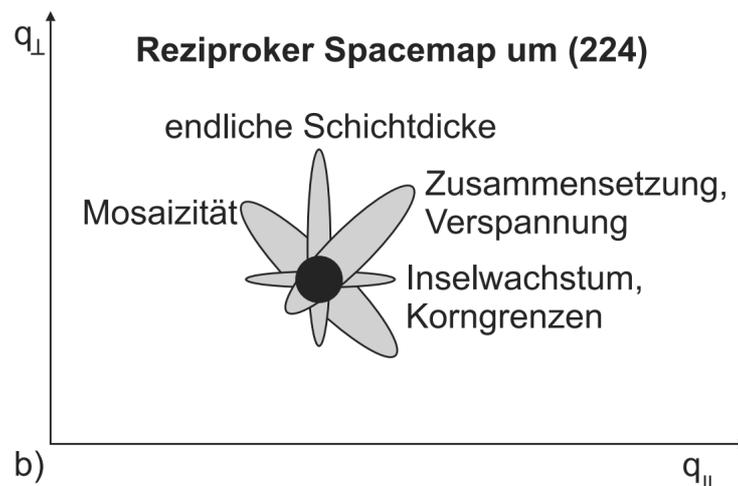


Abb. 2-7: Schematische Darstellung der RSM-Reflexform und der daraus möglichen Aussagen über die makroskopische Kristallstruktur (Grafik entnommen aus [41] S. 480)

### ❖ Analyse auf Polykristallinität

Aufgrund der notwendigen niedrigen Substrattemperaturen bei der Epitaxie von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  ist vor allem auch die Bildung von Poly-Kristallinität ein ernstzunehmendes Problem. Die in dieser Arbeit untersuchten Schichten werden daher stets auch mittels XRD auf Poly-Kristallinität untersucht. Hierzu wird ein  $2\theta$ -Spektrum bei einem flachen Einfallswinkel von  $\omega = 3^\circ$ , wie in Abb. 2-8 exemplarisch dargestellt, aufgezeichnet. Dabei

ist zu vermeiden, dass der Hauptreflex des Kristallgitters (004) und dessen Vielfache aufgezeichnet werden, wodurch das Signal etwaiger Poly-Reflexe überdeckt werden würde. Deshalb wird das Substrat vor der Messung um  $\varphi = 30^\circ$  gedreht. Dies hat zur Folge, dass im Falle eines perfekten Einkristalls kein deutlicher Reflex im  $2\theta$ -Spektrum erkennbar ist.

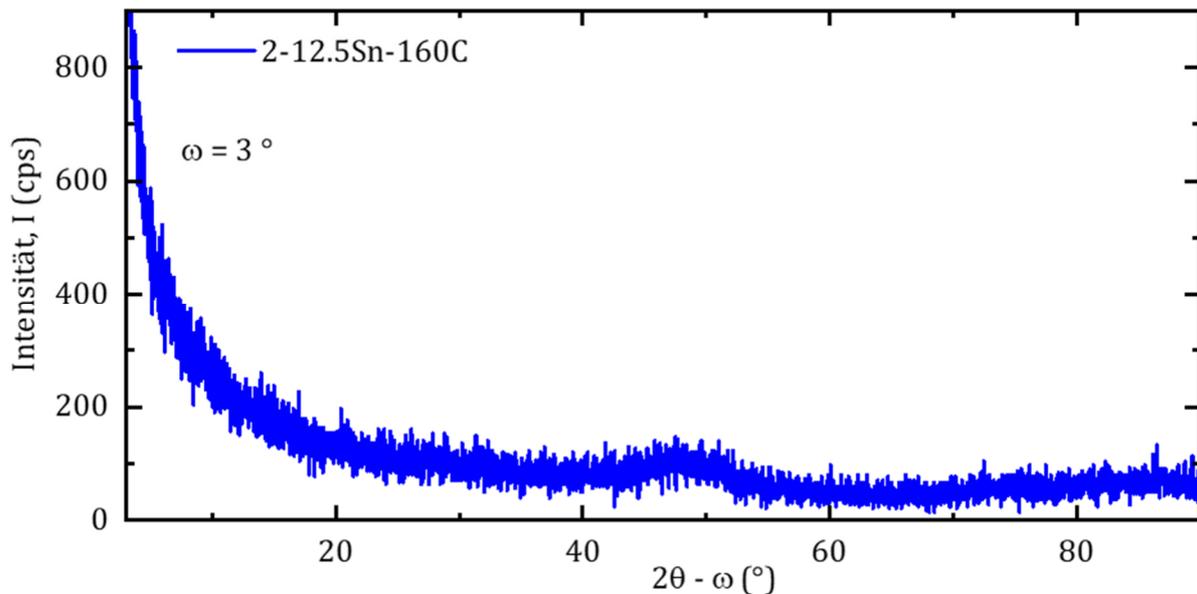


Abb. 2-8: Exemplarisches  $2\theta$ -Spektrum ohne Anzeichen von Polykristallinität

### 2.3.2. Rutherford Backscattering Spektroskopie

Die Rutherford Backscattering Spektroskopie (RBS) eignet sich zur genauen quantitativen Zusammensetzungsanalyse von Halbleiterstrukturen. Die Probe wird dabei mit hoch-energetischen ( $0,2 \text{ MeV} \leq E \leq 4 \text{ MeV}$ ) Alphateilchen ( $^4\text{He}$ ) beschossen, welche wiederum an Atomen der Probe rückgestreut werden. Die rückgestreuten Ionen werden dabei auf deren Energie analysiert. Sie hängt von der ursprünglichen Energie der Ionen und der Masse des dabei getroffenen Atoms der Probe ab. Eine detaillierte Beschreibung des Verfahrens ist in [45] zu finden. Die Spektroskopie der Energie erlaubt daher Rückschlüsse auf die Anzahl und Art der in der Probe enthaltenen Elemente und somit der Probenzusammensetzung.

In Abb. 2-9 ist exemplarisch ein RBS-Spektrum einer auf Ge gitterangepassten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht dargestellt. Hierbei können die einzelnen Peaks den Legierungsbestandteilen zugeordnet werden. Bei der RBS-Analyse von Halbleiterkristallen werden

zwei Arten der Rückstreuung betrachtet: das zufällige Signal (engl. Random) und das „Channeling“-Signal. Bei der Messung des „Random“-Signals erfolgt keine gezielte Ausrichtung des Teilchenstrahls zur Kristallstruktur, sodass es zur zufälligen Rückstreuung der Alphateilchen kommt. Das „Random“-Signal erlaubt daher wie beschrieben Rückschlüsse auf die Zusammensetzung der Schicht. Eine nachfolgende simulative Auswertung der Messergebnisse erlaubt dabei die Bestimmung der Zusammensetzungen und Dicken der Schichten der analysierten Probenstruktur.

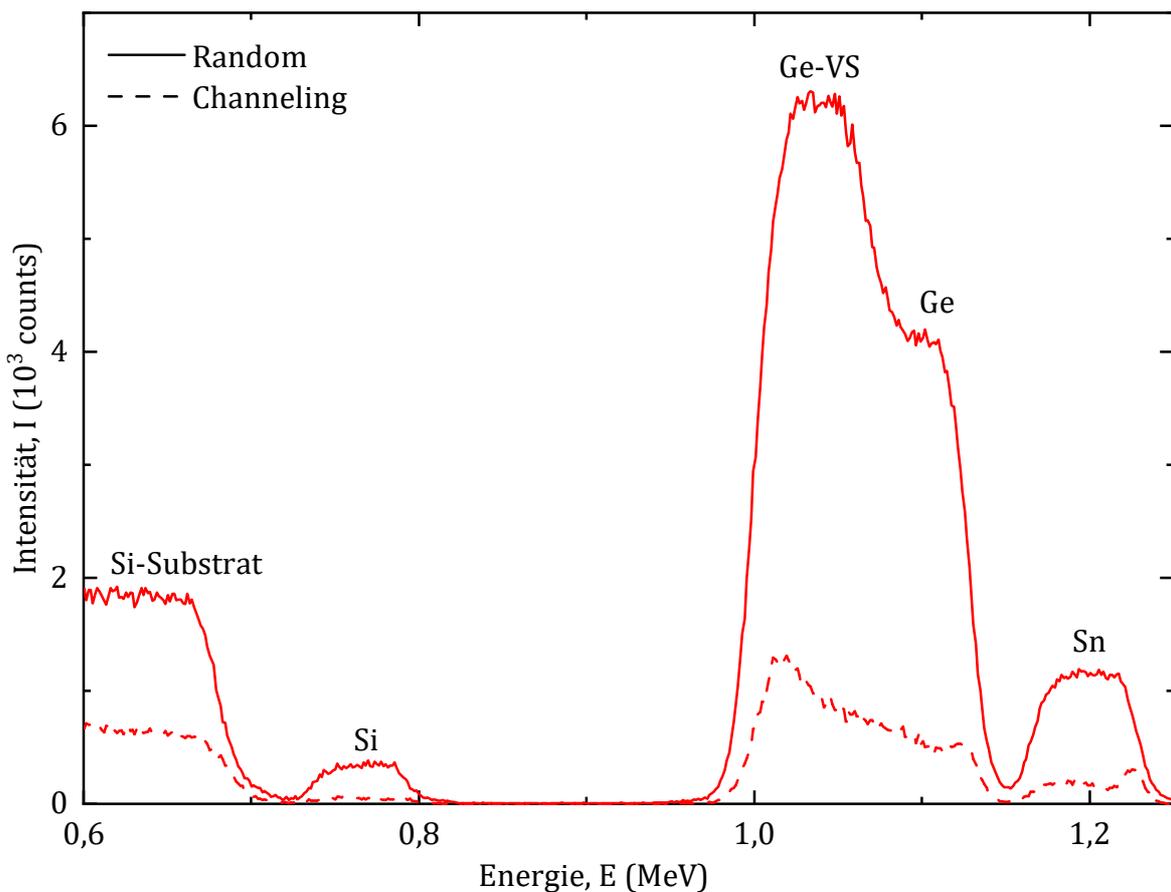


Abb. 2-9: Exemplarisches RBS-Spektrum einer  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht. Das Random-Signal (durchgezogene Linie) eignet sich zur Analyse der Zusammensetzung. Das Channeling-Signal (Strichlinie) eignet sich zur Bewertung der Kristallqualität.

Im Gegensatz hierzu wird bei der Messung des Channeling-Signals der Ionenstrahl auf die in der Kristallstruktur entstehenden Kanäle ausgerichtet. Im Fall eines perfekten Einkristalls geht daher das Messsignal gegen null, da der Teilchenstrahl ungehindert den Kristallkanal passiert und es somit zu keiner Rückstreuung an Kristallatomen kommt. Im Falle eines realen, imperfekten Einkristalls gibt es jedoch verschiedenste Arten von Defekten, welche auch auf Zwischengitterplätzen liegen, an denen der Teilchenstrahl

hierbei zurückgestreut wird. Die Höhe des Channeling-Signals erlaubt daher einen unmittelbaren Rückschluss auf die Zahl an Defekten im Kristallvolumen. Als qualitatives Bewertungskriterium dient dabei das Verhältnis  $X_{\min}$  zwischen Channeling- und Random-Signal nach Gleichung (2-9).

$$X_{\min} = \frac{\int I_{\text{Random}}(E) dE}{\int I_{\text{Channeling}}(E) dE} \quad (2-9)$$

Die in dieser Arbeit diskutierten RBS-Analysen entstanden im Rahmen von Kooperationen und wurden am Forschungszentrum Jülich (FZJ) bzw. am Helmholtzzentrum Dresden Rossendorf (HZDR) durchgeführt.

### 2.3.3. Transmissionen-Elektronen-Mikroskopie

Die Transmissionen-Elektronen-Mikroskopie (TEM) ist ein Teilgebiet der Elektronenmikroskopie. Hierbei wird ein Querschnitt des Halbleiterkristalls im Rahmen einer aufwändigen Probenpräparation auf Dicken im Bereich  $20 \text{ nm} \leq d \leq 300 \text{ nm}$  [45] rückgedünnt. Eine ausführliche Beschreibung der Probenpräparation ist in [46, S. 173] Hierdurch ist es auf die Probe treffenden Elektronen möglich diese zu passieren. Das Verfahren ist im Detail in [45] beschrieben.

Die TEM erlaubt daher die detaillierte Betrachtung der Kristallstruktur im Querschnitt. Aufgrund der Sensitivität des Signals können auf diese Weise Legierungsinhomogenitäten, Kristalldefekte und Durchstoßversetzungen sichtbar gemacht werden. Abb. 2-10 zeigt eine typische TEM-Aufnahme des Querschnitts einer defektreichen, relaxierten Ge-Schicht. Die Durchstoßversetzungen sind dabei deutlich erkennbar. Auf die Relevanz der Anzahl an Durchstoßversetzungen wird später noch im Detail eingegangen.

Die Anzahl der Durchstoßversetzungen wird anschließend auf die Größe des sichtbaren Ausschnitts normiert und quadriert um auf diese Weise die Durchstoßversetzungsdichte  $N_{\text{TDD}}$  zu bestimmen.

Die in dieser Arbeit diskutierten TEM-Ergebnisse entstanden im Rahmen einer Projektkooperation an der Humboldt-Universität zu Berlin und wurden von Dr. Holm Kirmse durchgeführt.

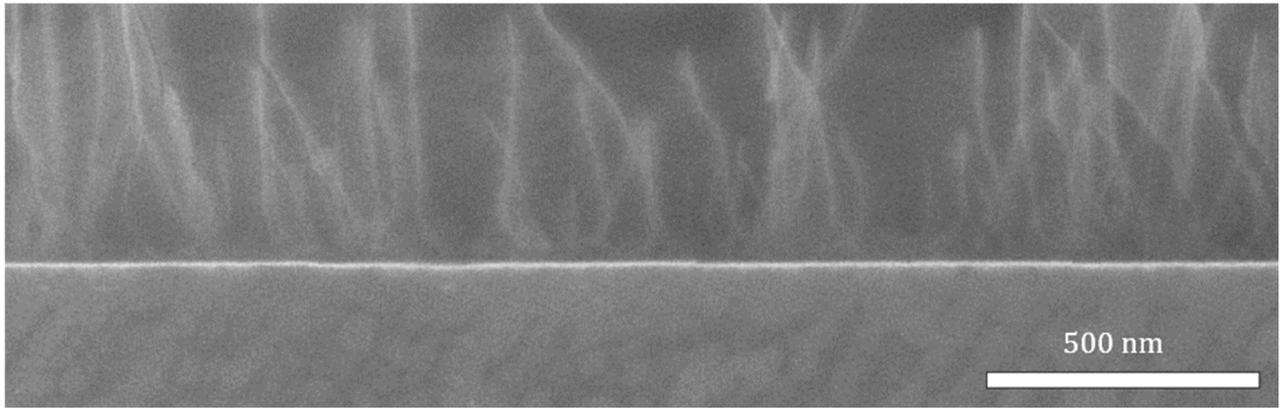


Abb. 2-10: Exemplarische TEM-Aufnahme einer relaxierten Ge-Schicht auf einem Si-Substrat.

### 2.3.4. Energiedispersive Röntgenspektroskopie

Im Rahmen der zuvor beschriebenen TEM-Analysen wurden die Proben gleichzeitig einer energiedispersiven Röntgenspektroskopie (engl. energy dispersive X-ray spectroscopy – EDXS) unterzogen. Durch die Interaktion der Probe mit dem Elektronenstrahl entsteht dabei Röntgenstrahlung. Die Wellenlänge der Röntgenstrahlung ist dabei charakteristisch für das an der Interaktion beteiligte Material. Auf diese Weise kann die Zusammensetzung der zu analysierenden Probe untersucht werden. Eine detaillierte Beschreibung des Verfahrens und der Auswertung der Ergebnisse ist in [45, S. 98] beschrieben.

## 2.4. I(U)-Charakterisierung von p(i)n-Dioden

Im Rahmen dieser Arbeit wurden die hergestellten Epitaxieschichten mit der in Kapitel 6 beschriebenen Prozesssequenz zu diskreten Bauelementen weiterprozessiert. Die Dioden wurden anschließend einer elektrischen Charakterisierung unterzogen. Die Ergebnisse erlauben dabei Rückschlüsse auf die elektrischen Eigenschaften und die Qualität der hergestellten Epitaxieschichten. In diesem Abschnitt wird allgemein die dabei durchgeführte Messung und die Auswertung der Ergebnisse beschrieben.

Zur statischen Strom-Spannungs-Charakterisierung (I(U)-Charakterisierung) wurde der am IHT verfügbare Gleichstrom-Messplatz verwendet. Er besteht aus einem Halbleitertester vom Typ *Keithley SCS 4200* und einer halbautomatischen Positionierungseinheit des Herstellers *Karl Süss*.

Die I(U)-Charakterisierung von p(i)n-Dioden erfolgt am IHT nach einem festgelegten Schema. Die an die Diode angelegte Spannung  $U$  variiert dabei in einem Bereich von  $-1 \text{ V} \leq U \leq 1 \text{ V}$  mit einer Schrittweite von  $\Delta U = 0,01 \text{ V}$ . Der Strom  $I$  durch die Diode wird zu deren Schutz auf  $I_{\max} = 0,1 \text{ A}$  begrenzt. Zur Erläuterung der nachfolgenden Auswertung ist in Abb. 2-11 eine typische I(U)-Charakteristik einer Ge-Diode der Probe *3-0.0Sn-GeRef* dargestellt.

Um eine Aussage über den Stromfluss im Bauelement zu ermöglichen, werden unterschiedlich große Bauelemente analysiert. Hierzu befinden sich auf dem verwendeten Maskensatz (siehe Anhang A) Dioden mit unterschiedlichem Radius der Mesa  $1,5 \mu\text{m} \leq r_M \leq 80 \mu\text{m}$ .

Die gemessenen I(U)-Charakteristiken werden im Rahmen der Auswertung auf die Querschnittsfläche der Mesa  $A_M$  (Stromdichte-Charakteristik) sowie auf den Umfang der Mesa  $U_M$  (Umfangstromdichte-Charakteristik) normiert dargestellt. Eine Proportionalität der I(U)-Charakteristiken auf  $A_M$  weist dabei auf einen Stromfluss durch das Diodenvolumen hin. Dies ist der anzustrebende Fall. Eine Proportionalität der I(U)-Charakteristiken auf  $U_M$  ist hingegen ein Hinweis einen Stromfluss entlang der Oberfläche der Mesa, hervorgerufen durch eine unzureichende Passivierung der geätzten Oberfläche des Halbleiters. Im Falle einer Volumenproportionalität der I(U)-Charakteristiken erlaubt

die Betrachtung des Verhaltens im Sperrbereich außerdem qualitative Rückschlüsse auf die Zahl der Defekte und somit die Kristallqualität der hergestellten Schichten.

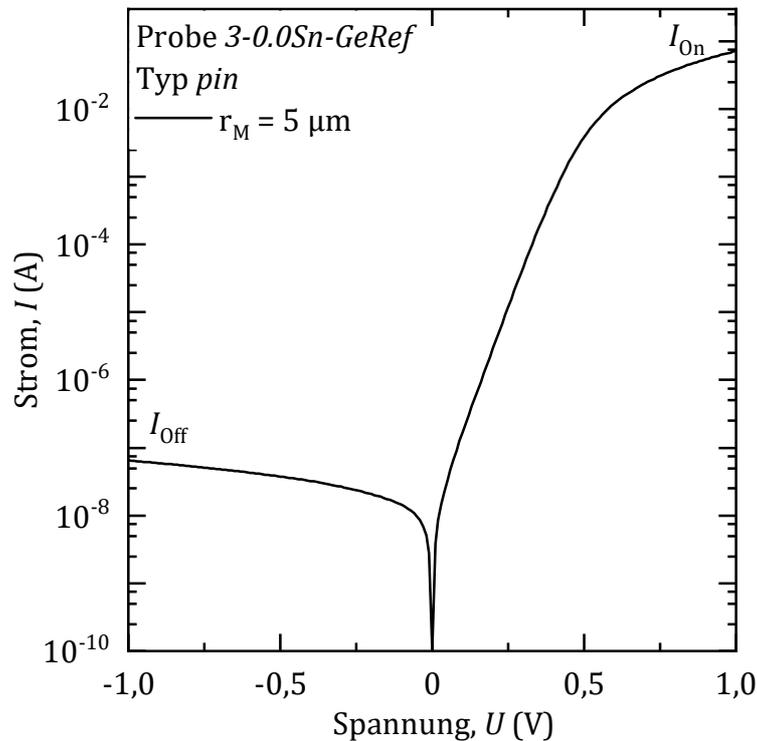


Abb. 2-11: Exemplarische I(U)-Charakteristik einer Ge-Diode des Typs *pin* mit  $r_M = 5 \mu\text{m}$  der Probe *3-0.0Sn-GeRef*

Die qualitative Bewertung der I(U)-Charakteristik erfolgt zunächst nach visuell offensichtlichen Parametern, welche anschließend quantitativ erfasst werden können. Zunächst wird die Höhe der Stromdichte im Sperrzustand bei  $U = -1 \text{ V}$  ( $J_{-1V}$ ) betrachtet. Er gilt als Maß für die Zahl der Defekte und wird zur qualitativen Bewertung und Vergleich der Kristallqualität herangezogen.

Ein weiterer visuell offensichtlicher Parameter ist das Verhältnis des Stromes im leitenden Zustand bei  $U = 1 \text{ V}$  (On-Strom  $I_{\text{On}}$ ) zum Strom im Sperrzustand bei  $U = -1 \text{ V}$  (Off-Strom  $I_{\text{Off}}$ ), dem sog. On-Off-Stromverhältnis  $I_{\text{On}}/I_{\text{Off}}$ .

Zur quantitativen Bewertung der I(U)-Charakteristik werden weitere typische Parameter von p(i)n-Dioden aus den I(U)-Charakteristiken extrahiert. Als Basis hierfür dient ein einfaches statisches Ersatzschaltbild einer realen p(i)n-Diode, bestehend aus einer idealen p(i)n-Diode und einem Serienwiderstand  $R_S$ . Die ideale p(i)n-Diode wird durch die Shockley-Gleichung (2-10) Gleichung (127) in [2, S. 119] beschrieben.

$$I = I_S \cdot \exp\left(\frac{U}{\eta \cdot U_T} - 1\right) \quad (2-10)$$

Dabei ist  $I_S$  der Sperrsättigungsstrom der Diode und  $U_T = k_B T / q$  die Thermospannung bei einer Temperatur  $T$ . Hierbei gilt für alle im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Analysen  $T = 300$  K.

Durch Erweiterung der Shockley-Gleichung um den Serienwiderstand  $R_S$  ergibt sich Gleichung (2-11). Die wichtigsten Parameter zur quantitativen Bewertung einer realen p(i)n-Diode sind hierbei der Serienwiderstand  $R_S$  und der Idealitätsfaktor  $\eta$ .

$$I = I_S \cdot \exp\left(\frac{U - R_S \cdot I}{\eta \cdot U_T} - 1\right) \quad (2-11)$$

Zur Berechnung des Serienwiderstands  $R_S$  wird diese Beziehung in Gleichung (2-11) überführt. Auf diese Weise kann die Berechnung numerisch erfolgen.

$$R_S = \frac{dU}{dI} \left( I \cdot \frac{dU}{dI} \right) \quad (2-12)$$

Nach der Berechnung des Serienwiderstands  $R_S$  kann die reale Diodengleichung (2-10) um den Serienwiderstand  $R_S$  zur Gleichung (2-10) korrigiert werden. Durch weiteres Umformen erhält man anschließend Gleichung (2-13), welche am IHT standardgemäß zur Berechnung des Idealitätsfaktors  $\eta$  benutzt wird.

$$\eta = \left( \frac{d}{dI} (\ln I) \cdot k_B \cdot T \right)^{-1} = f(U) \quad (2-13)$$

Der Idealitätsfaktor  $\eta(U)$  ist dabei eine Funktion der Diodenspannung  $U$ . Im Idealfall ergibt sich dabei in einem bestimmten Spannungsbereich ein konstanter Idealitätsfaktor, was durch ein Plateau in der  $\eta(U)$ -Charakteristik zu erkennen ist. An dieser Stelle kann der in Gleichung (2-11) verwendete Idealität  $\eta$  abgelesen werden.

In der Realität bildet sich dabei nicht zwingend ein eindeutiges Plateau in der  $\eta(U)$ -Charakteristik aus. Dadurch wird die reproduzierbare und vor allem vergleichbare Bestimmung des Idealitätsfaktors  $\eta$  erschwert. Aus diesem Grund wird die I(U)-

Charakteristik in halblogarithmischer Darstellung im betreffenden Spannungsbereich durch eine lineare Funktion, wie in Abb. 2-12 dargestellt, angepasst.

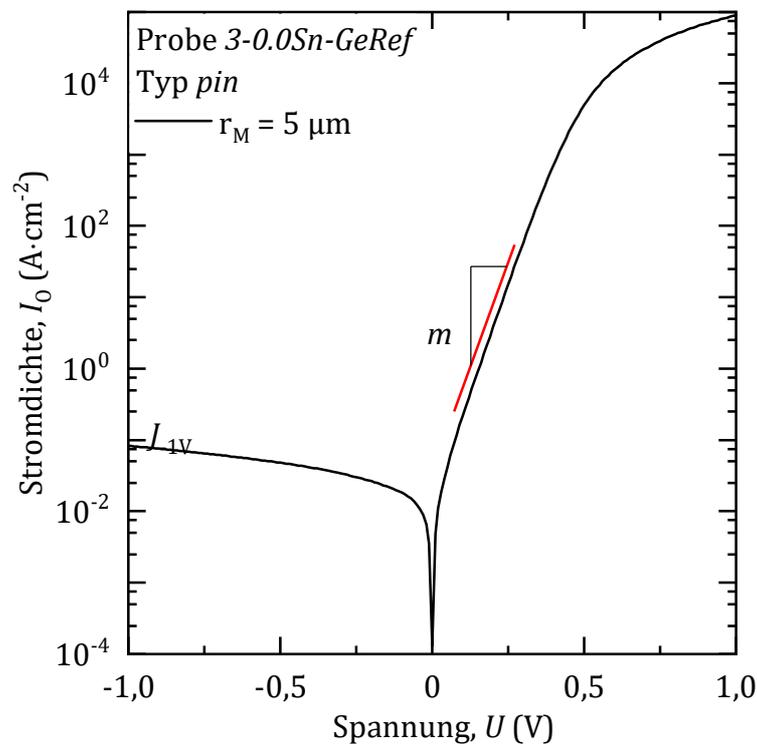


Abb. 2-12: Exemplarische I(U)-Charakteristik einer Ge-Diode des Typs *pin* mit  $r_M = 5 \mu\text{m}$  der Probe 3-0.0Sn-GeRef

Es wurde dabei ein Spannungsbereich von  $0,15 \text{ V} \leq U \leq 0,3 \text{ V}$  gewählt. Aus der Steigung  $m$  der linearen Anpassungsfunktion wird anschließend mittels Gleichung (2-14) der Idealitätsfaktor  $\eta$  berechnet.

$$\eta = (m \cdot k_B \cdot T)^{-1} \quad (2-14)$$

## 2.5. C(U)-Charakterisierung von p(i)n-Dioden

Die Kapazitäts-Spannungs-Charakterisierung (C(U)-Charakterisierung) wird in dieser Arbeit zur Messung der Sperrschichtkapazität  $C_S$  in Abhängigkeit der Diodenspannung  $U$  verwendet. Die Ergebnisse dienen daraufhin zur Bestimmung der Built-In-Spannung  $U_{bi}$  der Diode. Im Folgenden wird zunächst auf die Durchführung und Auswertung der Messergebnisse hierzu eingegangen.

Zur C(U)-Charakterisierung wurde ebenfalls der zuvor beschriebene Gleichstrom-Messplatz, bestehend aus einem Halbleitertester vom Typ *Keithley SCS 4200* und einer halbautomatischen Positionierungseinheit des Herstellers *Karl Süss*, verwendet.

Im Rahmen der C(U)-Charakterisierung wird an der zu charakterisierenden Diode eine Gleichspannung  $U$  mit einer aufmodulierten Wechselspannung  $u_{AC}$  angelegt. Die Gleichspannung  $U$  definiert dabei den Arbeitspunkt der Diode und wird im Rahmen dieser Arbeit stets in einem Bereich  $-1,2 \text{ V} \leq U \leq 0,4 \text{ V}$  mit einer Schrittweite von  $\Delta U = 0,01 \text{ V}$  variiert. Die Wechselspannung  $u_{AC}$  dient als Messspannung zur Messung der komplexen Impedanz der Diode. In der Analyseroutine des Halbleitertesters ist dabei ein Ersatzschaltbild, bestehend aus einer Kapazität  $C$  mit einem parallelen Leitwert  $G$  konfiguriert, so dass die komplexe Impedanz direkt in die Werte für  $C$  und  $G$  umgerechnet werden. Die Amplitude der Wechselspannung beträgt  $u_{AC} = 20 \text{ mV}$  bei einer Messfrequenz von  $f = 100 \text{ kHz}$ . Anhand der C(U)-Charakteristik erfolgt anschließend die weitere Auswertung.

Der Arbeitspunkt der Diode wird bei der hier diskutierten C(U)-Charakterisierung so gewählt, dass die Diode im Sperrbereich betrieben und somit die Sperrschichtkapazität  $C_S$  der Diode gemessen wird. Die Sperrschichtkapazität  $C_S$  einer p(i)n-Diode folgt im Allgemeinen der in Gleichung (2-15) (Gleichung (24) in [2]) dargestellten Beziehung.

$$C_S = A \cdot \sqrt{\frac{q \varepsilon_0 \varepsilon_r}{2} \cdot \frac{N_A N_D}{N_A + N_D}} \cdot \frac{1}{\sqrt{U_{bi} - U}} = \alpha \cdot \frac{1}{\sqrt{U_{bi} - U}} \quad (2-15)$$

Die C(U)-Charakterisierung der hergestellten Dioden erlaubt allerdings nur indirekt die Messung der Sperrschichtkapazität  $C_S$ . Aufgrund der Position und Größe der Al-Kontakt-

flächen (Al-Pad) auf dem Passivierungsoxid bilden diese eine Metall-Oxid-Halbleiter-Kapazität  $C_{\text{Pad}}$ .

Der erste Schritt der Auswertung erfordert daher zunächst die Bestimmung der Pad-Kapazität. Hierfür enthält der verwendete Maskensatz (siehe Anhang A) sog. Open-Strukturen, bei denen kein Kontakt zur oberen Kontaktschicht hergestellt wird. Der Vergleich der beiden Strukturen in Abb. 2-13 verdeutlicht den Unterschied.

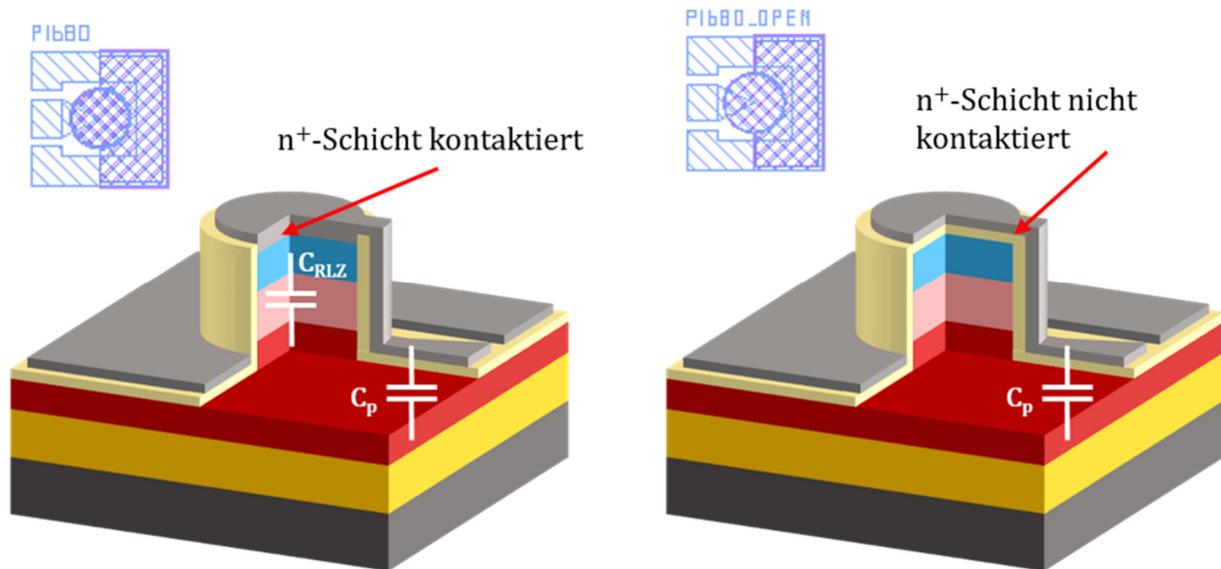


Abb. 2-13: Unterschied zwischen der Dioden-Struktur (links) und der Open-Struktur (rechts) (Quelle der Grafik: Abb. 6.3 in [47]).

Es gilt dabei, dass die gemessene Open-Kapazität der Kapazität der Al-Kontaktflächen entspricht  $C_{\text{Open}} = C_{\text{Pad}}$ . Die Berechnung der tatsächlich gewollten Sperrschichtkapazität der Diode  $C_S$  erfolgt demzufolge nach Gleichung (2-16) durch Subtraktion der Open-Kapazität  $C_{\text{Open}}$  von der Dioden-Kapazität  $C_{\text{Diode}}$ .

$$C_S = C_{\text{Diode}} - C_{\text{Open}} \quad (2-16)$$

Zusätzlich werden für die C(U)-Charakterisierung nur Dioden mit einem Mesa-Radius  $r_M = \{20, 40, 80\} \mu\text{m}$  berücksichtigt. Der Grund hierfür ist, dass die gemessene Kapazität  $C_{\text{Diode}}$  bei Dioden mit  $r_M < 20 \mu\text{m}$  bereits im Bereich der Kapazität der Al-Kontaktflächen und somit der Open-Struktur  $C_{\text{Open}}$  liegt, wodurch die C(U)-Charakteristik durch die Kapazität der Open-Struktur dominiert und überdeckt wird.

Die  $C(U)$ -Charakteristik wird anschließend auf die Fläche der Mesa  $A_{\text{Mesa}}$  normiert. Dies ist zwingend erforderlich um die korrekte Funktionalität des Bauelements zu überprüfen. Ergibt sich hierbei keine Volumenproportionalität wird die gemessene Kapazität durch andere unerwünschte Effekte dominiert. In diesem Fall können die Messergebnisse nicht zur weiteren Auswertung berücksichtigt werden.

Zur Bestimmung der Built-In-Spannung  $U_{\text{bi}}$  wird anschließend die Form  $C_S^{-2}$  gemäß Gleichung (2-17) gebildet. Die hierbei resultierende Charakteristik kann in einem begrenzten Bereich linearisiert werden. Die lineare Extrapolation schneidet die positive x-Achse bei  $U_{\text{bi}}$ .

$$C_S^{-2} = \alpha^{-2} \cdot (U_{\text{bi}} - U) \quad (2-17)$$

Unter Annahme eines stark asymmetrisch dotierten pn<sup>+</sup>- bzw. np<sup>+</sup>-Übergangs lässt sich aus der Steigung  $\alpha^{-2}$  der resultierenden Charakteristik zusätzlich die Dotierstoffkonzentration  $N_{A(D)}$  des schwächer dotierten Gebiets nach Gleichung (2-18) (Gleichung (26) in [2]) berechnen.

$$N_{A(D)} = \frac{2}{q \epsilon_0 \epsilon_r |\alpha^{-2}|} \text{ mit } N_{D(A)} \gg N_{A(D)} \quad (2-18)$$

Hierfür wird die relative Permittivität  $\epsilon_r$  des schwächer dotierten Materials benötigt. In Abschnitt 2.6.2 wird daher die Bestimmung der relativen Permittivität  $\epsilon_r$  als Funktion der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Zusammensetzung beschrieben.

## 2.6. Materialparameter von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$

Diese Arbeit hat, wie eingangs motiviert, das Ziel die für den Entwurf von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Heterostrukturen wichtigen Materialparameter, die Bandlücke  $E_{g,\text{SiGeSn}}$  und die Leitungs- und Valenzbandversätze  $\Delta E_L$  und  $\Delta E_V$  zu bestimmen. Die weitere Auswertung der Ergebnisse der C(U)-Charakterisierung in Kapitel 7 erfordert hierfür wiederum die Kenntnis anderer Materialparameter, wie die relative Permittivität  $\epsilon_r$  und die effektiven Zustandsdichten im Leitungs- und Valenzband  $N_L$  und  $N_V$ , für die bisher keine Literaturdaten verfügbar sind.

Um dennoch die Auswertung der Ergebnisse der C(U)-Charakterisierung zu ermöglichen, werden diese Materialparameter nachfolgend mittels erster Abschätzungen bestimmt.

### 2.6.1. Bandstruktur von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$

Die nachfolgenden Berechnungen erfordern die Kenntnis der Lage des Leitungsbandminimums in der Bandstruktur von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ . An dieser Stelle unterscheiden sich die drei Legierungselemente Si, Ge und Sn jedoch signifikant. Daher sind die Bandstrukturen von Si, Ge und Sn in Abb. 2-14 dargestellt.

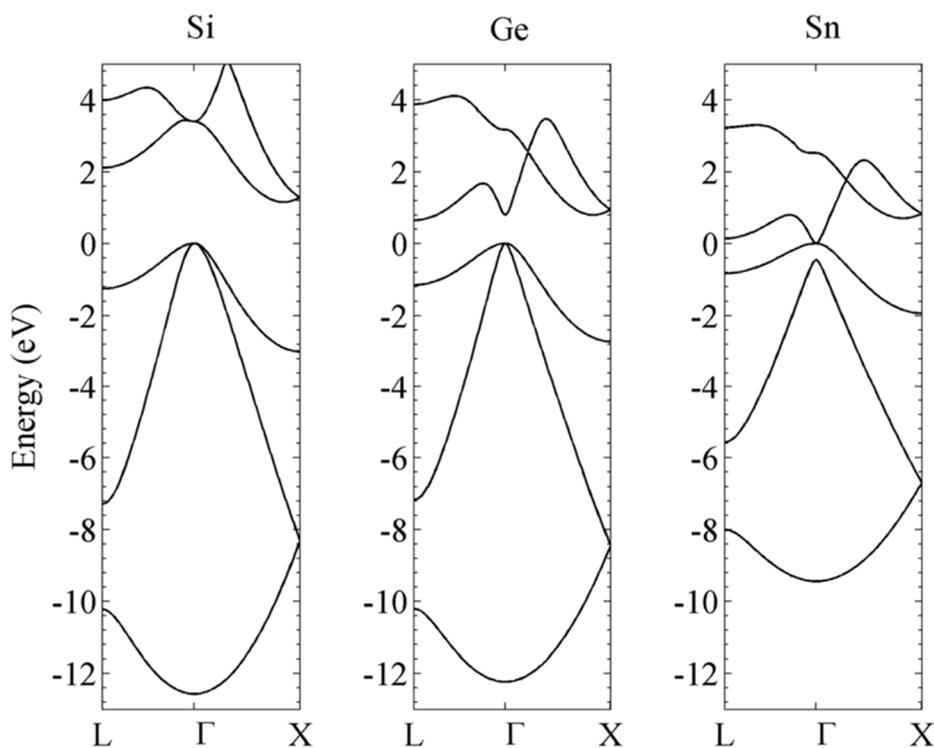


Abb. 2-14: Bandstrukturen der Legierungselemente Si, Ge und Sn nach Moontragoon et al. (Grafik entnommen aus [22]).

Bei Si liegt das Leitungsbandminimum im X-Tal, es liegt also ein indirekter Halbleiter vor. Die Elektronenvorzugsrichtung ist demnach entlang der (100)-Kristallrichtung. Im Gegensatz dazu liegt das Leitungsbandminimum bei Ge im L-Tal und die Elektronenvorzugsrichtung somit entlang der (111)-Kristallrichtung. Bei  $\alpha$ -Sn liegt das Leitungsbandminimum hingegen im  $\Gamma$ -Tal und energetisch unter dem Valenzbandmaximum. Es handelt sich daher um einen sog. Zero-Gap-Halbleiter.

Die Lage des Leitungsbandminimums in der Bandstruktur von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  ist daher abhängig von der Legierungszusammensetzung. Als Basis für die weiteren Überlegungen dienen daher theoretische Bandstruktur-Berechnungen von Moontragoon, Soref und Ikonic aus dem Jahre 2012 [22]. Die Bandlücke von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  folgt der linearen Interpolation der Legierungsbestandteile, auch bekannt als Vegard'sches Gesetz, nach Gleichung (2-19).

$$\begin{aligned} E_{g,\text{SiGeSn}}^i &= E_{g,\text{Si}}^i \cdot c_{\text{Si}} + E_{g,\text{Ge}}^i \cdot c_{\text{Ge}} + E_{g,\text{Sn}}^i \cdot c_{\text{Sn}} \\ &- b_{\text{SiGe}}^i \cdot c_{\text{Si}} \cdot c_{\text{Ge}} - b_{\text{GeSn}}^i \cdot c_{\text{Ge}} \cdot c_{\text{Sn}} - b_{\text{SiSn}}^i \cdot c_{\text{Si}} \cdot c_{\text{Sn}} \end{aligned} \quad (2-19)$$

Unter Verwendung der Gleichung (2-19) wurde die Bandlücke von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  für das L-Tal  $E_{g,\text{SiGeSn}}^L$ , das X-Tal  $E_{g,\text{SiGeSn}}^X$  und das direkte  $\Gamma$ -Tal  $E_{g,\text{SiGeSn}}^\Gamma$  berechnet und davon die energetisch niedrigste Bandlücke  $E_{g,\text{SiGeSn}}$  bestimmt. Die Ergebnisse sind im Legierungsdiagramm in Abb. 2-13 zusammengefasst.

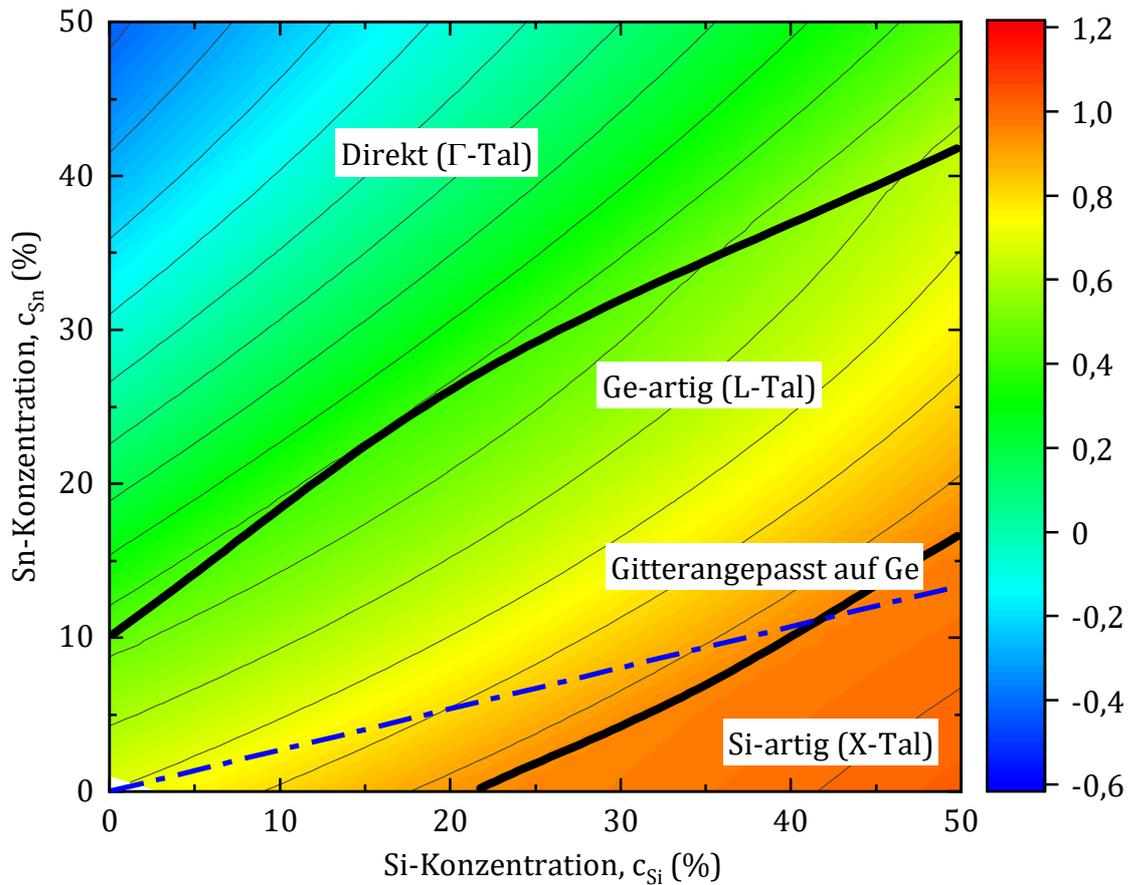


Abb. 2-15: Legierungsdiagramm der Bandlücke von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  in Abhängigkeit der Si-Konzentration  $c_{\text{Si}}$  und Sn-Konzentration  $c_{\text{Sn}}$ . (Daten zur Berechnung entnommen aus [22])

Dabei für die Berechnungen notwendige Bandlücke der Legierungsbestandteile im  $i$ -Tal ( $i = \{X, L, \Gamma\}$ )  $E_g^i$  und die quadratischen Korrekturfaktoren  $b^i$ , auch Bowing-Parameter genannt, sind in Tab. 2-1 dargestellt. Sie entstammen ebenfalls den Berechnungen von Moontragoon, Soref und Ikonic [22].

	$E_{g,\text{Si}}^i$ (eV)	$E_{g,\text{Ge}}^i$ (eV)	$E_{g,\text{Sn}}^i$ (eV)	$b_{\text{SiGe}}^i$ (eV)	$b_{\text{GeSn}}^i$ (eV)	$b_{\text{SiSn}}^i$ (eV)
$\Gamma$	3,3021	0,8113	-0,4102	0,210	2,490	3,915
<b>L</b>	2,1021	0,7013	0,1202	0,335	1,880	2,124
<b>X</b>	1,2021	0,9013	0,9102	0,108	0,100	0,772

Tab. 2-1: Daten der Bandlücken und Bowingparameter der theoretischen Berechnungen der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Bandlücke nach Moontragoon, Soref und Ikonic. (Daten entnommen aus: [22])

Hierbei zeigt sich für besonders hohe Si-Konzentrationen und gleichzeitig niedrige Sn-Konzentrationen (rechter Bereich) ein Si-artiger Legierungshalbleiter mit dem Leitungs-

bandminimum im X-Tal. Ein direkter Legierungshalbleiter ergibt sich dem gegenüber für besonders hohe Sn-Konzentrationen (oberer Bereich). Dazwischen verhält sich der Legierungshalbleiter Ge-artig mit dem Leitungsbandminimum im L-Tal. Zusammensetzungen von auf Ge gitterangepasstem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ , welche in dieser Arbeit ausschließlich behandelt werden, sind durch die Strichpunktlinie markiert.

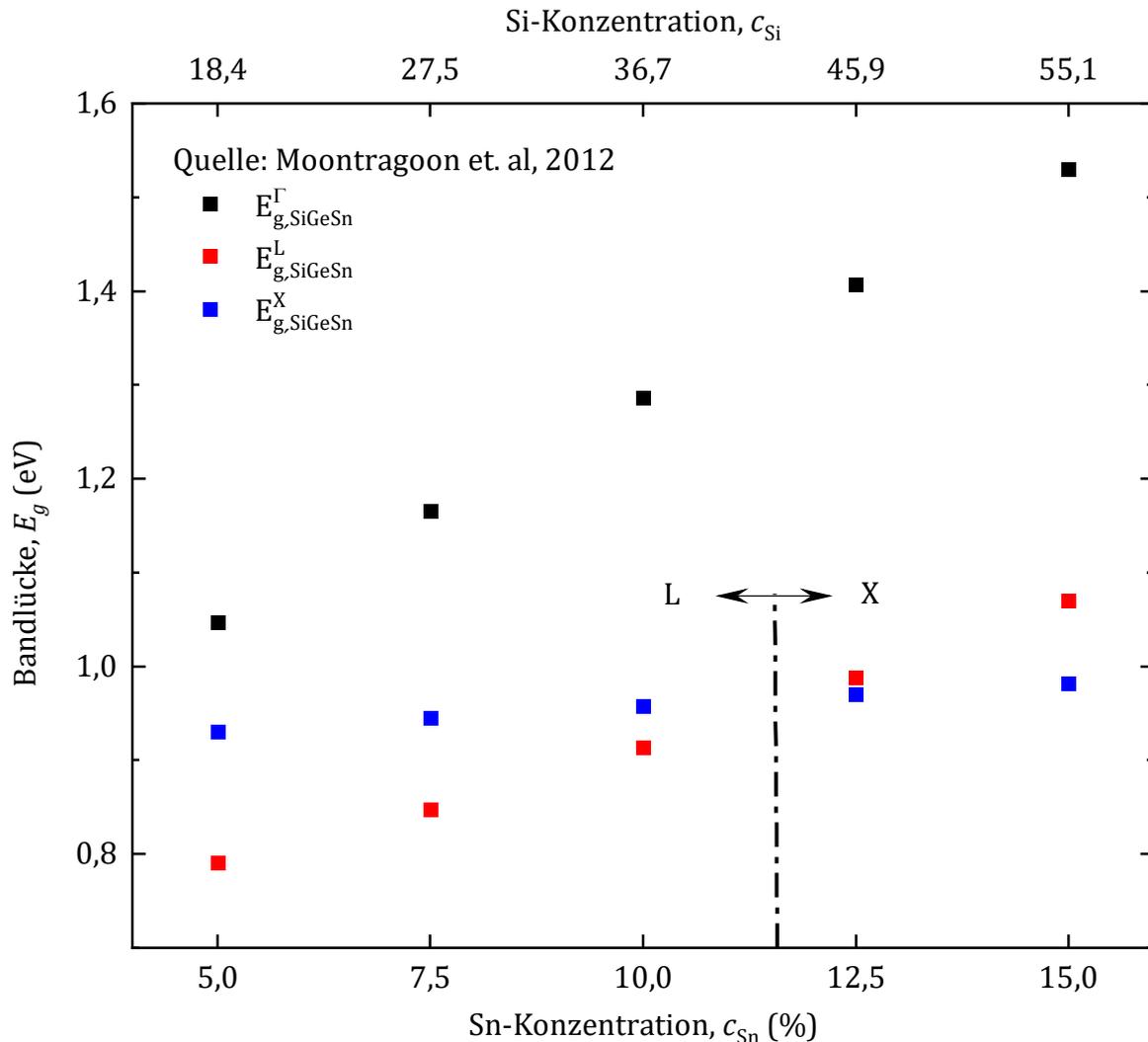


Abb. 2-16: Berechneter Verlauf der Bandlücken  $E_{g,\text{SiGeSn}}^L$ ,  $E_{g,\text{SiGeSn}}^X$  und  $E_{g,\text{SiGeSn}}^{\Gamma}$  in Abhängigkeit der Sn-Konzentration  $c_{\text{Sn}}$  von auf Ge gitterangepasstem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ .

Dieser Bereich ist nochmals separat in Abb. 2-14 dargestellt. Hierbei ist für Sn-Konzentrationen  $c_{\text{Sn}} > 11,5$  % ein Übergang von einem Ge-artigen zu einem Si-artigen Legierungshalbleiter zu beobachten. Dies ist in den weiteren Berechnungen der effektiven Massen im Leitungs- und Valenzband und nachfolgend der effektiven Zustandsdichten im Leitungs- und Valenzband zu berücksichtigen.

### 2.6.2. Relative Permittivität $\epsilon_r$

Die Auswertung der C(U)-Charakterisierung (siehe Abschnitt 2.5) erfordert die Kenntnis der relativen Permittivität  $\epsilon_r$  der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Legierung. Die relative Permittivität  $\epsilon_r$  wird hier ebenfalls durch lineare Interpolation der Werte der Legierungsbestandteile nach Gleichung (2-20) berechnet.

$$\epsilon_{r,\text{SiGeSn}} = \epsilon_{r,\text{Si}} \cdot c_{\text{Si}} + \epsilon_{r,\text{Ge}} \cdot c_{\text{Ge}} + \epsilon_{r,\text{Sn}} \cdot c_{\text{Sn}} \quad (2-20)$$

Die für die Berechnung verwendeten Werte der relativen Permittivität  $\epsilon_r$  der Legierungsbestandteile Si, Ge und  $\alpha$ -Sn sind in Tab. 2-2 gegeben.

	Si	Ge	Sn
$\epsilon_r$	11,7	15,8	24

Tab. 2-2: Relative Permittivität  $\epsilon_r$  der Legierungselemente Si, Ge und  $\alpha$ -Sn. (Daten entnommen aus: Si, Ge [8],  $\alpha$ -Sn [9])

Die mittels Gleichung (2-19) für die in dieser Arbeit untersuchten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Zusammensetzungen berechneten Werte, sind in der nachfolgenden Tab. 2-3 aufgeführt. Für die Berechnungen wurden die nominellen Konzentrationen verwendet.

$c_{\text{Si}}$ (%)	$c_{\text{Ge}}$ (%)	$c_{\text{Sn}}$ (%)	$\epsilon_{r,\text{SiGeSn}}$
18,4	76,7	5,0	15,47
27,5	65,0	7,5	15,35
36,7	53,3	10,0	15,10
45,9	41,6	12,5	15,02
55,1	30,0	15,0	14,78

Tab. 2-3: Relative Permittivität  $\epsilon_{r,\text{SiGeSn}}$  der in dieser Arbeit verwendeten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Zusammensetzungen.

### 2.6.3. Effektive Massen im Leitungsband $m_L$

Die im nachfolgenden Abschnitt 2.6.5 vorgestellte Berechnung der effektiven Zustandsdichte im Leitungsband  $N_L$  erfordert nach Gleichung (2-24) die Kenntnis der effektiven Masse im Leitungsband  $m_L$ . Diese ist dabei stets als Faktor der Elektronenmasse  $m_e$  angegeben. Mangels Literaturdaten für  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  wird die effektive Masse im Leitungs-

band  $m_L$  ebenfalls durch lineare Interpolation der Werte der Legierungsbestandteile nach Gleichung (2-21) berechnet.

$$m_{L,\text{SiGeSn}} = m_{L,\text{Si}} \cdot c_{\text{Si}} + m_{L,\text{Ge}} \cdot c_{\text{Ge}} + m_{L,\text{Sn}} \cdot c_{\text{Sn}} \quad (2-21)$$

Es ist dabei zu beachten, dass die effektiven Masse abhängig von der Elektronenvorzugsrichtung im Kristall abhängt. Diese wurde in Abhängigkeit der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Zusammensetzung in Abschnitt 2.6.1 ermittelt. Für die Berechnung der effektiven Masse im Leitungsband  $m_L$  wurden die in Tab. 2-4 angegebenen Werte für die Legierungsbestandteile Si, Ge und Sn verwendet.

	Si	Ge	Sn
$m_t$	0,190	0,082	—
$m_l$	0,970	1,580	—
$m_L$	0,327	0,220	0,024

Tab. 2-4: Effektive Masse im Leitungsband  $m_L$  der Legierungselemente Si, Ge und  $\alpha$ -Sn. (Daten entnommen aus: Si, Ge [4],  $\alpha$ -Sn [5])

Die Werte für Si und Ge wurden dabei unter Verwendung von Gleichung (2-22) (Gleichung (15) in [2]) aus den effektiven Massen für longitudinale und transversale Elektronenbewegung  $m_t$  und  $m_l$  berechnet. Für  $\alpha$ -Sn ist in der Literatur direkt der Wert für  $m_L$  zu finden [5].

$$m_L = (m_t^2 \cdot m_l)^{1/3} \quad (2-22)$$

Unter Anwendung von Gleichung (2-21) ergeben sich für die in dieser Arbeit realisierten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Zusammensetzungen die in Tab. 2-5 dargestellten Werte für die effektive Masse im Leitungsband  $m_{L,\text{SiGeSn}}$ .

$c_{\text{Si}}$ (%)	$c_{\text{Ge}}$ (%)	$c_{\text{Sn}}$ (%)	$m_{L,\text{SiGeSn}}$
18,4	76,7	5,0	0,229
27,5	65,0	7,5	0,236
36,7	53,3	10,0	0,240
45,9	41,6	12,5	0,246
55,1	30,0	15,0	0,249

Tab. 2-5: Effektive Masse im Leitungsband  $m_{L,\text{SiGeSn}}$  der in dieser Arbeit verwendeten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Zusammensetzungen

#### 2.6.4. Effektive Massen im Valenzband $m_V$

Für die Berechnung der effektiven Zustandsdichte im Valenzband  $N_V$  wird nach Gleichung (2-26) ebenfalls die effektive Masse im Valenzband  $m_V$  benötigt. Die Berechnung der effektiven Masse im Valenzband  $m_V$  wird erneut durch lineare Interpolation der Werte der Legierungsbestandteile nach Gleichung (2-23) berechnet.

$$m_{V,\text{SiGeSn}} = m_{V,\text{Si}} \cdot c_{\text{Si}} + m_{V,\text{Ge}} \cdot c_{\text{Ge}} + m_{V,\text{Sn}} \cdot c_{\text{Sn}} \quad (2-23)$$

Für die Berechnung der effektiven Masse im Leitungsband  $m_L$  wurden die in Tab. 2-6 angegebenen Werte für die Legierungsbestandteile Si, Ge und Sn verwendet.

	Si	Ge	Sn
$m_{lh}$	0,153	0,044	–
$m_{hh}$	0,537	0,283	–
$m_V$	0,590	0,294	0,058

Tab. 2-6: Effektive Masse im Valenzband  $m_V$  der Legierungselemente Si, Ge und  $\alpha$ -Sn. (Daten entnommen aus: Si [6], Ge [48],  $\alpha$ -Sn [7]).

Hierbei muss zunächst zwischen der effektiven Masse für leichte Löcher (engl. light hole)  $m_{lh}$  und schwere Löcher (engl. heavy hole)  $m_{hh}$  unterschieden werden. Für Si und Ge werden aus den Werten für  $m_{lh}$  und  $m_{hh}$  mit Gleichung (2-24) (Gleichung (25) in [2]) die effektive Masse  $m_V$  berechnet. Für  $\alpha$ -Sn ist der Wert von  $m_V$  erneut direkt in der Literatur zu finden [7].

$$m_V = (m_{lh}^{3/2} + m_{hh}^{3/2})^{2/3} \quad (2-24)$$

Unter Anwendung von Gleichung (2-23) ergeben sich für die in dieser Arbeit realisierten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Zusammensetzungen die in Tab. 2-7 dargestellten Werte für die effektive Masse im Leitungsband  $m_{L,\text{SiGeSn}}$ .

$c_{\text{Si}}$ (%)	$c_{\text{Ge}}$ (%)	$c_{\text{Sn}}$ (%)	$m_{V,\text{SiGeSn}}$
18,4	76,7	5,0	0,335
27,5	65,0	7,5	0,361
36,7	53,3	10,0	0,380
45,9	41,6	12,5	0,402
55,1	30,0	15,0	0,421

Tab. 2-7: Effektive Masse im Valenzband  $m_{V,\text{SiGeSn}}$  der in dieser Arbeit verwendeten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Zusammensetzungen.

#### 2.6.5. Effektive Zustandsdichten im Leitungs- und Valenzband $N_L$ und $N_V$

Die effektiven Zustandsdichten im Leitungs- und Valenzband  $N_L$  und  $N_V$  werden nach Sze [2] gemäß den Gleichungen (2-25) und (2-26) (Gleichungen (18) und (24) in [2]) berechnet.

$$N_L = 2 \cdot \left( \frac{2\pi m_L k_B T}{h^2} \right)^{3/2} M_L \quad (2-25)$$

$$N_V = 2 \cdot \left( \frac{2\pi m_V k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \quad (2-26)$$

Für die Berechnung der effektiven Zustandsdichte im Leitungsband ist allerdings noch der Entartungsfaktor  $M_L$  notwendig. Der Entartungsfaktor  $M_L$  gibt dabei die Anzahl der äquivalenten Leitungsbandminima in der Bandstruktur wieder und ist demnach von der Elektronenvorzugsrichtung und somit von der Bandstruktur abhängig. Der Entartungsfaktor der Legierungselemente Si, Ge und Sn ist zum Vergleich in Tab. 2-8 angegeben. Das Leitungsbandminimum von Si liegt wie bereits erwähnt im X-Tal, wodurch sich ein Entartungsfaktor von  $M_{L,\text{Si}} = 6$  ergibt. Bei Ge liegt das Leitungsbandminimum hingegen

im L-Tal, wodurch sich  $M_{L,\text{Ge}} = 4$  ergibt. Bei  $\alpha\text{-Sn}$  liegt das Leitungsbandminimum im  $\Gamma$ -Tal, was einem Entartungsfaktor von  $M_{L,\text{Sn}} = 1$  entspricht.

	Si	Ge	Sn
$M_L$	6	4	1

Tab. 2-8: Entartungsfaktor  $M_L$  der Legierungselemente Si, Ge und  $\alpha\text{-Sn}$ . (Daten entnommen aus: [2])

Unter Berücksichtigung der in Abschnitt 2.6.1 vorgestellten Bandstrukturrechnungen ergibt sich für die in dieser Arbeit realisierten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Zusammensetzungen der in Tab. 2-9 dargestellte Entartungsfaktor  $M_{L,\text{SiGeSn}}$ . Daneben sind die unter Anwendung von Gleichungen (2-25) und (2-26) berechneten Werte für die effektive Zustandsdichte im Leitungs- und Valenzband  $N_L$  und  $N_V$  dargestellt.

$c_{\text{Si}}$ (%)	$c_{\text{Ge}}$ (%)	$c_{\text{Sn}}$ (%)	$M_{L,\text{SiGeSn}}$	$N_{L,\text{SiGeSn}} (\text{cm}^{-3})$	$N_{V,\text{SiGeSn}} (\text{cm}^{-3})$
18,4	76,7	5,0	4	$1,10 \cdot 10^{19}$	$4,88 \cdot 10^{18}$
27,5	65,0	7,5	4	$1,15 \cdot 10^{19}$	$5,44 \cdot 10^{18}$
36,7	53,3	10,0	4	$1,18 \cdot 10^{19}$	$5,88 \cdot 10^{18}$
45,9	41,6	12,5	6	$1,84 \cdot 10^{19}$	$6,40 \cdot 10^{18}$
55,1	30,0	15,0	6	$1,88 \cdot 10^{19}$	$6,87 \cdot 10^{18}$

Tab. 2-9: Entartungsfaktor  $M_{L,\text{SiGeSn}}$ , effektive Zustandsdichte im Leitungs- und Valenzband  $N_{L,\text{SiGeSn}}$  und  $N_{V,\text{SiGeSn}}$  für die in dieser Arbeit verwendeten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Zusammensetzungen.

## 2.7. Probenbezeichnungssystem

In der vorliegenden Arbeit werden fünf verschiedene  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserien vorgestellt und diskutiert. Zu Gunsten der Übersichtlichkeit wird an dieser Stelle das in Abb. 2-17 dargestellte Probenbezeichnungssystem eingeführt:

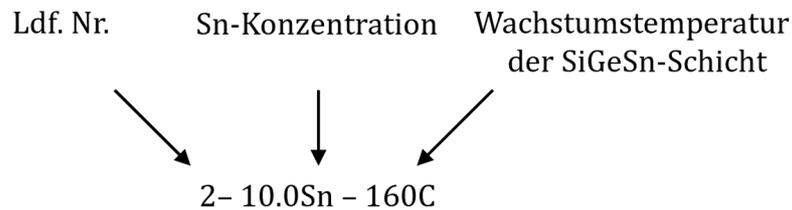


Abb. 2-17: Erläuternde Grafik des Probenbezeichnungssystems

Die erste Ziffer stellt dabei den Probenserienindex, eine laufende Nummer von 1 bis 5, dar. Im Falle der Probenserie 1 besteht diese aus zwei thematisch zusammenhängenden Teilsereien, weshalb der Probenindex hier zu 1.1 und 1.2 erweitert wurde. Die zweite Ziffernfolge kennzeichnet die Sn-Konzentration der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht. Da die Arbeit nur die Epitaxie von auf Ge gitterangepasstem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  betrachtet ist durch die Sn-Konzentration die Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht eindeutig gegeben (siehe Abschnitt 4.1). Der letzte Teil der Probenbezeichnung kennzeichnet die Wachstumstemperatur der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht, sofern diese im Rahmen der Probenserie variiert wurde. In Anhang B erfolgt eine genaue Zuordnung der hier verwendeten Probenbezeichnungen zu den am IHT verwendeten Probenidentifikationsnummern.



### 3. Voruntersuchungen zur $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxie

*Dieses Kapitel schafft einige Grundlagen zur  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxie. Das Kapitel gliedert sich dabei in vier Teile.*

*Im ersten Teil wird zunächst das in dieser Arbeit verwendete MBE-System beschrieben. Anschließend erfolgt eine detaillierte Beschreibung der Herstellung des virtuellen Ge Substrats, welches die Basis für alle nachfolgend vorgestellten Epitaxie-Experimente bildet. Im zweiten Teil des Kapitels wird die Sn-Segregation, als wichtigster zu berücksichtigender Störeffekt im Rahmen der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxie, beschrieben. Hierzu wurde im Rahmen der Arbeit ein Experiment zur  $\text{Ge}_{1-z}\text{Sn}_z$ -Epitaxie durchgeführt. Die daraus abgeleiteten Erkenntnisse fließen direkt in die Charakterisierung und Anpassung des MBE-Systems in Kapitel 4.*

*Zusätzlich werden im dritten Teil des Kapitels die Ergebnisse der ersten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Arbeiten des IHTs, welche vor Beginn dieser Arbeit starteten, vorgestellt und diskutiert. Die dabei entstandenen Ergebnisse wurden im Rahmen einiger Publikationen, auch unter Mitwirkung des Autors, veröffentlicht [49]–[56]. Im vierten und letzten Teil des Kapitels werden erste eigene Untersuchungen anhand der Proben der ersten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Arbeiten vorgestellt und diskutiert.*

#### 3.1. Das A-MBE-System

Das in dieser Arbeit ausschließlich verwendete A-MBE-System des IHTs ist in Abb. 3-1 a) dargestellt. Daneben gibt Abb. 3-1 b) einen Blick in die Kammer auf die verfügbaren Molekularstrahlquellen. Die Sn-Effusionszelle liegt jedoch außerhalb des Blickfeldes am linken Rand.

Das A-MBE-System ist ein für 6“-Substrate ausgelegtes MBE-System. Unter Verwendung von speziellen Si-Halteringen können jedoch auch 4“ und kleinere, beliebige Substratgrößen verwendet werden.

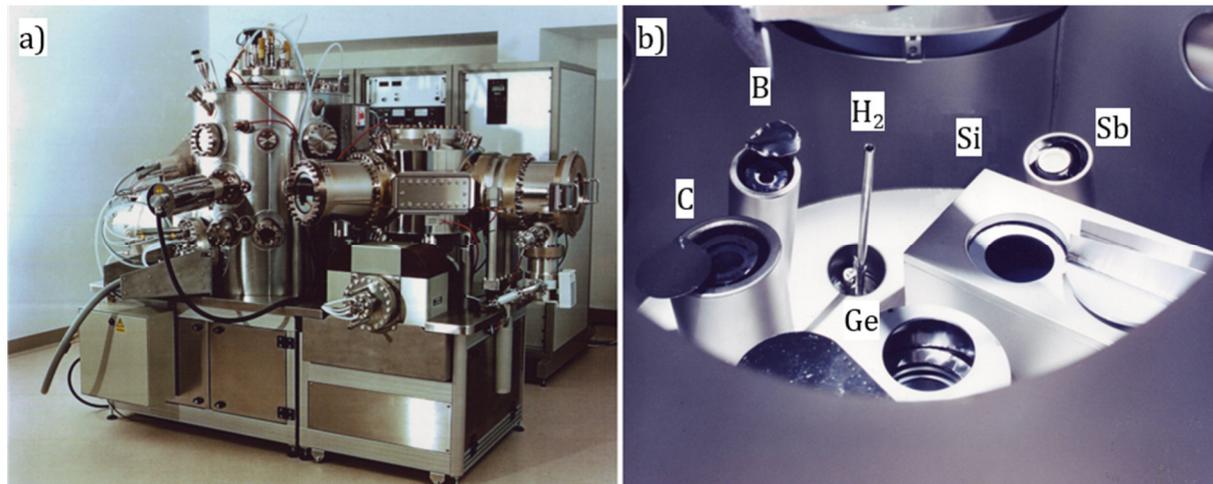


Abb. 3-1: a) Seitenansicht des verwendeten A-MBE-Systems, b) Blick in die Kammer auf die verfügbaren Molekularstrahlquellen. Die Sn-Quelle ist dabei außerhalb des Blickfeldes am linken Rand.

Zunächst wird auf den Aufbau und die Besonderheiten des in dieser Arbeit verwendeten MBE-Systems eingegangen. Ein erster wichtiger Aspekt ist die Messung und Regelung der Molekularstrahlquellen. Dies ist bei der Epitaxie von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  vor allem für die Einhaltung der angestrebten Zusammensetzung von besonderer Bedeutung. Ein zweiter wichtiger Aspekt ist die Heizung, Messung und Regelung der Substrattemperatur. Besonders bei der Epitaxie von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  ist die Einhaltung von niedrigen Substrattemperaturen von großer Bedeutung, da negative Störeffekte, wie die Segregation von Sn, hierdurch maßgeblich beeinflusst werden.

Das A-MBE-System wurde ursprünglich für die Epitaxie von  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  Heterostrukturen konzipiert und stellt in dieser Hinsicht eine seinerzeit moderne Anlage dar. Sie verfügt über einen Elektronenstrahlverdampfer (ESV) als Molekularstrahlquelle für Si und eine Effusionszelle für Ge. Der letzte Legierungsbestandteil von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ , Sn, und die Dotierstoffe B und Sb werden ebenfalls mittels Effusionszellen verdampft. Der für Si verwendete ESV ist dabei nahezu zentrisch unter der Substrathalterung platziert, um die Homogenität des Si-Flusses zu erhöhen. Im Gegensatz dazu sind die übrigen Molekularstrahlquellen exzentrisch und geneigt eingebaut. Dadurch ergibt sich eine, für diese Anlage einzigartige, Verteilung der Molekularstrahlflüsse über dem Substrat. Allerdings wird das Substrat während des Epitaxieprozesses rotiert, um zumindest eine rotationssymmetrische Flussverteilung zu gewährleisten. Da die Flussverteilung auch die Verteilung der Zusammensetzung von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  über dem Substrat beeinflusst wird diese in Kapitel 4.1 noch eingehend untersucht.

Der für Si verwendete ESV hat ein hohes Tiegelvolumen von  $V_{ESV} = 100 \text{ cm}^3$  und arbeitet bei einer Beschleunigungsspannung von  $U_{ESV} = 8 \text{ kV}$ . Durch den Abstand des EVS zum Substrat ergeben sich Si-Wachstumsraten von  $0,3 \text{ \AA} \cdot \text{s}^{-1} \leq R_{\text{Si}} \leq 1,5 \text{ \AA} \cdot \text{s}^{-1}$  im für den ESV sinnvoll regelbaren Arbeitsbereich. Der Vorteil eines ESV ist dessen hohe Dynamik, welche eine schnelle Änderung des Molekularstrahlflusses erlaubt. Die Messung des Si-Flusses und Regelung des ESV erfolgt dabei mithilfe eines Quadrupolmassenspektrometers (QMS). Durch die Interferenz der Masse des  $\text{Si}_{28}$ -Isotops ( $m_{\text{Si}_{28}} = 28$ ) mit den Massen des  $\text{N}_2$ -Moleküls und des  $\text{CO}$ -Moleküls ( $m_{\text{N}_2} = m_{\text{CO}} = 28$ ) ergibt sich dabei allerdings die Notwendigkeit den Si-Fluss anhand des  $\text{Si}_{30}$ -Isotops ( $m_{\text{Si}_{30}} = 30$ ) zu messen. Dessen Anteil am Gesamtfluss beträgt allerdings nur ca. 3 %. Dies führt wiederum zu einem sehr kleinen Messsignal, was die Regelung und darüber hinaus auch die Reproduzierbarkeit des Si-Flusses deutlich erschwert.

Die für Ge verwendete Effusionszelle hat ebenfalls ein Tiegelvolumen von  $V_{\text{Ge-EZ}} = 100 \text{ cm}^3$ . Der Tiegel besteht dabei aus pyrolytischem BN. Bei den hohen Arbeitstemperaturen der Ge-Effusionszelle kommt es jedoch zur Eindiffusion von B des BN-Tiegels in die darin enthaltene Ge-Schmelze. Dies führt zu einer ungewollten Hintergrunddotierung von intrinsischem Ge von  $N_{\text{A,i-Ge}} \approx 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Die Ge-Effusionszelle zeichnet sich durch einen weiten Arbeitsbereich aus. Allerdings ist die maximale Arbeitstemperatur begrenzt, um die thermische Belastung der Ge-Effusionszelle zu minimieren und eine wirtschaftliche Standzeit zu gewährleisten. Durch den Abstand zum Substrat ergeben sich Wachstumsraten von  $0,1 \text{ \AA} \cdot \text{s}^{-1} \leq R_{\text{Ge}} \leq 1,2 \text{ \AA} \cdot \text{s}^{-1}$ .

Die für Sn verwendete Effusionszelle verfügt ebenfalls über einen BN-Tiegel mit einem Volumen von  $V_{\text{Sn-EZ}} = 35 \text{ cm}^3$ . Durch den gegebenen Abstand zum Substrat und unter Annahme einer Ge-Wachstumsrate von  $R_{\text{Ge}} = 1 \text{ \AA} \cdot \text{s}^{-1}$  können im sinnvollen Arbeitsbereich der Sn-Effusionszelle theoretisch  $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ -Legierungen mit Sn-Konzentrationen von  $0,01 \% \leq c_{\text{Sn}} \leq 20 \%$  hergestellt werden.

Die limitierten Arbeitsbereiche der Molekularstrahlquellen der Legierungsbestandteile Si, Ge und Sn limitieren ihrerseits die möglichen Zusammensetzungen von  $\text{SiGeSn}$ -Schichten und den dabei möglichen Arbeitsbereich. Auf diesen Sachverhalt wird in Kapitel 4 noch näher eingegangen.

Die für B und Sb verwendeten Effusionszellen erlauben durch den Abstand zum Substrat und unter Annahme einer Gesamtwachstumsrate  $R_{\text{SiGeSn}} = 1 \text{ \AA} \cdot \text{s}^{-1}$  Dotierstoffkonzentrationen von  $10^{16} \text{ cm}^{-3} \leq N_{A,D} \leq 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ . Die Dotierstoffkonzentration ist durch die zuvor erwähnte Hintergrunddotierung nach unten begrenzt. Darüber hinaus verfügt das A-MBE-System über Molekularstrahlquellen für C und H<sub>2</sub>, welche in dieser Arbeit jedoch keine Verwendung finden.

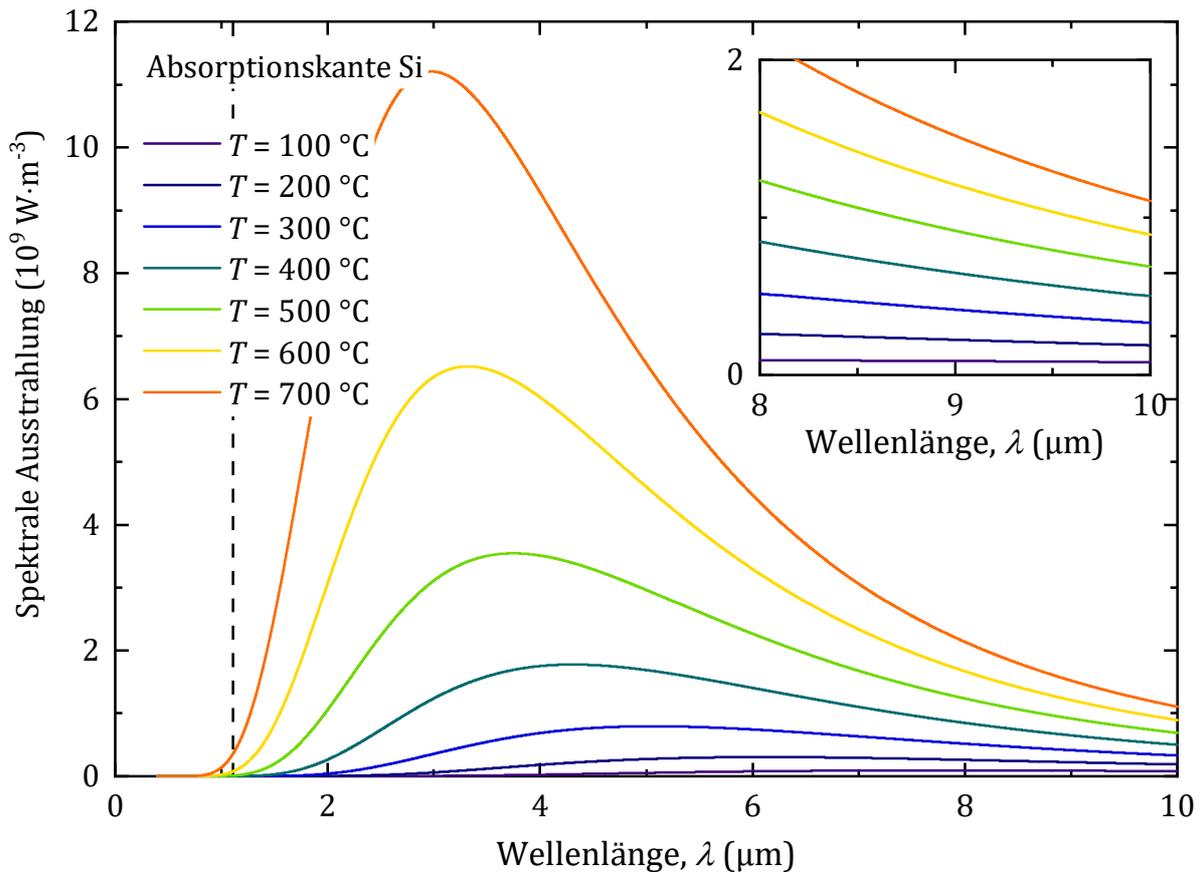


Abb. 3-2: Vergleich des Planck'schen Schwarzkörperstrahlungsspektrums mit der Absorption von Si

Die Heizung des Substrats erfolgt mittels Infrarot-Strahlung (IR) mit einem 6" Graphitmäander. Bei den für die Epitaxie üblichen Prozesstemperaturen  $T_S < 700 \text{ °C}$  strahlt der Graphit-mäander im Wellenlängenbereich  $\lambda > 1100 \text{ nm}$  (vgl. Abb. 3-2). Das Absorptions-verhalten von Si ist allerdings beschränkt auf den Wellenlängenbereich  $\lambda < 1100 \text{ nm}$  (vgl. Abb. 3-2).

Die Heizung des Substrats erfolgt daher nicht über Fundamentalabsorption, sondern über die Absorption freier Ladungsträger. Es ist daher notwendig die Messung der Substrat-

temperatur mittels Thermoelements für unterschiedlich hoch dotierte Substrate zu kalibrieren. Dies wurde bereits vor Beginn der Arbeit für die am IHT gängigsten Substrattypen durchgeführt.

Die spektrale Ausstrahlung in Abb. 3-2 verdeutlicht außerdem, dass für die  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxie üblichen Temperaturen die Abstrahlung des Substrateizers deutlich niedriger ist als bei höheren Temperaturen. Dies verdeutlicht die Notwendigkeit eines Pyrometers mit einer spektralen Empfindlichkeit im mittleren Infrarotbereich (MIR) von  $8 \mu\text{m} \leq \lambda \leq 13 \mu\text{m}$  zur Messung derart niedriger Substrattemperaturen.

### 3.2. Epitaxie des virtuellen Ge-Substrats

Die Basis für alle in dieser Arbeit vorgestellten Epitaxie-Experimente bildet das am IHT entwickelte [57] und bereits wohl etablierte, virtuelle Ge-Substrat (Ge-VS). Als Basis für die Herstellung des Ge-VS dienen kommerziell erhältliche Si-Substrate mit einem Durchmesser von  $D = 100$  mm und einer (100)-Oberflächenorientierung. Die Substrate sind dabei, sofern nicht anders genannt, p-typ artig dotiert und weisen einen spezifischen Schichtwiderstand von  $10 \Omega\text{cm} \leq \rho \leq 20 \Omega\text{cm}$  auf. Es sei dabei jedoch angemerkt, dass die Art und Höhe der Substratdotierung für die Herstellung des Ge-VS nicht von Bedeutung sind.

Die Herstellung des Ge-VS lässt sich dabei generell in vier Teilschritte unterteilen: Thermische Desorption (TD) des nativen  $\text{SiO}_2$ , Epitaxie einer Si-Pufferschicht, Epitaxie einer Ge-Schicht als Grundlage für das Ge-VS und final ein thermischer Ausheilschritt (TA) zur Formierung des Ge-VS. Dabei entsteht der in Abb. 3-3 dargestellte Schichtstapel.

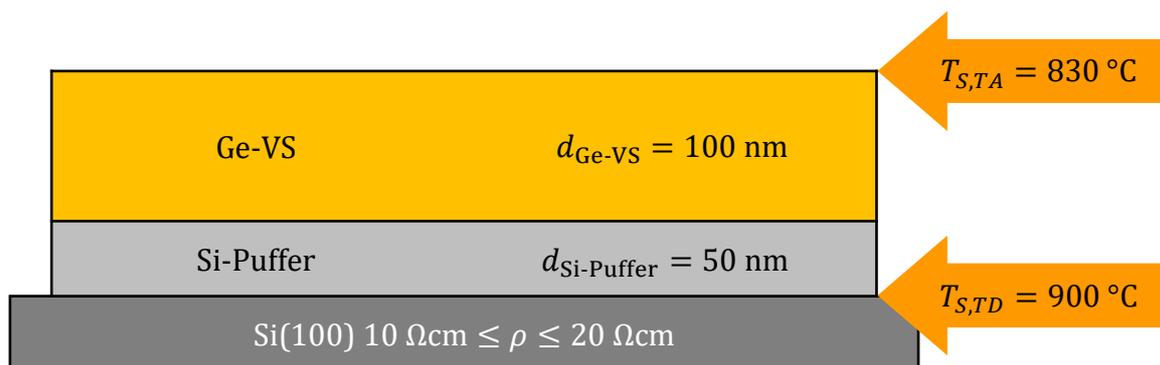


Abb. 3-3: Schichtstapel eines exemplarischen Ge-VS.

Eine Prozessübersicht der Herstellung des Ge-VS ist Abb. 3-4 dargestellt. Die vier Hauptschritte sind dabei gekennzeichnet.

Die thermische Desorption ist stets der erste Schritt eines Epitaxieprozesses und dient zum Entfernen des nativen  $\text{SiO}_2$ , welches sich unvermeidlich auf der Oberfläche eines Si-Substrats an Atmosphäre bildet. Sofern nicht anders beschrieben ist dies auch der erste Prozessschritt, welcher ein Si-Substrat im Rahmen dieser Arbeit erfährt. Das bedeutet, dass die Si-Substrate direkt aus der Transportbox des Herstellers in die Schleusenkammer des MBE-Systems, ohne weitere Vorbehandlung, eingeladen werden. Lediglich

bei der in Kapitel 6 beschriebenen Herstellung der Probenserie 3 wurden die Si-Substrate aufgrund ungewöhnlich langer Lagerdauer chemisch vorgereinigt.

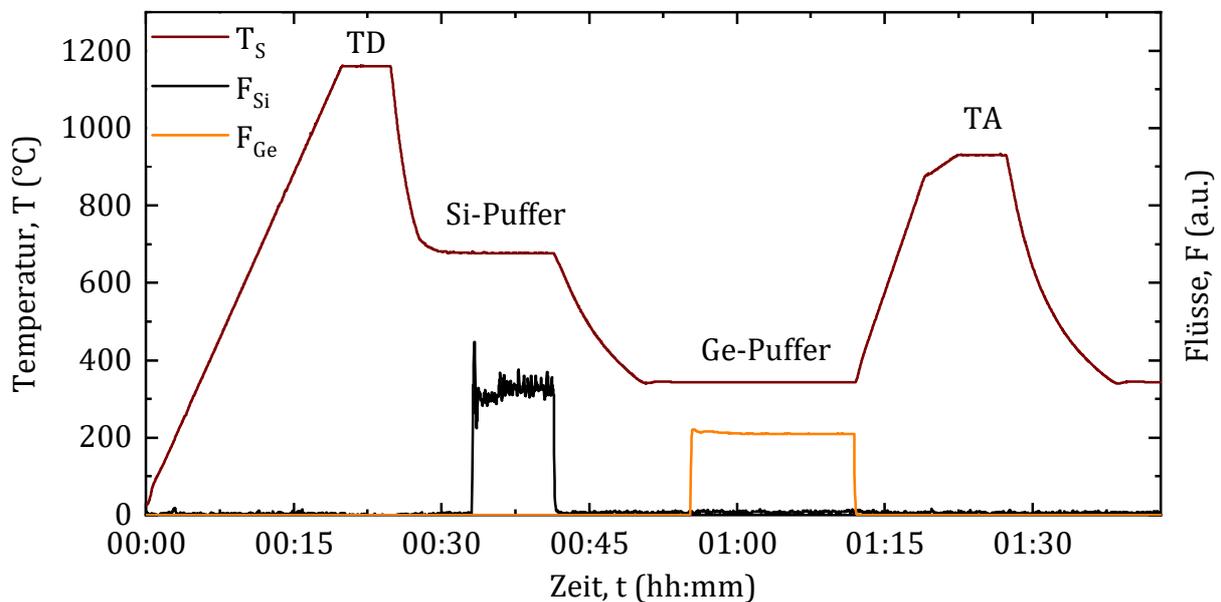


Abb. 3-4: Prozessübersicht der vier Hauptschritte zur Herstellung eines Ge-VS.

Alle Substrattemperaturen  $T_S > 200$  °C werden dabei im Rahmen dieser Arbeit mit dem hinter dem Heizer eingebauten Thermoelement gemessen und geregelt. Auf diesen Sachverhalt wird anschließend in Kapitel 4 noch näher eingegangen. Zur thermischen Desorption des nativen  $\text{SiO}_2$  wird das Si-Substrat nach dem Einschleusen in die Wachstumskammer des MBE-Systems auf eine Substrattemperatur  $T_{S,TD} = 900$  °C aufgeheizt. Die Substrattemperatur wird dabei langsam in Form einer Rampe mit einer Rampendauer  $t = 1200$  s erhöht. Dies soll den Eintrag thermischen Stresses durch zu rasches Aufheizen minimieren. Nach Erreichen der Zieltemperatur  $T_{S,TD} = 900$  °C wird die Substrattemperatur für eine Dauer von  $t_{TD} = 300$  s gehalten. Während dieser Zeitspanne erfolgt die eigentliche thermische Desorption des  $\text{SiO}_2$ . Dabei zersetzt sich das  $\text{SiO}_2$  aufgrund der hohen Temperatur und des geringen Drucks im Ultrahochvakuum in  $\text{SiO}$ , welches anschließend von der Oberfläche desorbiert [58]. Die genaue Einhaltung der Substrattemperatur und der Haltedauer ist dabei von großer Bedeutung. Erfolgt die thermische Desorption bei zu geringer Temperatur oder Dauer, so können Reste des nativen  $\text{SiO}_2$  auf der Substratoberfläche verbleiben. Da an diesen Stellen für den nachfolgenden Epitaxieprozess keine Kristallinformation besteht wird der Epitaxie-

prozess dadurch nachhaltig gestört und die Qualität der aufgewachsenen Strukturen stark gemindert.

Im Anschluss an die thermische Desorption wird die Substrattemperatur auf  $T_S = 600 \text{ }^\circ\text{C}$  abgesenkt. Bei dieser Substrattemperatur erfolgt am IHT standardgemäß die Epitaxie von intrinsischem Si. Nach Erreichen der Substrattemperatur wird die bereits erwähnte Si-Pufferschicht mit einer Dicke von  $d_{\text{Si-Puffer}} = 50 \text{ nm}$  gewachsen. Die Wachstumsrate für Si-Schichten beträgt am IHT dabei standardgemäß  $R_{\text{Si}} = 1 \text{ \AA} \cdot \text{s}^{-1}$ . Da bei der zuvor beschriebenen thermischen Desorption stets auch einzelne Si-Atome von der Oberfläche desorbieren erhöht sich die Oberflächenrauigkeit geringfügig. Die Si-Pufferschicht soll daher eine atomar glatte Oberfläche für die nachfolgenden Epitaxieprozesse schaffen.

Im nächsten Schritt wird die Substrattemperatur weiter abgesenkt auf  $T_S = 330 \text{ }^\circ\text{C}$ . Dies ist die am IHT standardgemäß verwendete Substrattemperatur für die Epitaxie von intrinsischem Ge. Nach Erreichen der Substrattemperatur erfolgt die Epitaxie einer Ge-Schicht mit  $d_{\text{Ge-VS}} = 100 \text{ nm}$ .

Vor Beginn dieser Arbeit wurde das Ge-VS häufig stark p-typ artig dotiert und in die eigentliche Bauteilstruktur integriert. Einige Ergebnisse dieser Arbeit zeigen jedoch, dass dies für die Schichtqualität und das elektrische Verhalten der Bauteilstrukturen äußerst nachteilig ist (siehe Kapitel 5). Aus diesem Grund ist das Ge-VS in dieser Arbeit, sofern nicht anders genannt, bewusst undotiert gehalten und die Lage außerhalb der Bauteilstruktur gewählt. Hierbei ist jedoch zu beachten, dass das durch die Effusionszelle abgeschiedene Ge des verwendeten MBE-Systems stets eine p-typ artige Hintergrunddotierung von  $N_{\text{A,i-Ge}} \approx 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  aufweist.

Den letzten Herstellungsschritt des Ge-VS bildet der thermische Ausheilschritt. Die Dicke der zuvor aufgewachsenen Ge-Schicht überschreitet dabei die kritische Schichtdicke  $d_{\text{krit}}$  von Ge auf Si. Diese ist gegeben durch die Gitterfehlpassung [59]. Wie bereits in Abschnitt 2.1 beschrieben, kommt es dabei zur Formierung von Linienversetzungen entlang der Kristallebene und an deren Ende schließlich zur Formierung von Durchstoßversetzungen. Da diese das elektrische Verhalten einer Bauteilstruktur nachteilig beeinflussen gilt es die Durchstoßversetzungsdichte so gering wie möglich zu halten. Hierzu dient der thermische Ausheilschritt. Dabei wird nach der Epitaxie der Ge-

Schicht die Substrattemperatur auf  $T_{S,TA} = 830 \text{ °C}$  erhöht. Dies erfolgt, wie in Abb. 3-4 dargestellt in zwei Rampen, um ein Überspringen der Substrattemperatur zu verhindern. Da  $T_{S,TA}$  bereits sehr nah an der Schmelztemperatur von Ge ( $T_{MP,Ge} = 938,35 \text{ °C}$  [60, S. IV]) ist, führt selbst ein leichtes Überspringen zum Anschmelzen der Oberfläche, wodurch deren Rauigkeit enorm erhöht wird. Nach Erreichen von  $T_{S,TA}$  erfolgt der eigentliche Ausheilschritt für  $t_{TA} = 300 \text{ s}$ . Hierbei wird dem Substrat genügend thermische Energie zur Verfügung gestellt, um eine Bewegung der Durchstoßversetzungen zu ermöglichen. Dabei kommt es statistisch zu einem Zusammentreffen zweier Durchstoßversetzungen, welche sich dabei auslöschen. Auf diese Weise begrenzen sich die Durchstoßversetzungen innerhalb des Ge-VS. Dadurch wird die Durchstoßversetzungsdichte  $N_{TDD}$  innerhalb der nachfolgenden Schichten deutlich reduziert. Ein sehr gutes Beispiel für ein gegenseitiges Auslöschen von Durchstoßversetzungen ist in der TEM-Aufnahme des Ge-VS der Probe 2-5.0Sn-200C in Abb. 3-5.

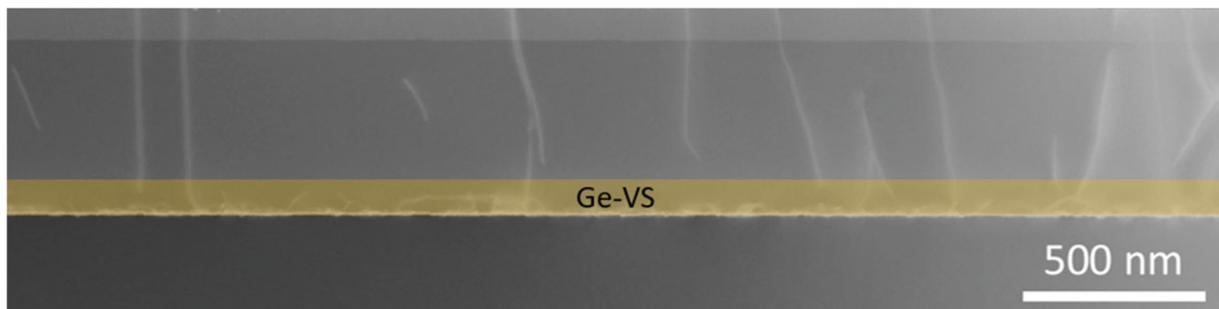


Abb. 3-5: TEM-Aufnahme der Probe 2-5.0Sn-200C mit farblich hervorgehobenem Ge-VS.

Neben dem gegenseitigen Auslöschen von Durchstoßversetzungen kommt es beim thermischen Ausheilschritt zur Eindiffusion von Si in die Ge-Schicht. Auf diese Weise kommt es zu einer graduellen Anpassung der Gitterkonstante von  $a_{Si} \rightarrow a_{Ge}$  innerhalb des Ge-VS. Dies hat zur Folge, dass sich die vertikale Gitterkonstante  $a_{\perp,Ge-VS}$  von der lateralen Gitterkonstante  $a_{\parallel,Ge-VS}$  innerhalb des Ge-VS unterscheiden. Dies ist der Grund für die explizite Formulierung der Gitteranpassungsbedingung in Gleichung 3-2.

Im Anschluss an den thermischen Ausheilschritt wird die Substrattemperatur für die Epitaxie der Bauteilstruktur abgesenkt. Die Zieltemperatur hängt dabei maßgeblich von der angestrebten (Legierungs-)Zusammensetzung und der Dotierstoffkonzentration ab.

Alternativ können auch zusätzliche Pufferschichten, wie beispielsweise bei Probenreihe 2, eingefügt werden, um eine weitere Reduktion der Durchstoßversetzungsdichte zu erwirken. Eine weitere Möglichkeit zur Reduktion der Durchstoßversetzungsdichte ist die Wiederholung der Schritte 3 und 4 (Epitaxie der Ge-Schicht und TA) der Herstellung des Ge-VS. Dies wurde im Rahmen der Epitaxie der Probenreihe 3 angewendet.

### 3.3. Probleme und Aspekte der $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxie

Bevor die Optimierung der Parameter der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxie in Kapitel 5 diskutiert wird dient diese Voruntersuchung dazu die Probleme und Aspekte der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxie mittels MBE aufzuzeigen. Als Basis hierfür dient ein im Rahmen der Arbeit durchgeführtes  $\text{Ge}_{1-z}\text{Sn}_z$ -Epitaxie Experiment, welches im nachfolgenden Abschnitt vorgestellt und diskutiert wird. Die

#### 3.3.1. Thesen zur $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ Epitaxie

Die Eigenschaften des A-MBE-Systems führen zu den folgenden Thesen:

- Die stärkere IR-Absorption von Ge,  $\text{Ge}_{1-z}\text{Sn}_z$  und  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  im Vergleich zu Si führt zu einer stärkeren Erwärmung der Substrattemperatur auf der Oberfläche. Diese weicht von der auf Si bezogenen Kalibrierung deutlich ab.
- Das Thermoelement zur Messung der Substrattemperatur eignet sich aufgrund seiner Einbaulage hinter dem Heizer nicht dazu die dynamischen Vorgänge auf der Substratoberfläche zu erfassen. Besonders kommt dieses Problem bei der Niedertemperatur-MBE bei Substrattemperaturen  $T_S < 300 \text{ °C}$  zum Tragen.
- Die IR-Strahlung der Molekularstrahlquellen liegt bei deren üblichen Arbeitstemperaturen von  $T_{\text{Quellen}} \geq 1000 \text{ °C}$  deutlich im Absorptionsbereich der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxieschicht und hat demzufolge eine beträchtliche Heizwirkung auf die Substratoberfläche. Unter Umständen ist diese Heizwirkung höher als die der eigentlichen Substratheizung, was die präzise Messung und Regelung der Substrattemperatur erheblich erschwert. Besonders problematisch ist dies bei der Epitaxie von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ , da diese durch temperaturabhängige Effekte wie Sn-Segregation beeinflusst wird.

#### 3.3.2. Messung der Substrattemperatur mittels Infrarot-Kamera

Um die oben genannten Thesen zu überprüfen, musste das MBE-System zunächst mit einer Möglichkeit zur in-situ Messung der tatsächlichen Substrattemperatur auf der Oberfläche erweitert werden.

Eine Möglichkeit hierfür wäre ein auf der Probe angebrachtes Thermoelement. Da dies allerdings aufgrund der für MBE notwendigen Vakuumbedingungen und der Rotation des Substrats praktisch nicht für jede Probe durchführbar ist muss auf eine kontaktlose Messmethode ausgewichen werden. Die übliche Methode hierfür ist die Pyrometrie.

Zu Beginn dieser Arbeit war das A-MBE-System mit einem Nah-IR-Pyrometer (NIR) ausgestattet, welches aufgrund seiner spektralen Empfindlichkeit nur im Temperaturbereich  $500\text{ °C} < T_S < 1200\text{ °C}$  messen kann. Um die für die GeSn-Epitaxie notwendigen Temperaturen von  $T_S < 250\text{ °C}$  messen zu können wurde das NIR-Pyrometer durch eine *Fluke TiS65* Infrarot-Kamera mit einer spektralen Empfindlichkeit im mittleren Infrarotbereich (MIR) von  $8\text{ }\mu\text{m} < \lambda < 13\text{ }\mu\text{m}$  erweitert. Sie ermöglicht die in-situ Messung der tatsächlichen Substratoberflächentemperatur und deren Verteilung über dem Substrat in einem Temperaturbereich von  $20\text{ °C} < T < 400\text{ °C}$ .

Die Verwendung der MIR-Kamera erfordert allerdings ein spezielles Fenster an der MBE Kammer, welches im erwähnten Spektralbereich einen ausreichenden Transmissionsgrad besitzt. Hier wurde ein ZnSe-Fenster mit dem in Abb. 3-6 dargestellten Transmissionsgrad  $\tau_{\text{ZnSe}}(\lambda)$  eingesetzt. Da die Transmissionsverluste das Messergebnis der MIR-Kamera verfälschen ist der Transmissionsgrad in der Kamera einzustellen. Anderenfalls müssen die gemessenen Werte anschließend korrigiert werden.

Bei der MIR-Pyrometrie ist außerdem zu berücksichtigen, dass die absoluten Werte der gemessenen Temperatur von der Emissivität  $\epsilon$  der Probenoberfläche abhängig sind. In dieser ersten Untersuchung ist allerdings vor allem der qualitative Verlauf der Oberflächentemperatur von Bedeutung, um die dynamischen Vorgänge auf der Substratoberfläche zu beobachten. Die Emissivität  $\epsilon$  wurde daher empirisch durch Einregeln einer bekannten Substrattemperatur oberhalb des kritischen Bereichs auf das Thermoelement kalibriert. Hierfür wurde eine Temperatur  $T_S = 330\text{ °C}$  gewählt. initiale Kalibrierung ergab einen Emissionsfaktor von  $\epsilon = 0,7$ , welcher für die folgenden diskutierten Epitaxieexperimente verwendet wurden.

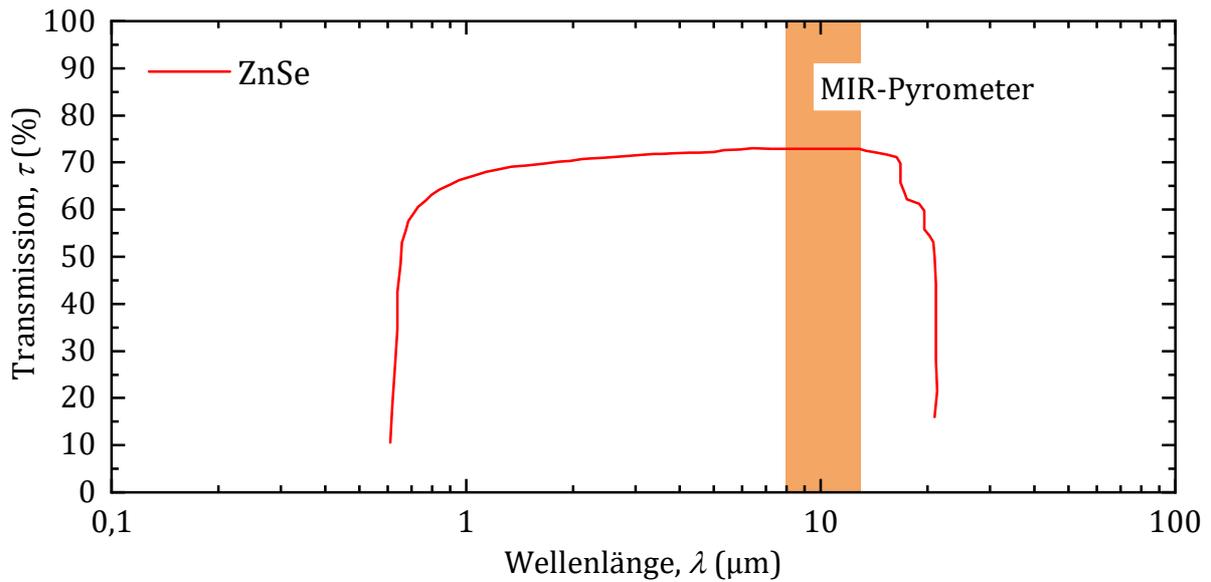


Abb. 3-6: Transmissionsspektrum des verwendeten ZnSe-Fensters. (Quelle der Absorptionsdaten: [61] S. 5-27)

Abb. 3-7 zeigt exemplarisch eine MIR-Aufnahme der Substratoberfläche bei  $T_s = 330\text{ °C}$ . Die MIR-Aufnahme beweist außerdem die hohe Homogenität der Substrattemperatur, welche im weiteren Verlauf noch von Bedeutung wird.

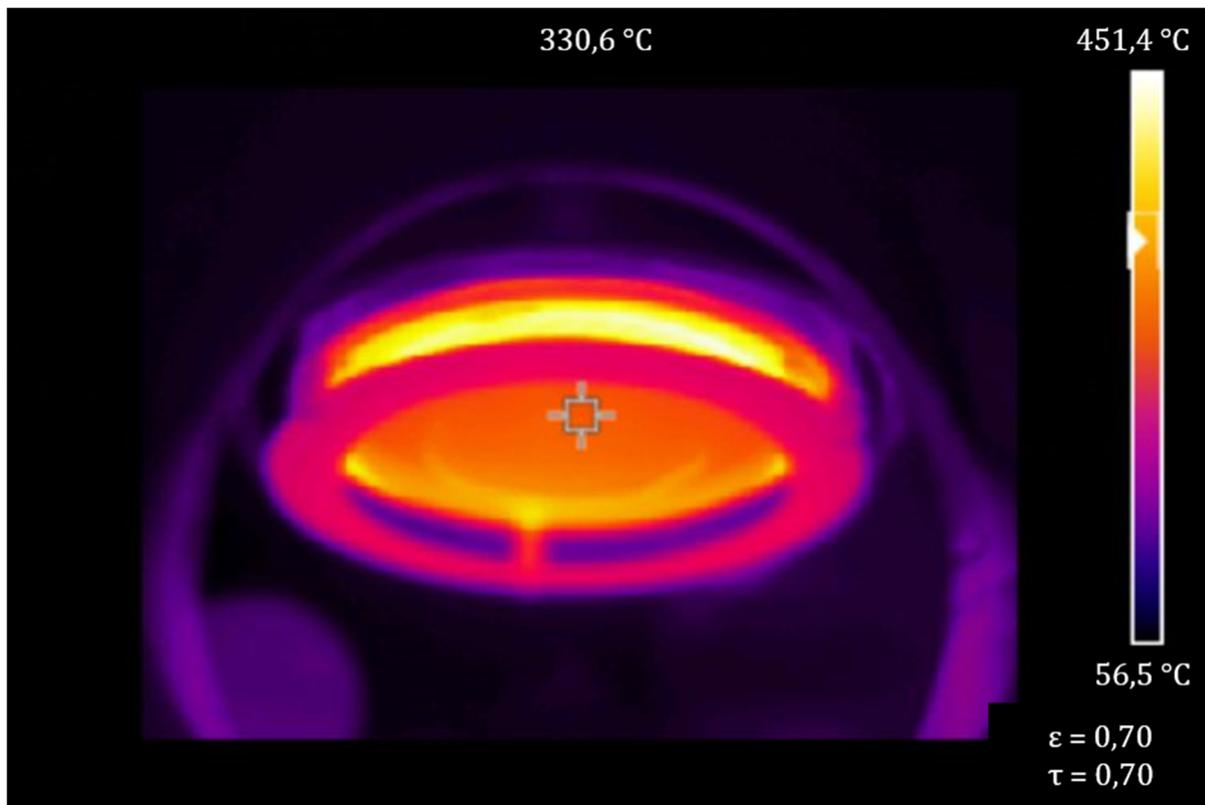


Abb. 3-7: Exemplarische MIR-Kameraaufnahme des Substrats bei  $T_s = 330\text{ °C}$ .

### 3.3.3. $\text{Ge}_{1-z}\text{Sn}_z$ -Wachstumsexperimente

Beim folgenden Wachstumsexperiment wurden zwei  $\text{Ge}_{0,92}\text{Sn}_{0,08}$ -Schichten hergestellt und dabei die dynamischen Veränderungen der Substrattemperatur auf der Oberfläche mithilfe der MIR-Kamera aufgezeichnet. Es wurde dabei der in Abb. 3-8 dargestellte Schichtstapel hergestellt. Die beiden Proben unterscheiden sich dabei in der für die Epitaxie der  $\text{Ge}_{0,92}\text{Sn}_{0,08}$ -Schicht eingepprägten Heizleistung gemäß Tab. 3-1.

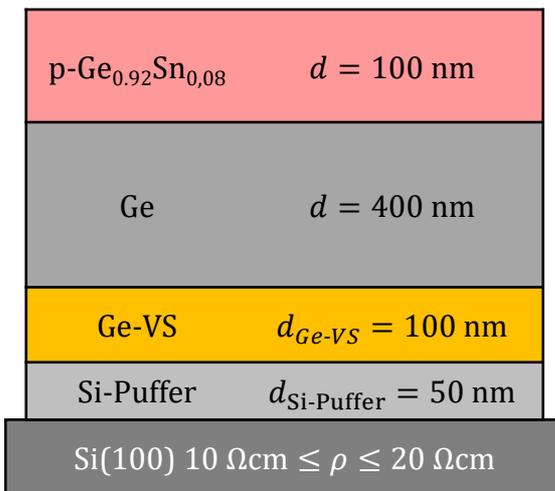


Abb. 3-8: Schichtstapel der Probenteilserie 1.0.

Probe	Heizleistung
<b>1.0-GeSn-8.0Sn-1</b>	$P = 7 \text{ W} \searrow 0 \text{ W}$
<b>1.0-GeSn-8.0Sn-2</b>	$P = 0 \text{ W}$

Tab. 3-1: Probenübersicht der Probenteilserie 1.0

Der Epitaxieprozess beginnt jeweils wieder mit der in Kapitel 2 beschriebenen Herstellung des Ge-VS. Auf das Ge-VS wird anschließend bei  $T_S = 330 \text{ }^\circ\text{C}$  eine zusätzliche Ge-Schicht mit einer Dicke von  $d_{\text{Ge}} = 400 \text{ nm}$  abgeschieden. Anschließend wurde die Substrattemperatur  $T_S$  für die Epitaxie der  $\text{Ge}_{0,92}\text{Sn}_{0,08}$ -Schicht wie nachfolgend beschrieben abgesenkt und eingestellt.

Bei Probe *1.0-GeSn-8.0Sn-1* wurde die Substrattemperatur, gemessen mit dem Thermoelement, von  $T_S = 330 \text{ }^\circ\text{C}$  durch eine definierte Abkühldauer  $t_{\text{Kühl}} = 1800 \text{ s}$  auf  $T_S = 145 \text{ }^\circ\text{C}$  abgesenkt. Zu Beginn der Epitaxie der  $\text{Ge}_{0,92}\text{Sn}_{0,08}$ -Schicht wurde eine konstante Heizleistung von  $P = 7 \text{ W}$  eingepragt, um die Substrattemperatur  $T_S$  zu halten. Die Heizleistung wurde anschließend für die Dauer des Wachstums von  $t = 1000 \text{ s}$  auf  $P = 0 \text{ W}$  heruntergerammt, um der Heizwirkung der Molekularstrahlquellen und der zusätzlich zunehmenden Absorption der  $\text{Ge}_{0,92}\text{Sn}_{0,08}$ -Schicht entgegenzuwirken. wurde.

Bei Probe *1.0-GeSn-8.0Sn-2* wurde hingegen die Abkühldauer verlängert und die Heizleistung von vornherein bei  $P = 0 \text{ W}$  belassen. Im Folgenden wird stets die mit dem

Thermoelement gemessene Substrattemperatur mit der tatsächlichen Substrattemperatur auf der Oberfläche, welche mit der MIR-Kamera gemessen wurde, verglichen. Das Augenmerk liegt dabei zunächst auf den Temperaturverläufen der Epitaxie der Si und Ge-Pufferschicht, exemplarisch betrachtet an Probe *1.0-GeSn-8.0Sn-1* in Abb. 3-9.

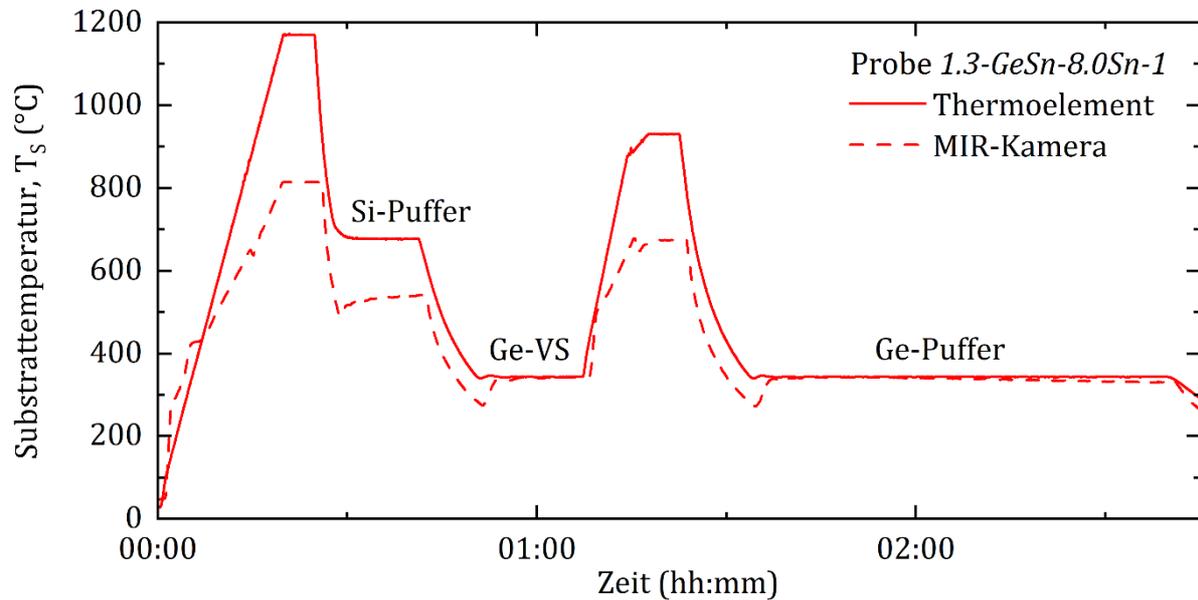


Abb. 3-9: Verlauf der Substrattemperatur, gemessen mit dem Thermoelement (durchgezogene Linie) und der MIR-Kamera (Strichlinie), während der Epitaxie des Si-Puffers, des Ge-VS und des Ge-Puffers der Probe *1.0-GeSn-8.0Sn-1*.

Zunächst fällt eine deutliche Abweichung der mit dem Thermoelement und dem MIR-Pyrometer gemessenen Substrattemperaturen für Substrattemperaturen  $T_s \geq 600 \text{ °C}$  auf. Dies ist auf darauf zurückzuführen, dass das MIR-Pyrometer hier außerhalb seines validen Messbereichs von  $20 \text{ °C} < T < 400 \text{ °C}$  arbeitet. Für Substrattemperaturen  $T_s < 400 \text{ °C}$  zeigt sich hingegen eine sehr gute Übereinstimmung der absolut-kalibrierten Messung mittels Thermoelement und der Messung mittels MIR-Pyrometer.

Auffallend ist außerdem, dass zu Beginn der Epitaxie des Ge-VS und des Ge-Puffers die mit dem MIR-Pyrometer gemessene Substrattemperatur deutlich den mit dem Thermoelement geregelten Verlauf unterschreitet. Dies ist auf die Trägheit der Regelung, hervorgerufen durch die Einbauposition des Thermoelements, zurückzuführen. Eine zu niedrige Substrattemperatur kann dabei auf verschiedene Arten zu Problemen führen. Da die in Abschnitt 2.2 beschriebene Segregation von Dotierstoffen stark temperaturabhängig ist, kann es bei zu niedriger Substrattemperatur und erfolgter Dotierstoff-

Vorbelegung zu einer lokalen Dotierstoffüberhöhung kommen. Diese kann zum einen den Epitaxieprozess stören und zum anderen die Bauteileigenschaften nachteilig beeinflussen.

Eine deutlich zu niedrige Substrattemperatur während der Epitaxie kann außerdem zur Bildung von Polykristallinität führen. Zur Vermeidung dieser Probleme ist es daher notwendig Wartephasen zur Stabilisierung der Substrattemperatur einzufügen. Da es außerdem bei der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxie zur Segregation von Sn kommt ist eine möglichst konstante Substrattemperatur während des gesamten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Epitaxieprozesses notwendig.

Betrachtet man den Verlauf der mittels Thermoelement gemessenen Substrattemperatur der beiden Epitaxieprozesse in Abb. 3-10 fällt auf, dass die Substrattemperatur bei Probe *1.0-GeSn-8.0Sn-1* während der Epitaxie der  $\text{Ge}_{0,92}\text{Sn}_{0,08}$ -Schicht relativ konstant verläuft, bei Probe *1.0-GeSn-8.0Sn-2* jedoch stetig fällt. Auf Basis dieser Ergebnisse ist der Verlauf der Substrattemperatur von Probe *1.0-GeSn-8.0Sn-1* dem von Probe *1.0-GeSn-8.0Sn-2* vorzuziehen.

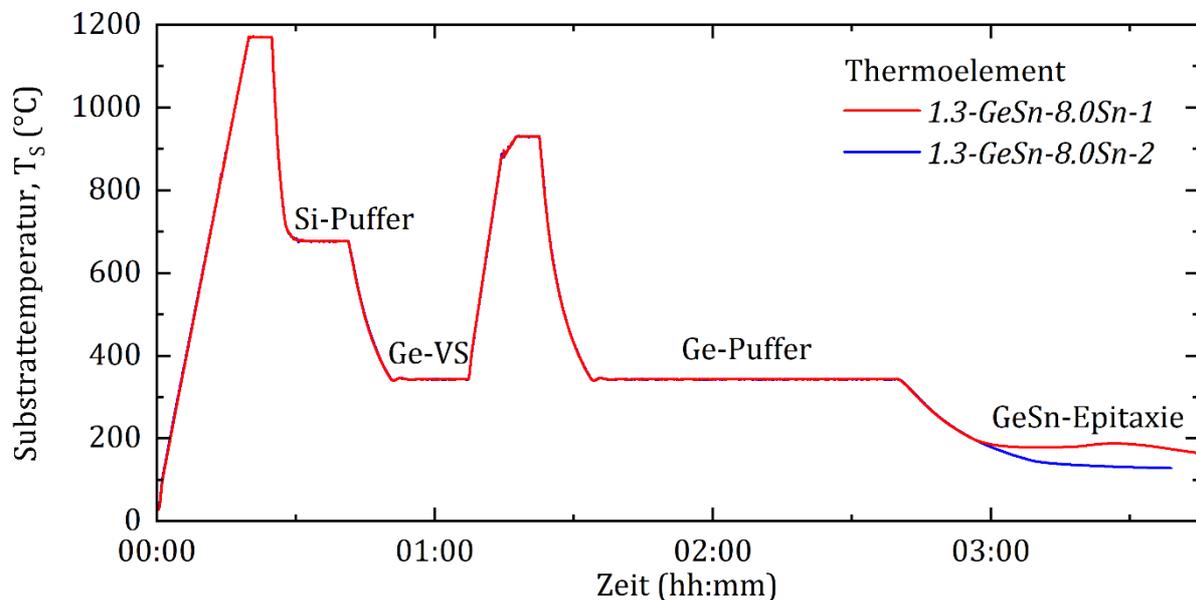


Abb. 3-10: Vergleich des Verlaufs der mit dem Thermoelement gemessenen Substrattemperatur der Proben *1.0-GeSn-8.0Sn-1* (rot) und *1.0-GeSn-8.0Sn-2* (blau).

Der Verlauf der mittels MIR-Kamera gemessenen Temperatur der Substrattemperatur auf der Oberfläche in Abb. 3-11 zeigt allerdings deutliche Unterschiede zur mit dem Thermoelement gemessenen Substrattemperatur. Bei beiden Proben steigt die Substrat-

temperatur zu Beginn der Epitaxie der  $\text{Ge}_{0,92}\text{Sn}_{0,08}$ -Schicht deutlich an. Dies ist besonders bei Probe *1.0-GeSn-8.0Sn-2* erstaunlich, da hier keine Heizleistung durch die eigentliche Substratheizung eingeprägt wurde. Dies ist ein deutlicher Beweis für die starke Heizwirkung der Molekularstrahlquellen, insbesondere bei derart niedrigen Substrattemperaturen.

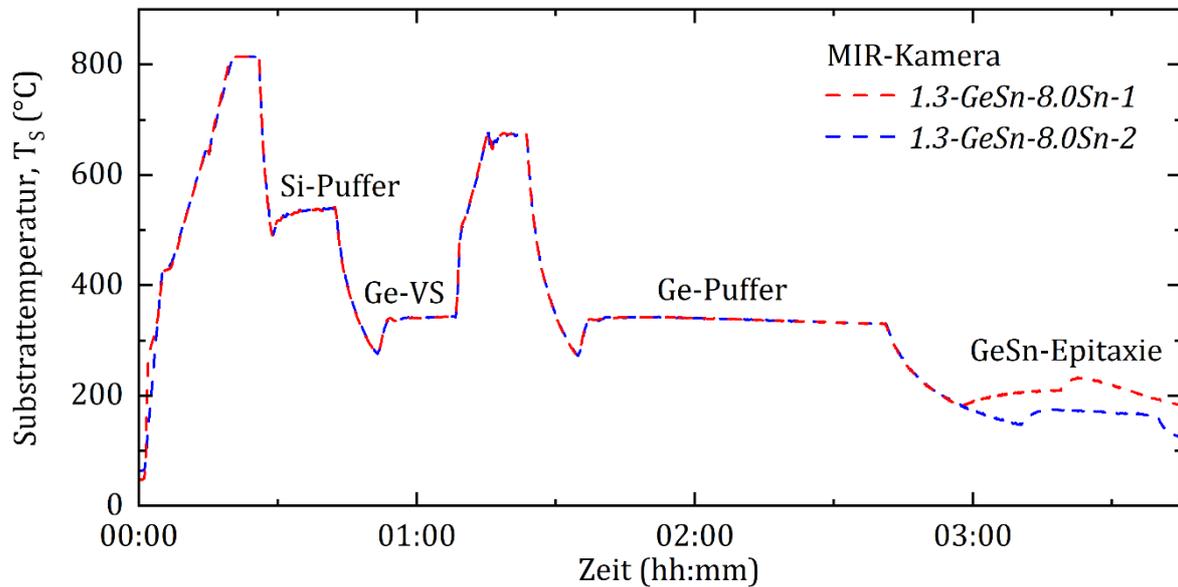


Abb. 3-11: Vergleich des Verlaufs der mit der MIR-Kamera gemessenen Substrattemperatur der Proben *1.0-GeSn-8.0Sn-1* (rot) und *1.0-GeSn-8.0Sn-2* (blau).

Im Detail wird deutlich, dass bei Probe *1.0-GeSn-8.0Sn-1* die Substrattemperatur zu Beginn des Heizens um  $\Delta T = 10$  K, zum Beginn des Epitaxieprozesses um weitere  $\Delta T = 20$  K ansteigt. Durch das Herunterrampen der Heizleistung fällt die Substrattemperatur anschließend auf  $T_S \approx 150$  °C ab. Die Epitaxie der  $\text{Ge}_{0,92}\text{Sn}_{0,08}$ -Schicht kann daher in drei Bereiche mit unterschiedlichem Temperaturregime unterteilt werden.

Die Auswirkungen auf die Sn-Segregation werden durch die Ergebnisse der anschließenden XRD-Analyse deutlich. Abb. 3-12 zeigt den Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der beiden Proben. Probe *1.0-GeSn-8.0Sn-1* zeigt dabei drei einzelne Reflexe im Bereich  $64,5^\circ \leq 2\theta \leq 65,0^\circ$ , welche den einzelnen Abschnitten der  $\text{Ge}_{0,92}\text{Sn}_{0,08}$ -Schicht, verursacht durch die unterschiedliche Sn-Segregation, zugeordnet werden können.

Im Gegensatz dazu verläuft die Substrattemperatur auf der Oberfläche bei Probe *1.0-GeSn-8.0Sn-2* laut MIR-Kamera trotz ausgeschalteter Substratheizung nahezu konstant bei  $T_S = 170$  °C. Das  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum der XRD Analyse von Probe

$1.0\text{-GeSn-}8.0\text{Sn-}2$  ist in der unteren Hälfte von Abb. 3-12 dargestellt. Es zeigt einen klar definierten, einzelnen Reflex bei  $2\theta = 64,6^\circ$ , was auf eine deutlich bessere Kristallqualität durch die reduzierte und vor allen Dingen konstante Sn-Segregation zurückzuführen ist.

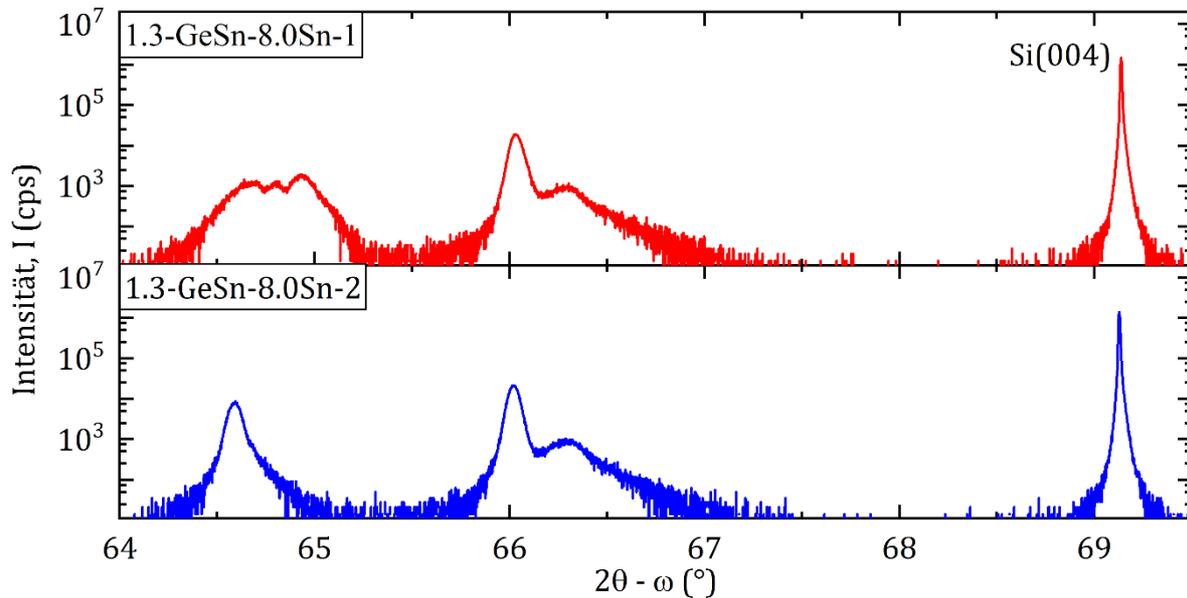


Abb. 3-12: Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Proben  $1.0\text{-GeSn-}8.0\text{Sn-}1$  (rot) und  $1.0\text{-GeSn-}8.0\text{Sn-}2$  (blau).

Zur weiteren Analyse, der dabei zu erwartenden Sn-Segregation ist in Abb. 3-13 eine strukturelle Rasterelektronenmikroskop-Aufnahme der Oberfläche der Probe  $1.0\text{-GeSn-}8.0\text{Sn-}1$  ist in dargestellt.

Eine zu hohe Sn-Segregation durch eine zu hohe Substrattemperatur bei der Epitaxie von  $\text{Ge}_{1-z}\text{Sn}_z$  kann außerdem, wie in Abschnitt 2.2 beschrieben, zur Bildung von  $\beta$ -Sn-Clustern führen. Dieser Effekt ist bereits in der Literatur beschrieben [27] und konnte auch hier bei Probe  $1.0\text{-GeSn-}8.0\text{Sn-}1$  beobachtet werden. Die Strukturaufnahme in Abb. 3-13 zeigt dabei deutlich die beschriebenen  $\beta$ -Sn-Tropfen. Die Verwendung des Rückstreuungselektronen-Detektors (BSE-Detektor) erlaubt außerdem eine quantitative Bestätigung, dass es sich dabei um metallisches  $\beta$ -Sn handelt, da in dieser Aufnahme in Abb. 3-13 b) schwerere Elemente heller erscheinen.

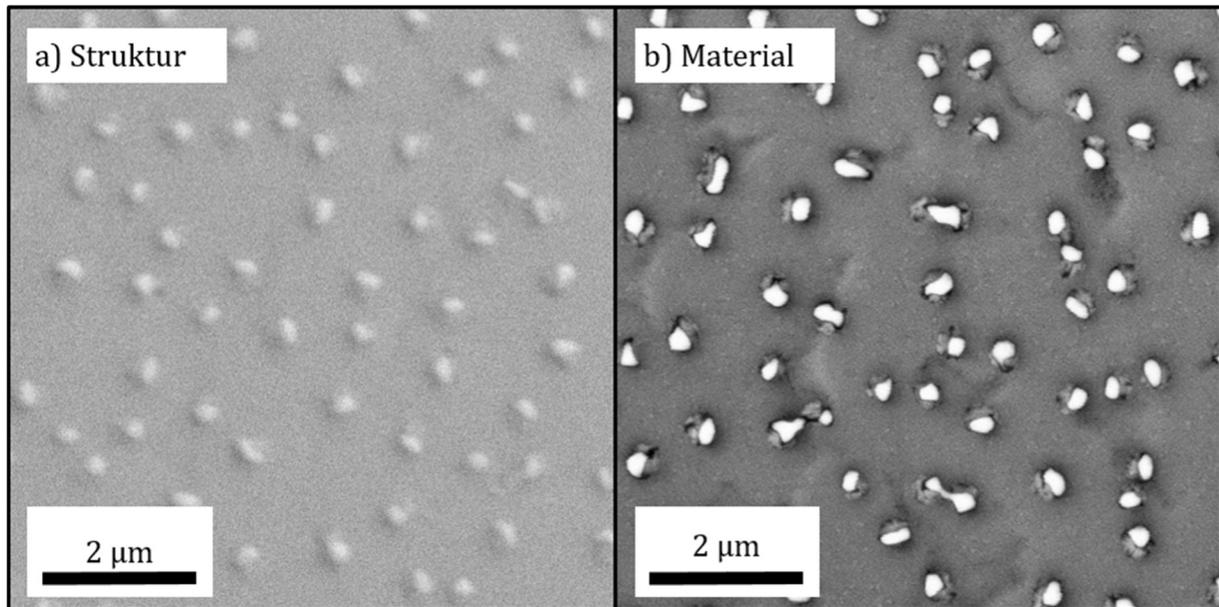


Abb. 3-13: REM-Aufnahme der Probe *1.0-GeSn-8.0Sn-1*, a) Strukturaufnahme, b) Materialkontrast.

### 3.3.4. Fazit der Substrattemperaturmessung mittels MIR-Kamera

Die Ergebnisse der vorgestellten Voruntersuchung zur Epitaxie von  $\text{Ge}_{0,92}\text{Sn}_{0,08}$  zeigen, dass die verwendete MIR-Kamera die sehr präzise Messung der tatsächlichen Substrattemperatur auf der Oberfläche erlaubt. Dies ermöglicht das Beobachten der dort stattfindenden dynamischen Vorgänge. Ein Nachteil der MIR-Kamera ist jedoch das Fehlen eines echtzeitfähigen Signalausgangs zur Einspeisung in die Anlagensteuerung. Dadurch ist es nicht möglich auf Basis der durchgeführten Messung aktiv in den Epitaxieprozess einzugreifen.

Die Ergebnisse der Voruntersuchung bestätigen außerdem die Auswirkung der Strahlung der Molekularstrahlquellen. Die dadurch in das Substrat eingebrachte Heizleistung ist nicht im Vorfeld kalkulierbar, da sie von der Arbeitstemperatur der Molekularstrahlquellen und im Falle der Ge-Effusionzelle sogar von deren Füllstand abhängt.

Die Kompensation der durch die Molekularstrahlquellen eingebrachten Heizleistung erfordert daher eine aktive und dynamische Gegenregelung. Dies erfordert wiederum einen echtzeitfähigen Signalausgang der MIR-Kamera. In Kapitel 4 wird daher noch eingehend auf die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführte Anpassung des A-MBE-Systems eingegangen.

### 3.4. Erste $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxiearbeiten am IHT

Dieses Teilkapitel befasst sich mit den ersten am IHT durchgeführten Vorarbeiten zur  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxie. Die Ergebnisse zeigen dabei die Probleme der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxie auf und erlauben erste Schlüsse, wie diese verbessert werden kann. Die ersten Untersuchungen zur Epitaxie von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  am IHT beschäftigten sich zunächst mit der Fragestellung ob es mit einem für die Epitaxie von  $\text{Si}_{1-w}\text{Ge}_w$  ausgelegten MBE-System überhaupt möglich ist einen ternären Legierungshalbleiter herzustellen.

Historisch gesehen wurden  $\text{Si}_{1-w}\text{Ge}_w$ -MBE-Systeme in der Forschung im Bereich von Heterobipolartransistoren (HBTs) oder auch modular dotierten Feldeffekttransistoren (MODFETs) [62] verwendet. Beim Wachstum dieser Strukturen kommt es üblicherweise auf dynamisch veränderliche Flüsse und hohe Raten an, um die erforderlichen graduellen Puffer wachsen zu können [63]. Daher verwendete man für gewöhnlich ESVs als Molekularstrahlquellen für Si und Ge. Ein weiterer Grund ist außerdem, dass es lange Zeit keine geeigneten Materialien zur Herstellung von Effusionstiegeln von Si und Ge gab. Erst die Synthese von pyrolytischem BN ermöglichte den Bau von Ge-Effusionszellen mit entsprechenden Flussraten.

Bei dem im Rahmen dieser Arbeit verwendeten A-MBE-System kommen, wie bereits in Abschnitt 3.1 beschrieben, ein ESV zur Verdampfung von Si und Effusionszellen zur Verdampfung von Ge und Sn zum Einsatz. Aufgrund der beschriebenen Eigenschaften des Si-ESV und der Effusionszellen sind die Arbeitsbereiche der Molekularstrahlquellen sehr beschränkt. Außerdem wird die Messung und Regelung des Si-Flusses durch die bereits beschriebenen Probleme erschwert. Diese kommen besonders bei kleinen Si-Flüssen, wie sie für die  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxie notwendig sind, zum Tragen. Die möglichst genaue Einhaltung der Legierungszusammensetzung von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  erfordern allerdings eine hohe Reproduzierbarkeit und Stabilität der eingestellten Molekularstrahlflüsse.

Unter Kenntnis dieser Gegebenheiten ist es daher legitim die technologische Realisierbarkeit der Epitaxie von auf Ge gitterangepasstem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  mit dem hier verwendeten A-MBE-System zu hinterfragen.

Um dieses Problem näher zu beleuchten, wurden bereits vor Beginn der vorliegenden Arbeit erste Versuche zum Wachstum von auf Ge gitterangepasstem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  durchgeführt. Die Proben wurden anschließend zur Bestimmung der Schichtqualität, der tatsächlichen Zusammensetzung und schlussendlich der Reproduzierbarkeit der Gitteranpassung verschiedenen Analyseverfahren wie XRD, Raman, RBS und TEM unterzogen. Die Ergebnisse werden im Folgenden dargestellt und diskutiert, um daraus Handlungsweisen für die weiteren  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Arbeiten abzuleiten.

Im Rahmen der ersten Experimente zur Epitaxie von auf Ge gitterangepasstem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  am IHT wurden die Probenserien 1.1 und 1.2 mit insgesamt sieben Proben hergestellt. Es wurde dabei der in Abb. 3-14 dargestellte Schichtstapel realisiert. Er besteht aus einer intrinsischen  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht mit einer Dicke von  $d_{\text{SiGeSn}} = 100 \text{ nm}$  auf dem bereits beschriebenen Standard-Ge-VS mit  $d_{\text{Ge-VS}} = 100 \text{ nm}$ , inklusive des darunter liegenden Si-Puffers mit  $d_{\text{Si-Puffer}} = 50 \text{ nm}$ .

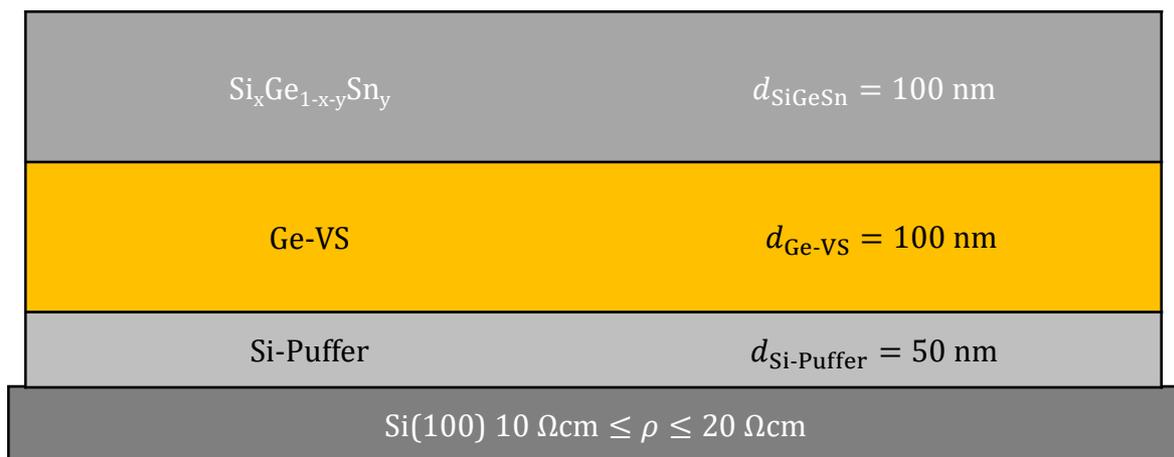


Abb. 3-14: Schematische Darstellung des Schichtstapels der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserie 1.

Im Anschluss an die Epitaxie des Ge-VS wurde die Substrattemperatur von  $T_S = 330 \text{ }^\circ\text{C}$  durch eine definierte Abkühldauer  $t_{\text{Kühl}} = 800 \text{ s}$  auf  $T_S = 200 \text{ }^\circ\text{C}$  abgesenkt. Während der Epitaxie der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht wurde, ähnlich wie bei Probe 1.0-GeSn-8.0Sn-2, keine Heizleistung ( $P = 0 \text{ W}$ ) eingeprägt. Zur Einstellung der Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht wurden zunächst die Flüsse der Legierungsbestandteile Si, Ge und Sn mit jeweils drei Kalibrierproben kalibriert. Im Falle der Flüsse von Si und Ge wurden die Kalibrierdaten mit quadratischen Funktionen angepasst und extrapoliert. Im Falle des Sn-Flusses wurden die Kalibrierdaten mit Arrheniusfunktionen angepasst und extrapoliert.

Die Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht wurde gemäß Tab. 3-2 so gewählt, dass die in Gleichung (4-3) im Detail vorgestellte Bedingung der Gitteranpassung auf Ge erfüllt ist. Die Sn-Konzentration  $c_{\text{Sn}}$  variiert dabei zwischen  $5\% \leq c_{\text{Sn}} \leq 15\%$ . Die Bedingung der Gitteranpassung und die Kristallqualität wurde anschließend mittels XRD überprüft.

Probe	$c_{\text{Si}}$ (%)	$c_{\text{Ge}}$ (%)	$c_{\text{Sn}}$ (%)
<b>1.1-5.0Sn</b>	18,4	76,7	5,0
<b>1.2-7.5Sn</b>	27,5	65,0	7,5
<b>1.1-10.0Sn</b>	36,7	53,3	10,0
<b>1.2-10.0Sn</b>	36,7	53,3	10,0
<b>1.2-12.5Sn</b>	45,9	41,6	12,5
<b>1.1-15.0Sn</b>	55,1	30,0	15,0
<b>1.2-15.0Sn</b>	55,1	30,0	15,0

Tab. 3-2: Übersicht der Proben und deren  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht-Zusammensetzungen der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserie 1.

In Abb. 3-15 ist zunächst der Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Proben der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenteilserie 1.1 dargestellt. Die rosafarbene Strichlinie bei  $2\theta = 66^\circ$  markiert die Position des Reflexes einer reinen Ge-Schicht. In jedem  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum sind bei  $2\theta \approx 66,3^\circ$  ein bis zwei Reflexe zu erkennen, welche sich dem Ge-VS und der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht zuordnen lassen können. Die Position der Reflexe variiert dabei stark von Probe zu Probe. Dies ist auf die erwarteten Fluktuationen des Si-Flusses zurückzuführen. Hierdurch kommt es zu einer ungewollten Gitterfehlanspassung. Die hergestellten Schichten sind daher lediglich verspannungsarm. Es ist trotzdem festzuhalten, dass die Fluktuationen des Si-Flusses die Epitaxie einer monokristallinen  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht erlauben. Bemerkenswert ist außerdem die breite Form und geringe Intensität des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes der Probe 1.1-15.0Sn, welche auf eine geringe Kristallqualität hinweisen.

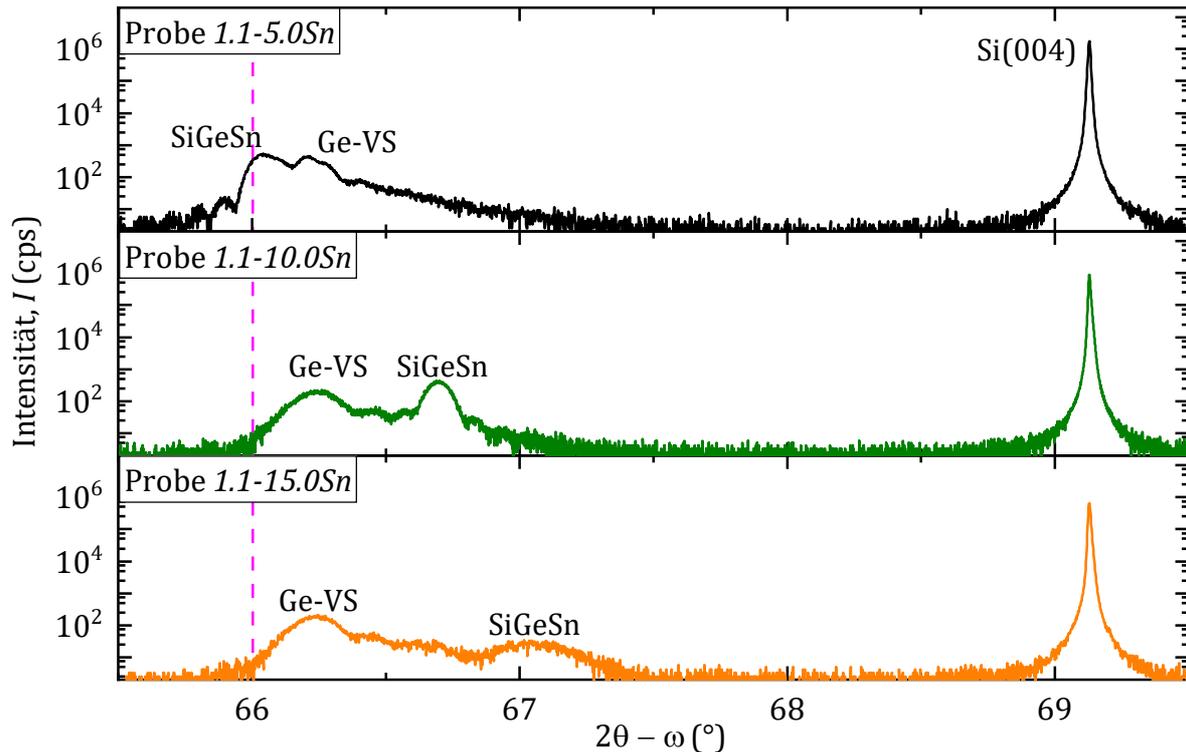


Abb. 3-15: Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probenreihe 1.1. Die rosafarbene, Strichlinie markiert zur Verdeutlichung die zunehmende Position des Reflexes einer relaxierten Ge-Schicht.

Im nächsten Schritt werden die  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probenreihe 1.2 in Abb. 3-16 betrachtet. Bei dieser Probenreihe ist die Variation der Reflexposition schon deutlich geringer. Die Form und Position des sich ergebenden Reflexmusters zeigen dennoch eine unzureichende Reproduzierbarkeit des Gitteranpassung. Die Intensität und Breite des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes weisen außerdem auf Schichtinhomogenitäten hin.

Eine qualitative Bewertung des Spannungszustandes der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht erlaubt allerdings nur die Betrachtung der RSMs des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes der Probenreihe 1.1 in Abb. 3-17.

Hierbei zeigt sich die deutliche Verschiebung des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes der Proben untereinander. Im RSM der Probe 1.1-15.0Sn ist der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörige Reflex aufgrund der geringen Kristallqualität jedoch kaum mehr zu erkennen. Die vertikale Ausrichtung der Reflexe zeigt, dass die Schichten trotz der deutlich sichtbaren Gitterfehl-anpassung pseudomorph aufgewachsen sind.

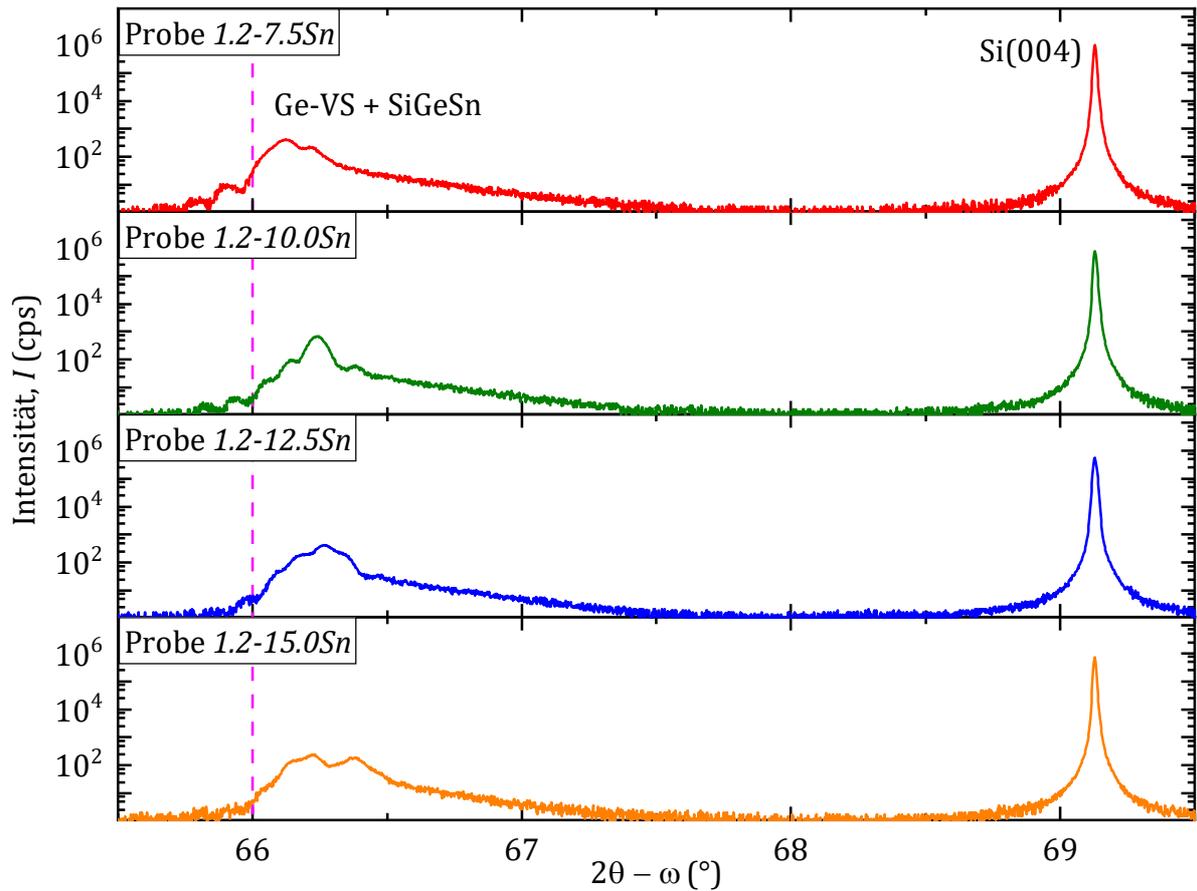


Abb. 3-16: Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probenteilserie 1.2. Die rosafarbene, Strichlinie markiert zur Verdeutlichung die anzunehmende Position des Reflexes einer relaxierten Ge-Schicht.

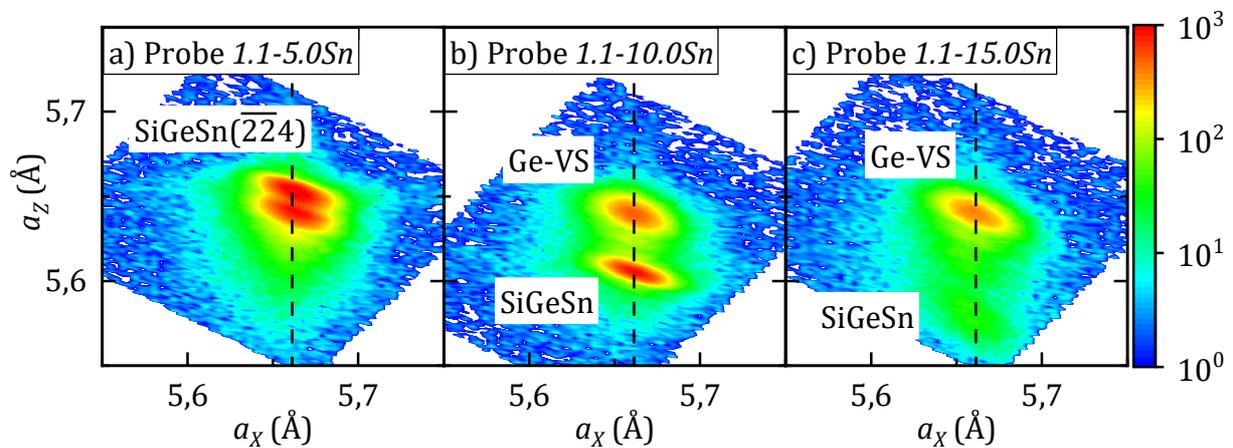


Abb. 3-17: Komplettübersicht der RSMs des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes der Probenserie 1.1. a) Probe 1.1-5.0Sn; b) Probe 1.1-10.0Sn; c) Probe 1.1-15.0Sn.

Die in Abb. 3-18 dargestellten RSMs der Probenteilserie 1.2 zeigen, wie bei der Probenteilserie 1.1, das pseudomorphe Wachstum der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht anhand der vertikalen Ausrichtung der Reflexe. Im Gegensatz zur Probenteilserie 1.1 zeigt hier jedoch nur das RSM der Probe 1.2-15.0Sn zwei separate Reflexe.

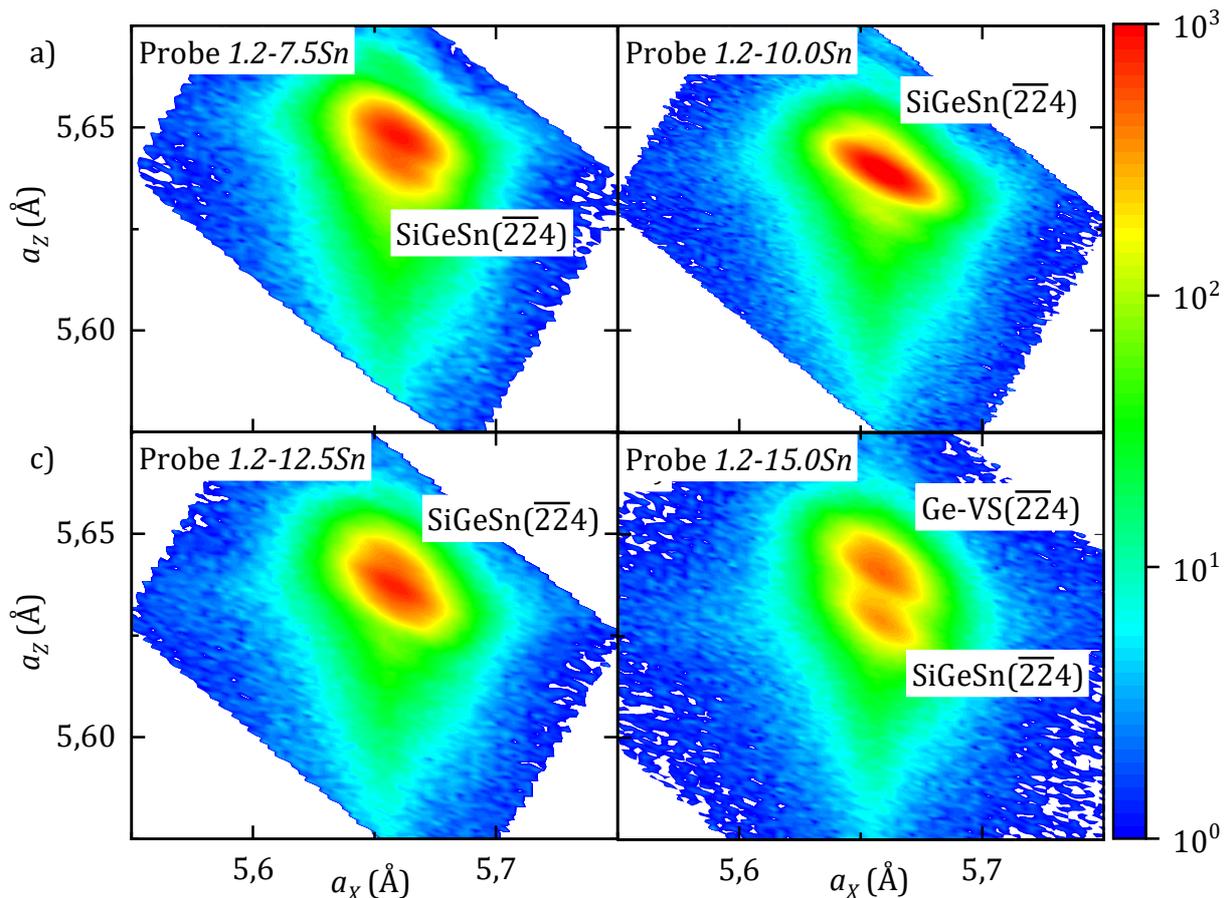


Abb. 3-18: Komplettübersicht der RSMs des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes der Probenserie 1.2. a) Probe 1.2-7.5Sn; b) Probe 1.2-10.0Sn; c) Probe 1.2-12.5Sn; d) Probe 1.2-15.0Sn.

Da nicht nur die Erfüllung der Gitteranpassung, sondern auch die möglichst präzise Einhaltung angestrebter Zusammensetzungen bei der Realisierung von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Heterostrukturen von großer Bedeutung ist wurde die Probenteilserie 1.2 anschließend mittels RBS auf ihre genaue Zusammensetzung hin untersucht. Die Analysen wurden von Mitarbeitern des Peter-Grünberg-Instituts 9 am Forschungszentrum Jülich durchgeführt. Die RBS-Spektren der einzelnen Proben sind in Abb. 3-19 dargestellt. Die einzelnen Peaks lassen sich dabei sehr gut den einzelnen Bestandteilen des Schichtstapels zuordnen. Bemerkenswert ist das hohe Channeling-Signal der Proben 1.2-10.0Sn und 1.2-15.0Sn von  $X_{\min} > 20\%$ . Es weist auf eine hohe Zahl an Punktdefekten und somit eine geringe Kristallqualität hin.

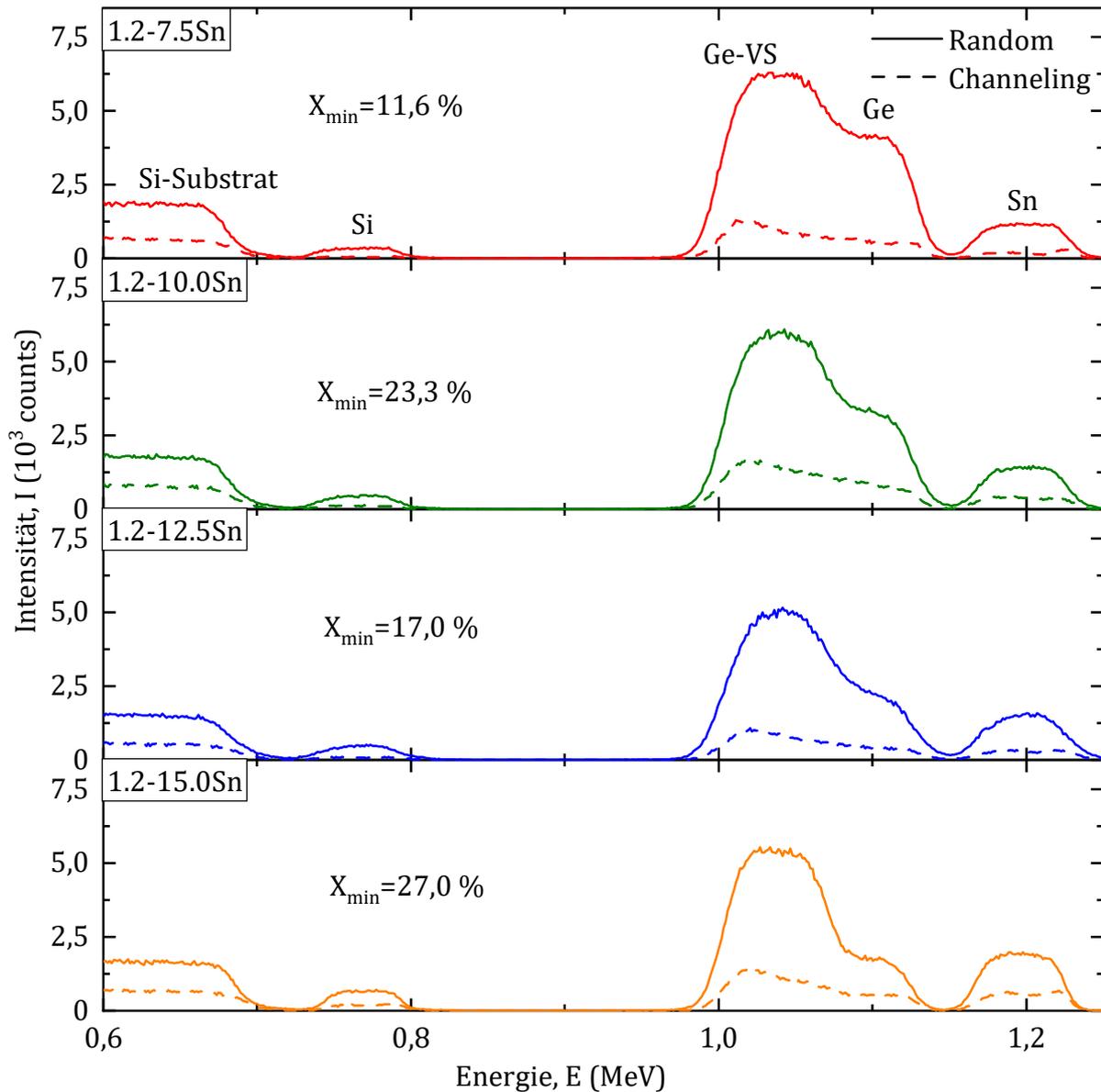


Abb. 3-19: Übersicht der RBS-Spektren der Probenreihe 1.2.

Durch Simulation und Anpassung des zu erwartenden RBS-Spektrums des Schichtstapels wurde die tatsächliche Zusammensetzung und die Dicke der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht. Außerdem bietet die prozentuale Höhe des Channeling-Signals ein Kriterium zur qualitativen Bewertung der Kristallqualität. Die tatsächlichen Si, Ge und Sn-Konzentrationen, Dicke der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht und die Höhe des Channeling-Signals sind in Tab. 3-3 zusammengefasst. Die tatsächliche Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht passt dabei mit einer maximalen Abweichung von  $\Delta c = \pm 1\%$  sehr gut mit den angestrebten Werten überein.

<b>Probe</b>		<b>d (nm)</b>	<b>c<sub>Si</sub> (%)</b>	<b>c<sub>Ge</sub> (%)</b>	<b>c<sub>Sn</sub> (%)</b>
<b>1.2-7.5Sn</b>	Nominell	100	27,5	65,0	7,5
	RBS	96	26,5	66,0	7,5
<b>1.2-10.0Sn</b>	Nominell	100	36,7	53,3	10,0
	RBS	97	37,5	53,0	9,5
<b>1.2-12.5Sn</b>	Nominell	100	45,9	41,6	12,6
	RBS	98	46,1	41,5	12,4
<b>1.2-15.0Sn</b>	Nominell	100	55,0	30,0	15,0
	RBS	98	54,7	31,0	14,3

Tab. 3-3: Übersicht der angestrebten und mittels RBS ermittelten tatsächlichen Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht der Probenteilserie 1.2.

Zur Bewertung der Legierungshomogenität und -qualität wurden außerdem TEM-EDXS Analysen durchgeführt. Für die TEM-EDXS-Analyse wurden dabei die Proben *1.1-5.0Sn*, *1.2-7.5Sn*, *1.1-10.0Sn* und *1.2-12.5Sn* ausgewählt. Abb. 3-20 zeigt zunächst eine TEM-Aufnahme der Probe *1.1-5.0Sn*. Zunächst sind deutlich die drei unterschiedlichen Schichten des Schichtstapels am Materialkontrast zu differenzieren: Si-Substrat, Ge-VS und die eigentliche  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht. Darüber hinaus erkennt man eine große Zahl an Durchstoßversetzungen, welche an der Grenzfläche zwischen Si-Puffer und Ge-VS beginnen. Ihre Ursache liegt in der Relaxation des Ge-VS. Eigentlich sollten sich die Durchstoßversetzungen an der oberen Grenzfläche des Ge-VS mithilfe des durchgeführten Temperschritts ausgleichen, jedoch ist erkennbar, dass eine Vielzahl davon in die  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht hineinragen. Diese würden im Falle eines elektrischen Bauelements dessen Verhalten nachteilig beeinflussen. Auffallend sind auch mehrere Trapez-förmige Strukturen an der Grenzfläche zwischen dem Si-Puffer und dem Ge-VS.

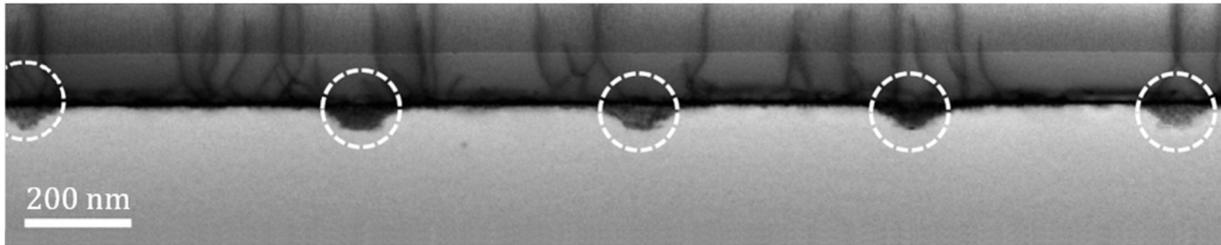


Abb. 3-20: TEM-Aufnahme der Probe 1.1-5.0Sn.

Die Trapez-förmigen Strukturen stoppen interessanterweise an der sich andeutenden Grenzfläche zwischen Si-Substrat und dem darauf liegenden Si-Puffer. Zur Analyse der Ursache dieser Strukturen wurde eine TEM-EDXS-Aufnahme von einer der Strukturen durchgeführt. Das Ergebnis ist in Abb. 3-21 dargestellt. Es ist dabei ein schwächeres Si-Signal in der Trapez-förmigen Struktur im Vergleich zum umgebenden Si-Puffer zu erkennen. Gleichzeitig weist die Struktur ein unerwartetes Ge-Signal auf. Dies führt zum Schluss, dass es an dieser Stelle zur verstärkten Interdiffusion von Si und Ge während dem Tempersschritt zur Formierung des Ge-VS kam. Eine mögliche Ursache hierfür ist eine unzureichende thermische Desorption an dieser Stelle. Verbleibende Oxidreste führen anschließend als Keimzelle für das Ge-Wachstum und die nachfolgende Eindiffusion. Diese Theorie kann aber nicht eindeutig experimentell belegt werden.

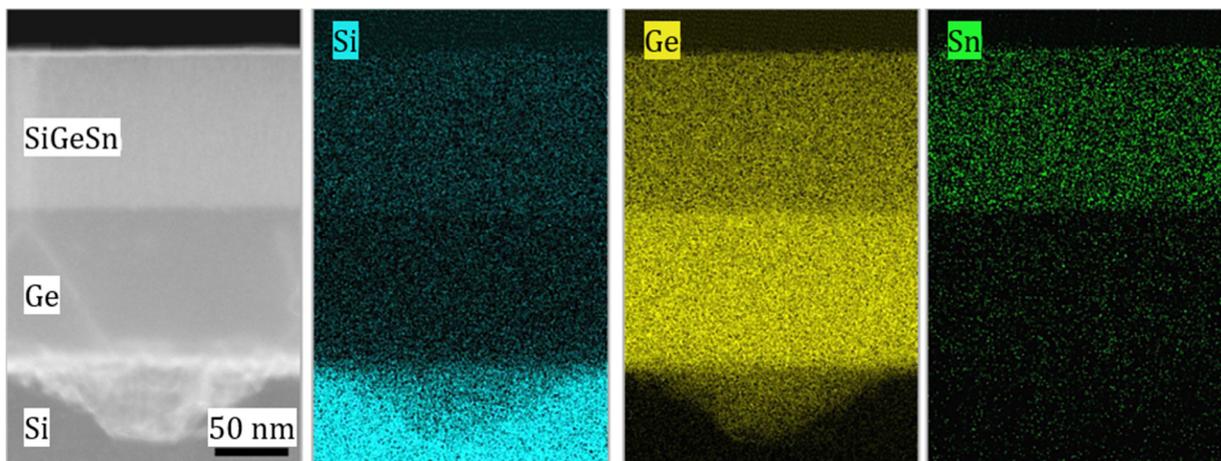


Abb. 3-21: TEM-EDXS-Aufnahme der Probe 1.1-5.0Sn. V.l.n.r.: ADF-TEM-Aufnahme, Si-EDXS-Spektrum, Ge-EDXS-Spektrum, Sn-EDXS-Spektrum.

Die TEM-EDXS-Aufnahme erlaubt darüber hinaus eine Aussage über die Legierungshomogenität der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht. Die Fluktuationen des Si-Flusses und die temperaturabhängige Sn-Segregation berechtigen zur Annahme, dass es innerhalb der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht zu lokalen Häufungen bestimmter Legierungsanteile kommt. Die TEM-EDXS-Aufnahme in Abb. 3-21 zeigt jedoch eine homogene Verteilung der

Legierungselemente. Auffallend ist ein leichtes Sn-Signal in der eigentlich reinen Ge-Schicht. Dies könnte auf eine mögliche Sn-Kontamination hinweisen. Da jedoch auch am unteren Rand der Aufnahme im Si-Substrat ein Signal zu erkennen ist könnte es auch im Rauschpegel des EDXS-Detektors liegen.

Zur weiteren Analyse werden nun die TEM-EDXS-Aufnahmen der Proben *1.1-5.0Sn*, *1.2-7.5Sn*, *1.1-10.0Sn* und *1.2-12.5Sn* im direkten Vergleich in Abb. 3-22 betrachtet.

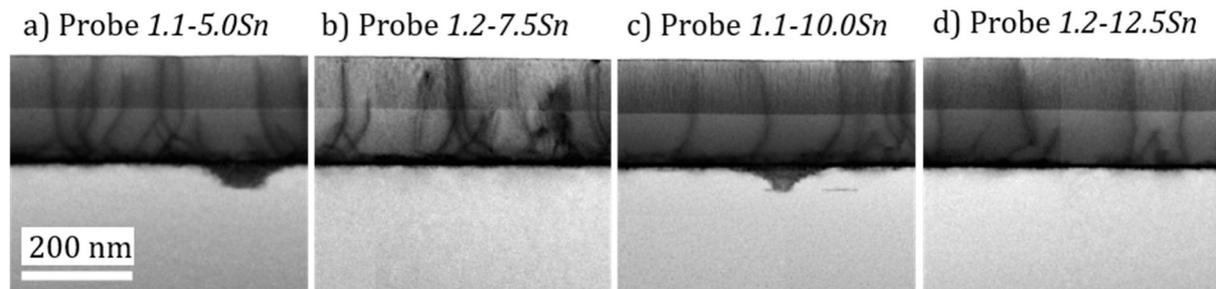


Abb. 3-22: Übersicht der TEM-Aufnahmen der Proben *1.1-5.0Sn*, *1.2-7.5Sn*, *1.1-10.0Sn* und *1.2-12.5Sn*.

Interessanterweise treten die Trapez-förmigen Strukturen nur bei der Probenteilserie *1.1* und nicht bei der Probenteilserie *1.2* auf. Beide Probenteilserien haben allerdings die hohe Durchstoßversetzungsdichte gemein. Zur Abschätzung der Durchstoßversetzungsdichte wurde die Anzahl der in der Aufnahme sichtbaren Durchstoßversetzungen in eine Dichte umgerechnet. Es ergibt sich dadurch eine  $N_{\text{TDD}} \approx 1 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ .

Abschließend zeigten die ersten Untersuchungen zur Epitaxie von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ , dass es mit dem am Institut verwendeten A-MBE-System, insbesondere mit dem für Si verwendeten Elektronenstrahlverdampfer, möglich ist  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Legierungen herzustellen. Die Monokristallinität wurde dabei mittels XRD überprüft. Die nachfolgende RBS-Analyse zeigte, dass die tatsächliche Zusammensetzung bis zu einer Abweichung von  $\Delta c = \pm 1 \%$  genau erfüllt werden kann. Die Fluktuationen des Si-Flusses von Probe zu Probe führt allerdings zu einer Variation der Gitteranpassung und somit zu einer unvermeidlichen Gitterfehlanspassung. Durch die dadurch schwankende Zusammensetzung ergibt sich wiederum ein stets unterschiedlicher Verspannungszustand der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht. Dies hat wiederum Auswirkungen auf die elektro-optischen Eigenschaften des Materials, welche für die spätere Anwendung entscheidend sind. Es gilt daher in dieser Arbeit die Kalibrierung und Regelung der Molekularstrahlflüsse zu

präzisieren, um eine genauere Erfüllung der angestrebten Gitteranpassung und eine noch genauere Einhaltung der angestrebten Zusammensetzung zu erreichen.

Eine weitere wichtige Erkenntnis der Voruntersuchungen, welche auch alle anderen Arbeiten am IHT beeinflusst, ist die hohe Durchstoßversetzungsdichte an der Grenzfläche des Ge-VS. Da diese Durchstoßversetzungen das Verhalten eines elektronischen Bauelements nachteilig beeinflussen ist es essenziell notwendig das Ge-VS zu verbessern, um die Anwendung von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Heterostrukturen zu ermöglichen. Aus diesem Grund wurden im Rahmen dieser Arbeit verschiedene Konzepte und Ansätze untersucht, um die Durchstoßversetzungsdichte zu reduzieren.

### 3.5. Post-Epitaktische Temperaturstabilität von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$

Die letzte Voruntersuchung befasst sich mit der post-epitaktischen Temperaturstabilität von auf Ge gitterangepasstem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ . Außerdem werden dabei die Effekte, die zum Zusammenbruch des Legierungshalbleiters führen, näher betrachtet. Die Ergebnisse dienen als Grundlage zur Optimierung der Substrattemperatur der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxie.

Zu diesem Zweck wurden an einigen Proben der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserie 1 hochtemperaturabhängige XRD-Analysen (HT-XRD) durchgeführt. Eine Übersicht der verwendeten Proben und deren Zusammensetzungen ist in Tab. 3-4 zusammengefasst.

Probe	$c_{\text{Si}}$ (%)	$c_{\text{Ge}}$ (%)	$c_{\text{Sn}}$ (%)
<b>1.1-5.0Sn</b>	18,4	76,7	5,0
<b>1.2-7.5Sn</b>	27,5	65,0	7,5
<b>1.1-10.0Sn</b>	36,7	53,3	10,0
<b>1.1-12.5Sn</b>	45,9	41,6	12,5

Tab. 3-4: Übersicht der für die HT-XRD-Analyse verwendeten Proben und deren  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht-Zusammensetzungen der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserie 1.

Diese Analysen wurden im Rahmen einer Kooperation von Dr. Peter Zaumseil am Leibniz-Institut für innovative Mikroelektronik (IHP GmbH) in Frankfurt (Oder) durchgeführt. Das dafür verwendete XRD-System vom Typ *Rigaku Smartlab* verfügt über einen heizbaren Probenhalter mit einer gasdichten Haube. Um Oberflächenreaktionen vorzubeugen, wird der Probenraum (Probenhalter mit Haube) während des gesamten Heizvorgangs mit Stickstoff gespült.

#### 3.5.1. Variation der Proben temperatur

Im Rahmen eines vollständigen Temperaturmesszyklus wurde die Proben temperatur von  $T_S = \text{RT}$  auf bis zu  $T_S \approx 700 \text{ °C}$  in Schritten von  $10 \text{ K} \leq \Delta T \leq 30 \text{ K}$  erhöht. Bei jedem Temperaturschritt wurde ein  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum des Si zugehörigen Reflexes bei  $2\theta = 69^\circ$  und des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  bzw. Ge zugehörigen Reflexes bei  $2\theta = 66^\circ$  aufgezeichnet. Nach dem Abkühlen der Probe auf Raumtemperatur erfolgt eine letzte vollständige Aufnahme eines  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrums zum Vergleich mit dem Zustand der unbehandelten Probe.

Im Folgenden wird jede Probe einzeln betrachtet, da diese ein unterschiedliches Verhalten beim Legierungszusammenbruch zeigen. Da jede Messung bei einem Temperaturschritt etwa 20 Minuten dauert handelt es sich hierbei um ein sehr aufwändiges Messverfahren.

❖ *Ergebnisse des Temperaturmesszyklus der HT-XRD-Analyse der Probe 1.1-5.0Sn*

Ein vollständiger Messzyklus der HT-XRD-Analyse der Probe 1.1-5.0Sn umfasst einen Temperaturbereich von  $30\text{ °C} \leq T_S \leq 680\text{ °C}$ . Zunächst ist in Abb. 3-23 der Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren bei  $T_S = 30\text{ °C}$  vor und nach eines vollständigen Messzyklus dargestellt.

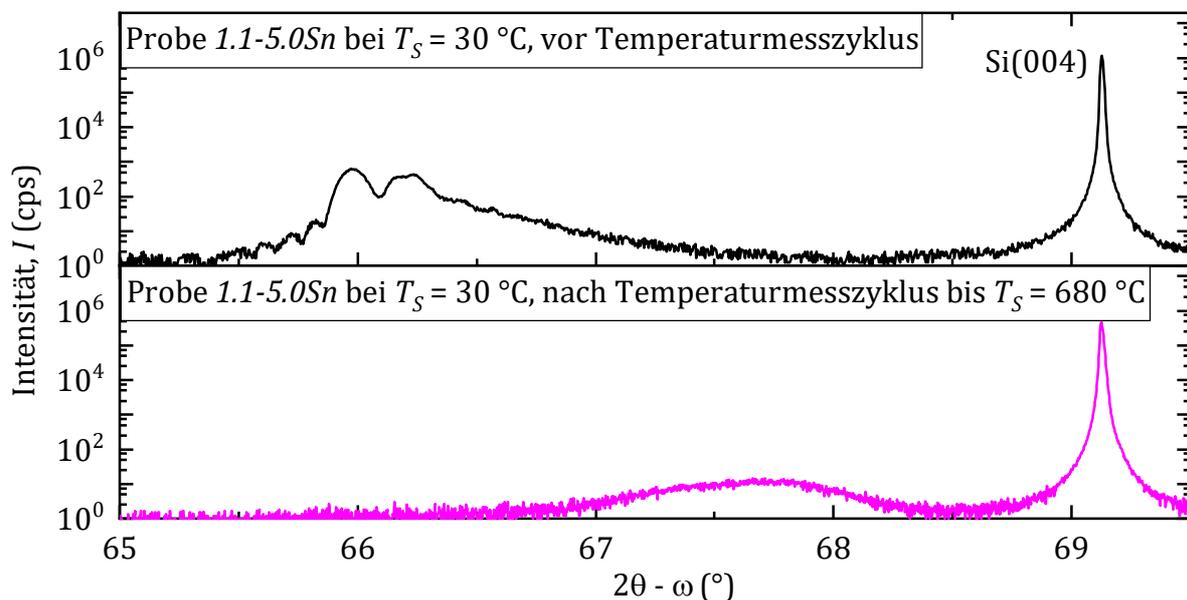


Abb. 3-23: Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probe 1.1-5.0Sn bei  $T_S = 30\text{ °C}$ , vor dem vollständigen Temperaturmesszyklus (schwarz) und nach dem vollständigen Temperaturmesszyklus bis  $T_S = 680\text{ °C}$  (pink).

Es ist deutlich zu erkennen, dass der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörige Reflex bei  $2\theta \approx 66\text{ °}$  nach dem Temperaturmesszyklus verschwunden ist. Stattdessen bildete sich ein neuer Reflex bei  $2\theta \approx 67,7\text{ °}$  aus, welcher somit näher zum Si zugehörigen Reflex verschoben ist. Dies deutet darauf hin, dass das Sn aus der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Schicht vollständig ausgegriert ist. Bemerkenswert ist außerdem, dass der Ge-VS zugehörige Reflex bei  $2\theta \approx 66,2\text{ °}$  ebenfalls verschwunden ist. Die verbleibende  $\text{Si}_{1-w}\text{Ge}_w$  Schicht interdiffundiert demzufolge mit dem Ge des Ge-VS zu einer resultierenden  $\text{Si}_{1-w}\text{Ge}_w$ -Schicht.

Das  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum bei  $T_S = 30\text{ °C}$  des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes vor Beginn des Temperaturmesszyklus wird zur weiteren Auswertung in einzelne Gaußprofile zerlegt

(siehe Abb. 3-24), welchen dem Schichtaufbau entsprechend den einzelnen Schichten zugeordnet werden. Die Zerlegung und Zuordnung wird anschließend für jedes im Rahmen des Temperaturmesszyklus gemessene  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum durchgeführt.

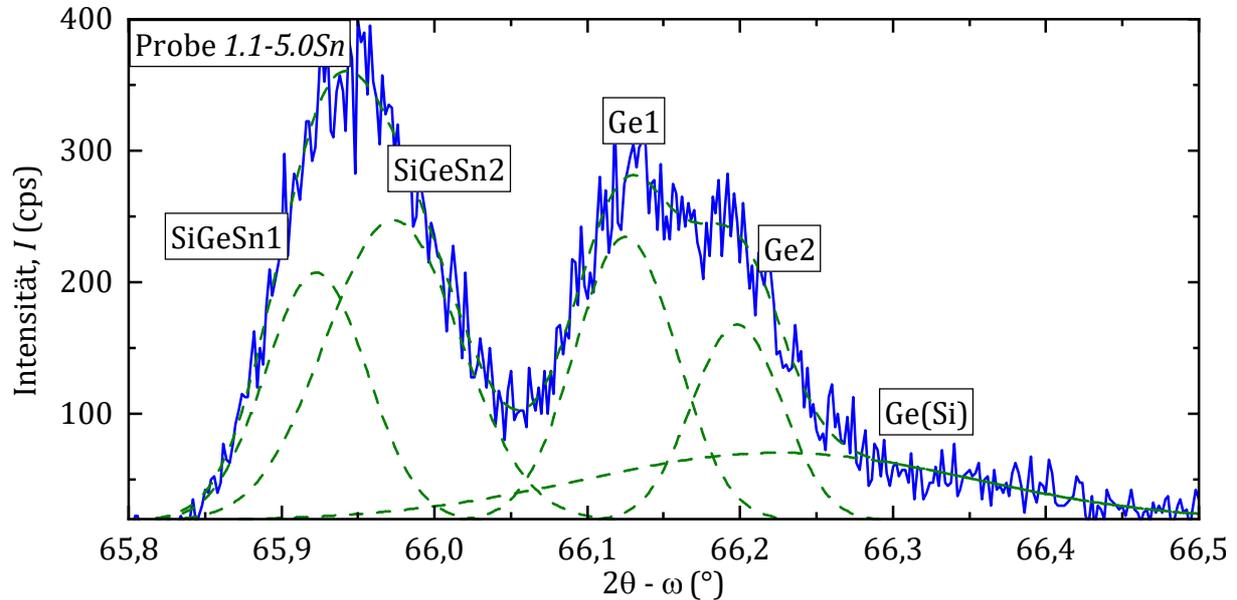


Abb. 3-24: Zerlegung des  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrums des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes der Probe 1.1-5.0Sn in einzelne Gaußprofile.

Aus der Position der Maxima der Gaußprofile wird mittels Gleichung (2-3) die vertikale Gitterkonstante  $a_{\perp}$  extrahiert. Die vertikale Gitterkonstante  $a_{\perp}$  und die Intensität  $I$  der Profile sind in Abhängigkeit der Temperatur in Abb. 3-25 dargestellt.

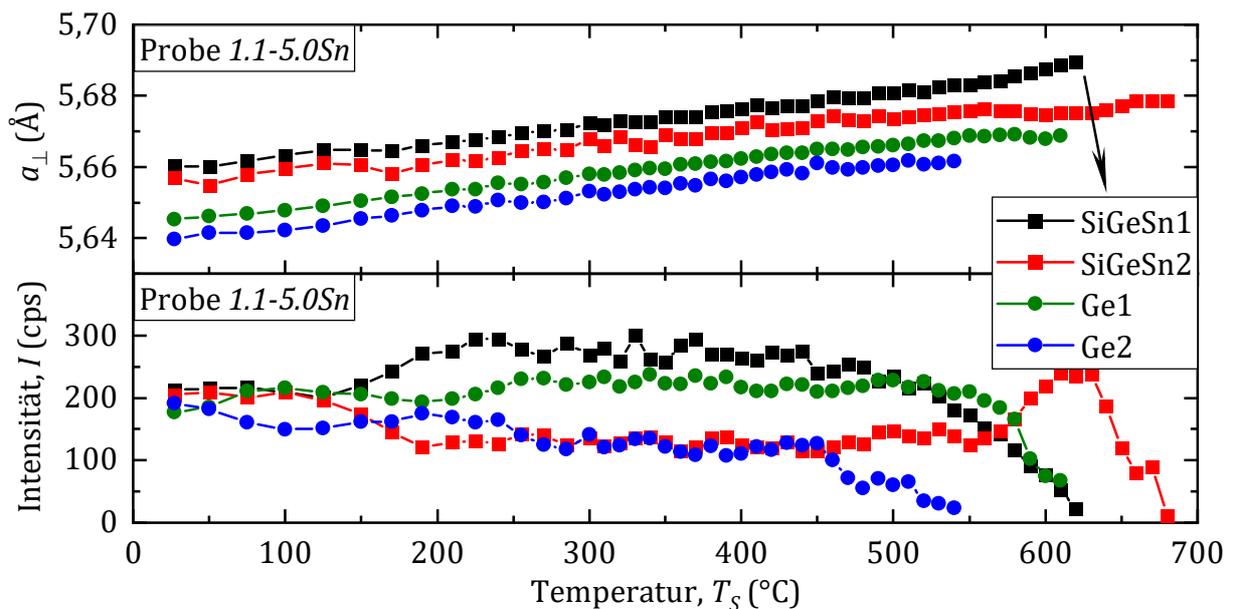


Abb. 3-25: Verlauf der vertikalen Gitterkonstante  $a_{\perp}$  und Intensität  $I$  der Probe 1.1-5.0Sn in Abhängigkeit der Temperatur über einen vollständigen Temperaturmesszyklus hinweg.

Es zeigt sich bis zu einer Temperatur von ungefähr  $T_S \approx 600 \text{ °C}$  eine lineare Vergrößerung der vertikalen Gitterkonstante  $a_{\perp}$ , welche auf die Ausdehnung des Kristalls durch die Temperaturerhöhung zurückzuführen ist. Ab dieser Grenze sinkt die Intensität der Gaußprofile schlagartig und der  $\text{Si}_{1-w}\text{Ge}_w$  zugehörige Reflex im  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum erscheint. Dies beweist den plötzlichen Zusammenbruch der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht durch die Sn-Segregation.

❖ *Ergebnisse des Temperaturmesszyklus der HT-XRD-Analyse der Probe 1.2-7.5Sn*

Der vollständige Temperaturmesszyklus der HT-XRD-Analyse der Probe 1.2-7.5Sn umfasst einen Temperaturbereich von  $30 \text{ °C} \leq T_S \leq 650 \text{ °C}$ . Zunächst wird wieder der Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren vor und nach dem vollständigen Temperaturmesszyklus in Abb. 3-26 betrachtet.

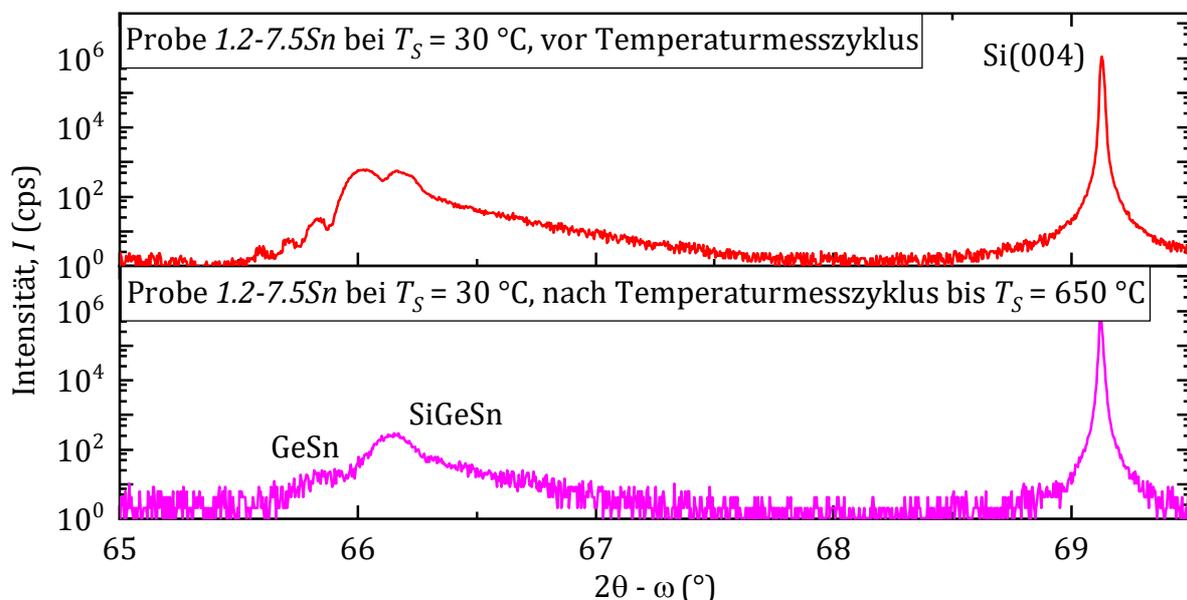


Abb. 3-26: Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probe 1.2-7.5Sn bei  $T_S = 30 \text{ °C}$ , vor dem vollständigen Temperaturmesszyklus (rot) und nach dem vollständigen Temperaturmesszyklus bis  $T_S = 650 \text{ °C}$  (pink)

Während die  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht der Probe 1.1-5.0Sn komplett zusammenbricht zeigt sich bei Probe 1.2-7.5Sn nur eine leichte Intensitätsabnahme des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -zugehörigen Reflexes. Der Reflex von Ge und  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  vereinen sich zu einem gemeinsamen Reflex bei  $2\theta = 66,15 \text{ °}$ . Zusätzlich entsteht ein neuer Reflex bei  $2\theta = 65,85 \text{ °}$ . Die einzelnen Spektren des Messzyklus wurden auch hier in Gaußprofile zerlegt (siehe Abb. 3-27) und den einzelnen Schichtbestandteilen zugeordnet. Bei der Zerlegung eines Reflexes in mehrere Gaußprofile werden diese durchnummeriert.

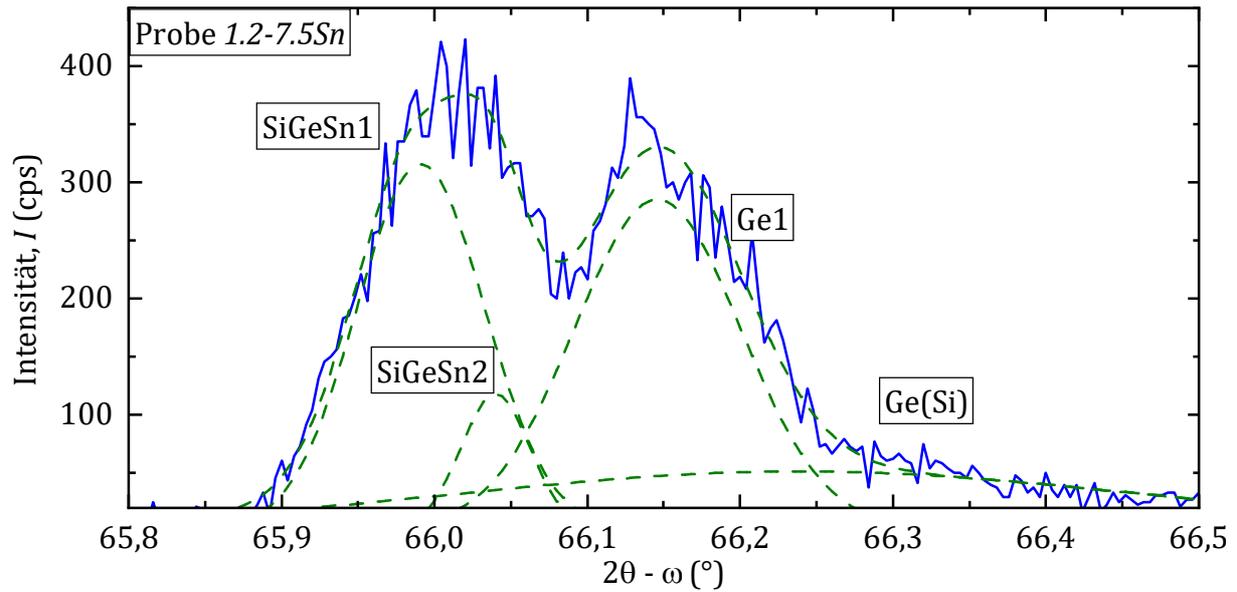


Abb. 3-27: Zerlegung des  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrums des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes der Probe 1.2-7.5Sn in einzelne Gaußprofile.

Der temperaturabhängige Verlauf der vertikalen Gitterkonstante  $a_{\perp}$  und Intensität der Profile ist in Abb. 3-28 dargestellt. Es ist erkennbar, dass die Intensität der Gaußprofile *SiGeSn1* und *Ge* ab  $T_S \approx 450$  °C deutlich abnimmt.

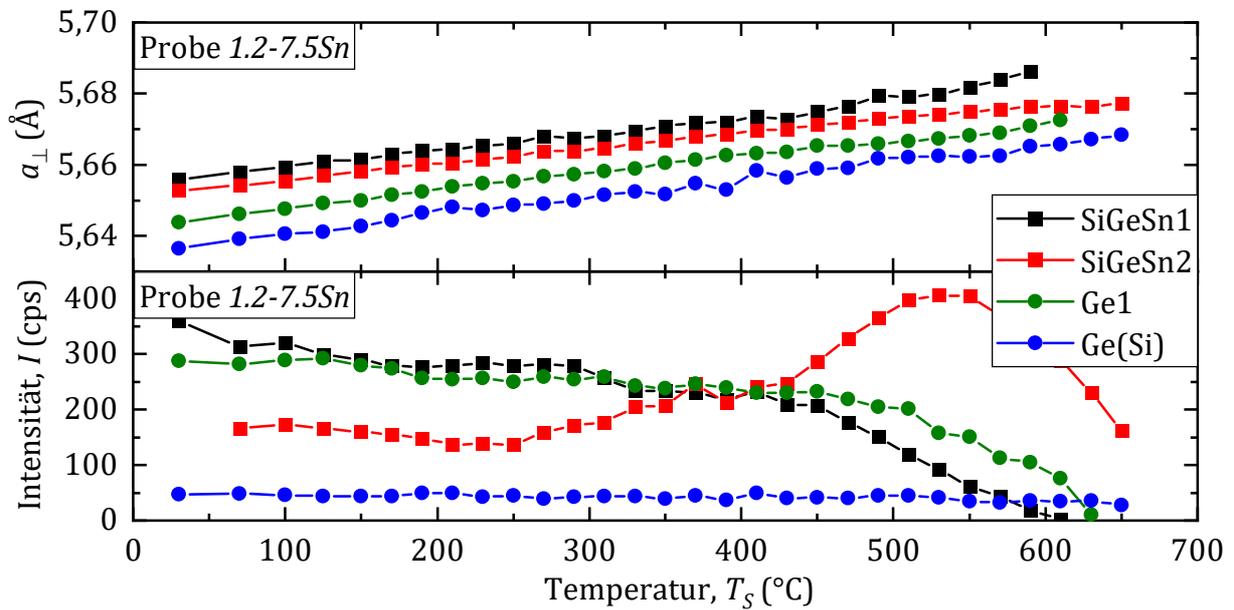


Abb. 3-28: Verlauf der vertikalen Gitterkonstante  $a_{\perp}$  und Intensität  $I$  der Probe 1.2-7.5Sn in Abhängigkeit der Temperatur über einen vollständigen Temperaturmesszyklus hinweg.

Es kommt augenscheinlich zu einer Separation der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Schicht in eine Phase mit einer geringeren Sn-Konzentration (Reflex *SiGeSn* in Abb. 3-26) und in eine Phase mit

höherer Sn-Konzentration (Reflex  $\text{GeSn}$  in Abb. 3-26). Während die Intensität des Gaußprofils  $\text{SiGeSn}2$  zunächst zunimmt, bricht sie ab  $T_S \approx 530 \text{ °C}$  deutlich ein.

❖ *Ergebnisse des Temperaturmesszyklus der HT-XRD-Analyse der Probe 1.1-10.0Sn*

Der Temperaturbereich des Temperaturmesszyklus der HT-XRD-Analyse der Probe 1.1-10.0Sn wurde nochmals deutlich verringert und umfasst  $30 \text{ °C} \leq T_S \leq 570 \text{ °C}$ . Der Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren vor und nach dem Messzyklus in Abb. 3-29 zeigt am deutlichsten die Separation der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Schicht in einzelne Phasen (siehe Reflexe  $\text{SiGeSn}$ ,  $\text{GeSn}$  und  $\text{SiGe}$  in Abb. 3-29).

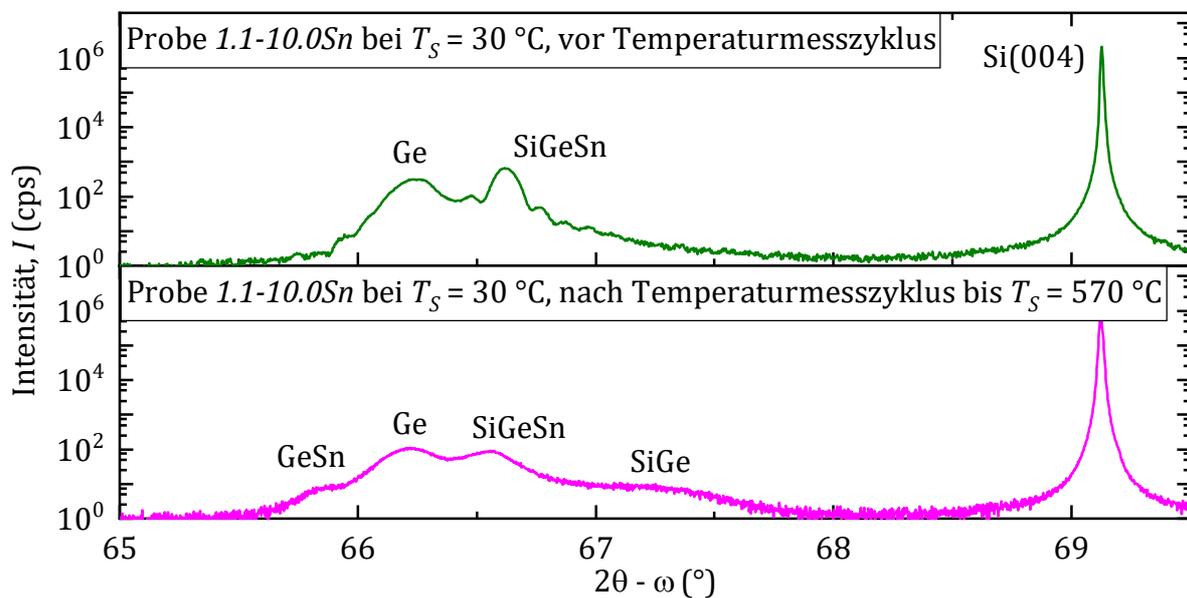


Abb. 3-29: Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probe 1.1-10.0Sn bei  $T_S = 30 \text{ °C}$ , vor dem vollständigen Temperaturmesszyklus (grün) und nach dem vollständigen Temperaturmesszyklus bis  $T_S = 570 \text{ °C}$  (pink).

Die nachfolgende Abb. 3-30 zeigt wieder eine Detailaufnahme des  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrums des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes der Probe 1.1-10.0Sn im Bereich  $65 \text{ °} \leq 2\theta \leq 69,5 \text{ °}$  und zusätzlich die Gaußprofile, in welche das  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum zerlegt wird. Dabei erfolgt ebenfalls eine Zuordnung der Gaußprofile zu den Bestandteilen des Schichtstapels.

Der Verlauf der vertikalen Gitterkonstante in Abhängigkeit der Temperatur in Abb. 3-31 zeigt erneut den typischen Verlauf durch die Ausdehnung des Kristalls. Daneben ist im Temperaturverlauf der Intensität ein deutlicher Einbruch des Gaußprofils  $\text{SiGeSn}1$  bei einer Temperatur von  $T_S \approx 400 \text{ °C}$  erkennbar. Zeitgleich erscheint der Reflex  $\text{SiGe}$  im  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum.

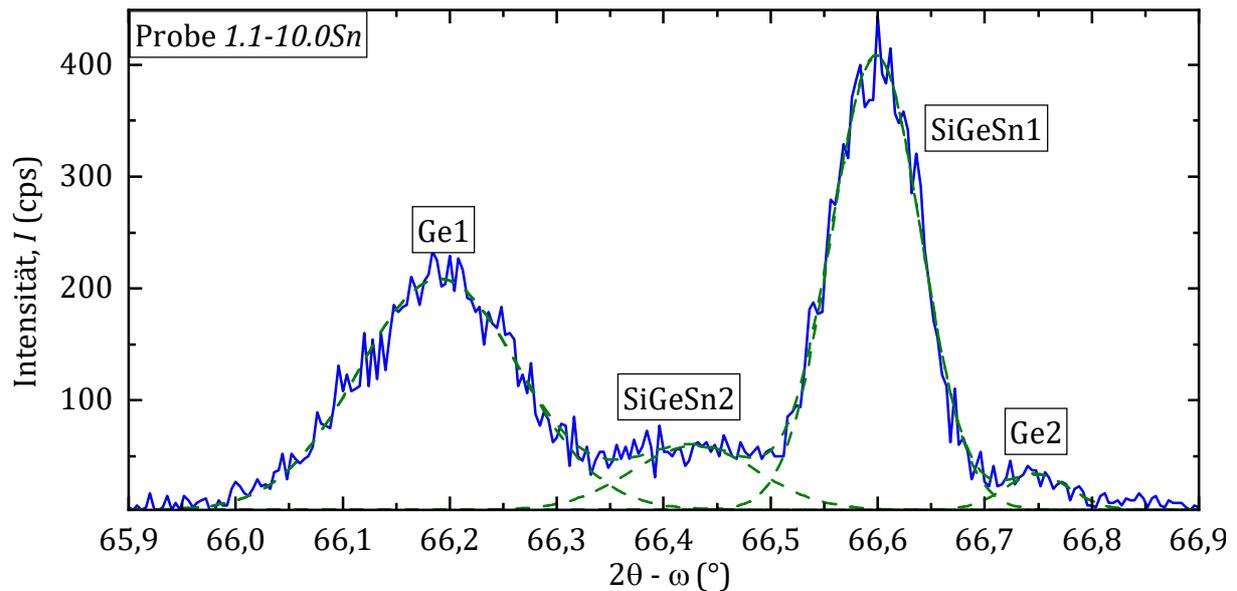


Abb. 3-30: Zerlegung des  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrums des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes der Probe 1.1-10.0Sn in einzelne Gaußprofile.

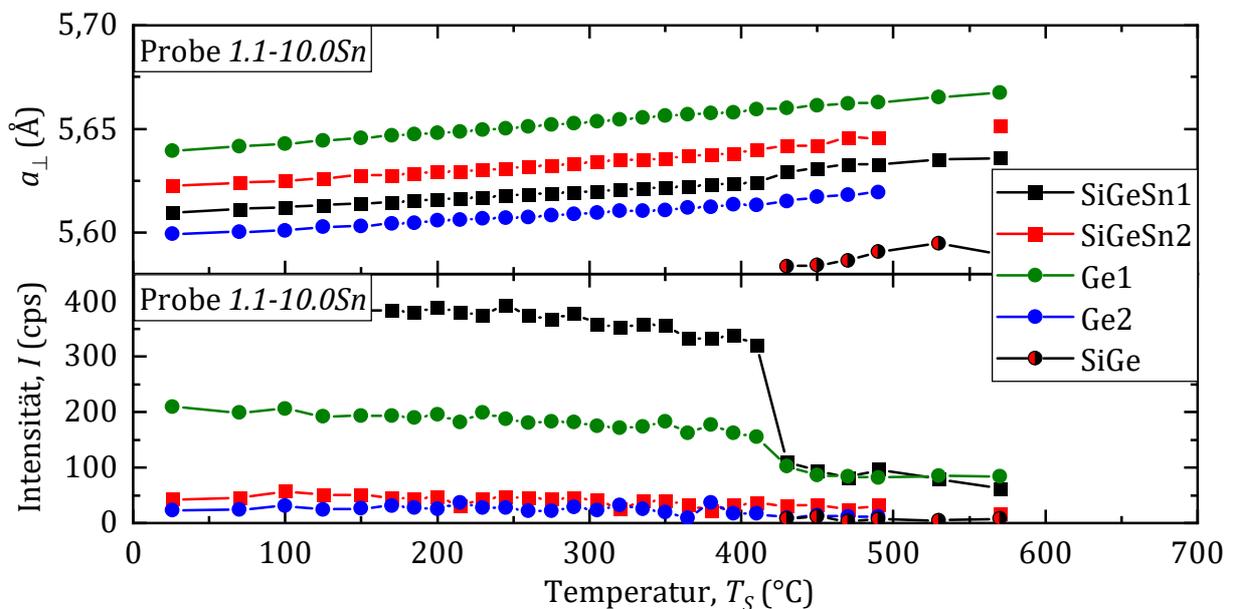


Abb. 3-31: Verlauf der vertikalen Gitterkonstante  $a_{\perp}$  und Intensität  $I$  der Probe 1.1-10.0Sn in Abhängigkeit der Temperatur über einen vollständigen Temperaturmesszyklus hinweg.

❖ *Ergebnisse des Temperaturmesszyklus der HT-XRD-Analyse der Probe 1.2-12.5Sn*

Bei Probe 1.2-12.5Sn betrug die maximale Proben­temperatur des Temperaturmesszyklus ebenfalls  $T_S = 570$  °C. Abb. 3-32 zeigt den Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren bei  $T_S = 30$  °C vor und nach dem vollständigen Temperaturmesszyklus. Hierbei ist ebenfalls eine Separation der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht in die einzelnen Phasen  $\text{GeSn}$  und  $\text{SiGe}$  zu beobachten.

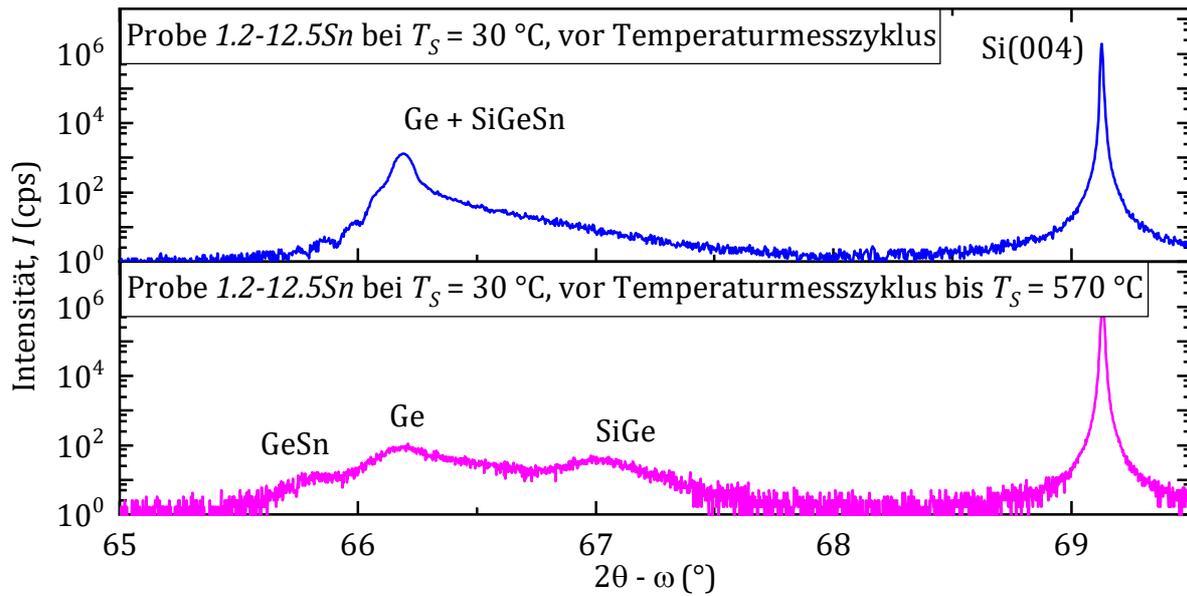


Abb. 3-32: Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probe 1.2-12.5Sn bei  $T_S = 30^\circ\text{C}$ , vor dem vollständigen Temperaturmesszyklus (blau) und nach dem vollständigen Temperaturmesszyklus bis  $T_S = 570^\circ\text{C}$  (pink).

Aufgrund der deutlich besseren Gitteranpassung dieser Probe kommt es im ursprünglichen  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum zu einer Überlagerung zwischen dem Ge und dem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflex. Die Zerlegung des  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrums in einzelne Gaußprofile in Abb. 3-33 unterscheidet sich daher leicht zu den vorherigen Proben.

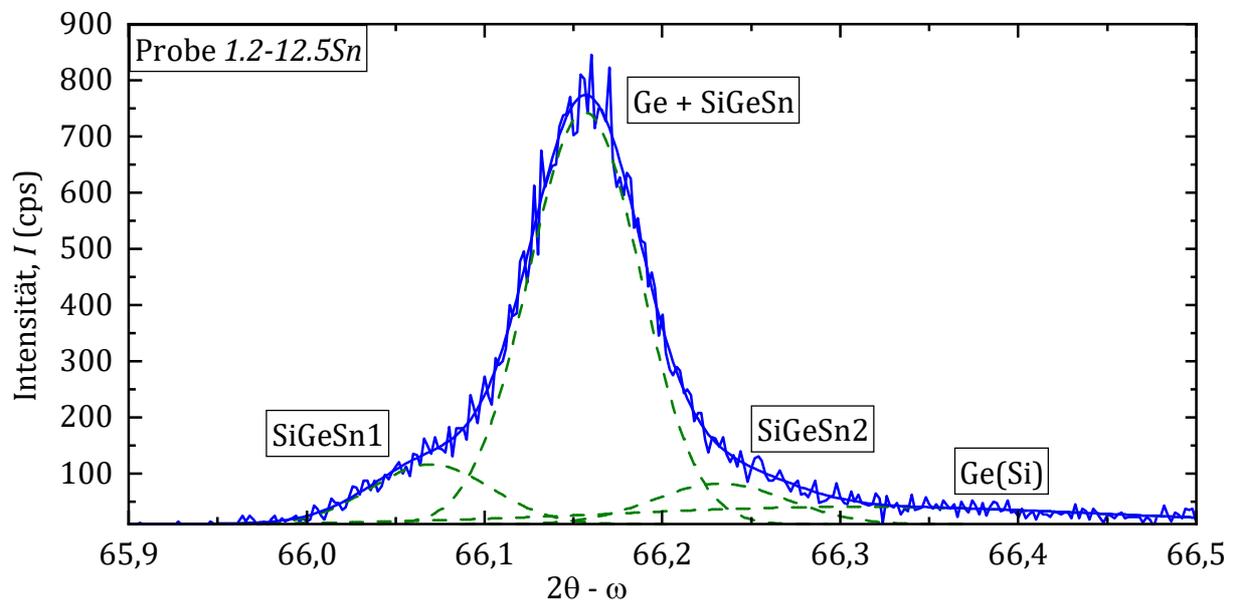


Abb. 3-33: Zerlegung des  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrums des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes der Probe 1.2-12.5Sn in einzelne Gaußprofile.

Der temperaturabhängige Verlauf der Gitterkonstante  $a_{\perp}$  und der Intensität  $I$  in Abb. 3-34 zeigt einen plötzlichen Einbruch der Intensität des Gaußprofils  $Ge+SiGeSn$  bei  $T_S = 350^\circ\text{C}$ .

Bei dieser Temperatur erscheinen außerdem die zusätzlichen Reflexe  $\text{GeSn}$  und  $\text{SiGe}$  im  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum. Im Gegensatz zur Probe  $1.1-5.0\text{Sn}$  verschwindet der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörige Reflex im  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum nicht völlig.

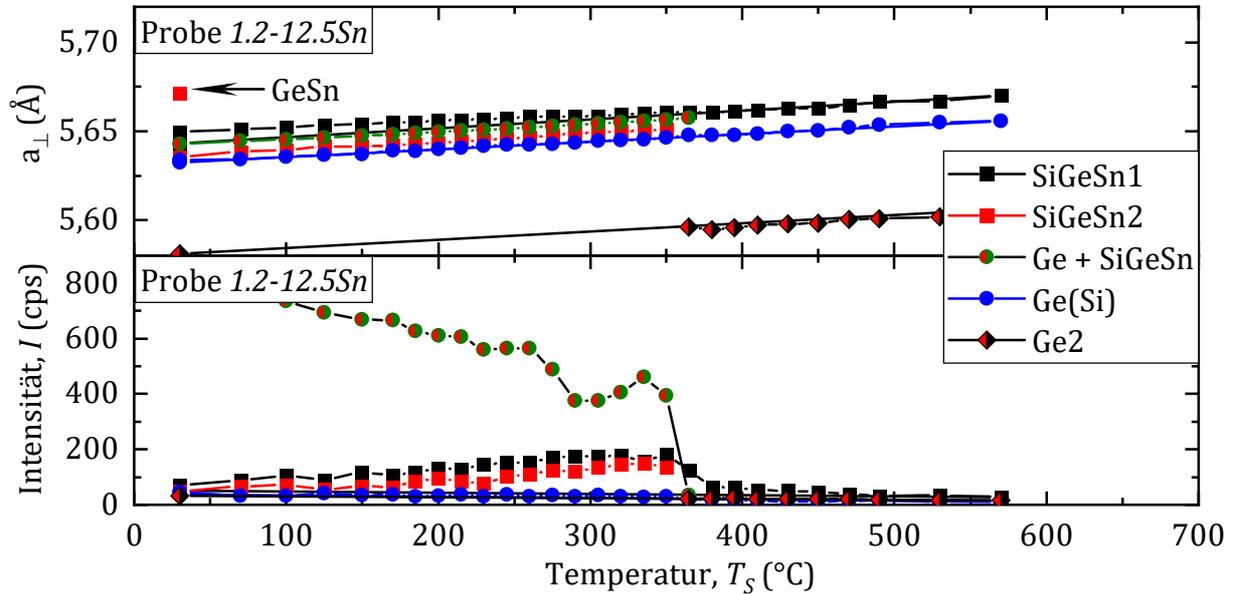


Abb. 3-34: Verlauf der vertikalen Gitterkonstante  $a_{\perp}$  und Intensität  $I$  der Probe  $1.2-12.5\text{Sn}$  in Abhängigkeit der Temperatur über einen vollständigen Temperaturmesszyklus hinweg.

#### ❖ Zusammenfassung der Ergebnisse des Temperaturmesszyklus der HT-XRD-Analyse

Die temperaturabhängigen XRD-Analysen der Proben beweist die Separation der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht in einzelne Phasen mit höherer als auch niedrigerer Sn-Konzentration. Die Phasenseparation zeigt sich am deutlichsten durch einen Einbruch der Intensität des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes im  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum. Außerdem zeigen sich ab einer kritischen Temperatur zusätzliche Reflexe, welche sich den separierten Phasen zuordnen lassen. Am deutlichsten wird der Sachverhalt im temperaturabhängigen Verlauf der Gitterkonstante (Position des Reflexes) und der Intensität des Reflexes. Die Ergebnisse der Untersuchung verdeutlichen, dass die Grenztemperatur  $T_{\text{krit}}$ , ab der die Phasenseparation einsetzt, mit zunehmender Sn-Konzentration deutlich abnimmt.

#### 3.5.2. Isotherme HT-XRD Analyse zur Untersuchung der Langzeitstabilität

Im nächsten Schritt wurde die Langzeittemperaturstabilität der Proben  $1.1-5.0\text{Sn}$ ,  $1.2-7.5\text{Sn}$  und  $1.2-12.5\text{Sn}$  im Rahmen einer Isothermen Langzeit-HT-XRD-Analyse

untersucht. Unglücklicherweise wurde die Probe *1.1-10.0Sn* bei der weiteren Probenpräparation zerstört, weshalb sie nicht Teil dieser Untersuchung ist.

Die Proben *1.1-5.0Sn* und *1.2-7.5Sn* wurden hierzu auf eine Haltetemperatur aufgeheizt und für mehrere Stunden auf der Temperatur gehalten. Zur Untersuchung der Stabilität wurde in regelmäßigen Abständen ein  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes aufgezeichnet. Die Haltetemperatur wurde dabei so gewählt, dass sie  $\Delta T = 100 \text{ K}$  unter der zuvor beobachteten Grenztemperatur zur Phasenseparation liegt. Abb. 3-35 vergleicht daneben den zeitabhängigen Intensitätsverlauf des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes der einzelnen Proben. Zur besseren Vergleichbarkeit wurde die jeweilige Intensität normiert. Es wird deutlich, dass es bei diesen Temperaturen auch über einen längeren Zeitraum nicht zur Phasenseparation der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht kommt.

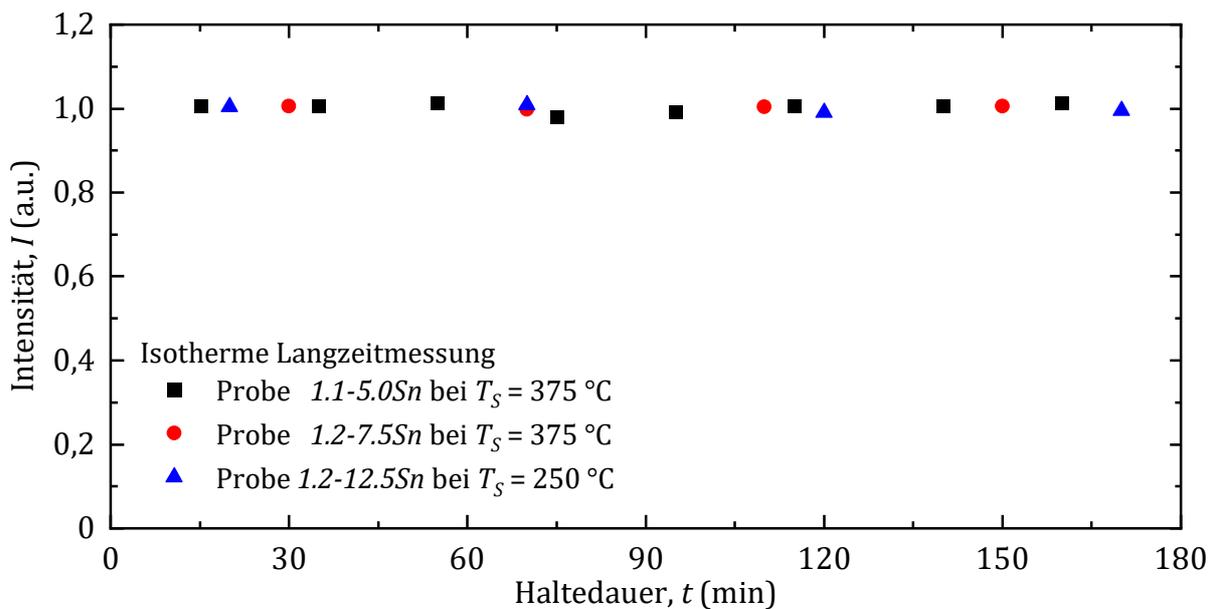


Abb. 3-35: Verlauf der Intensität des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes der Proben *1.1-5.0Sn*, *1.2-7.5Sn* und *1.2-12.5Sn* über der Haltdauer  $t$  bei verschiedenen Tempertemperaturen  $T_S$ .

Anschließend wurde die Haltetemperatur für Probe *1.2-7.5Sn* schrittweise auf  $T_S = 480 \text{ °C}$  nahe der Grenztemperatur für Phasenseparation erhöht. Hierbei kommt es, wie in Abb. 3-36 dargestellt, zu einem stetigen Abfall der Intensität des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes, was auf eine reduzierte Langzeitstabilität bei höheren Temperaturen und eine schleichende Phasenseparation hinweist.

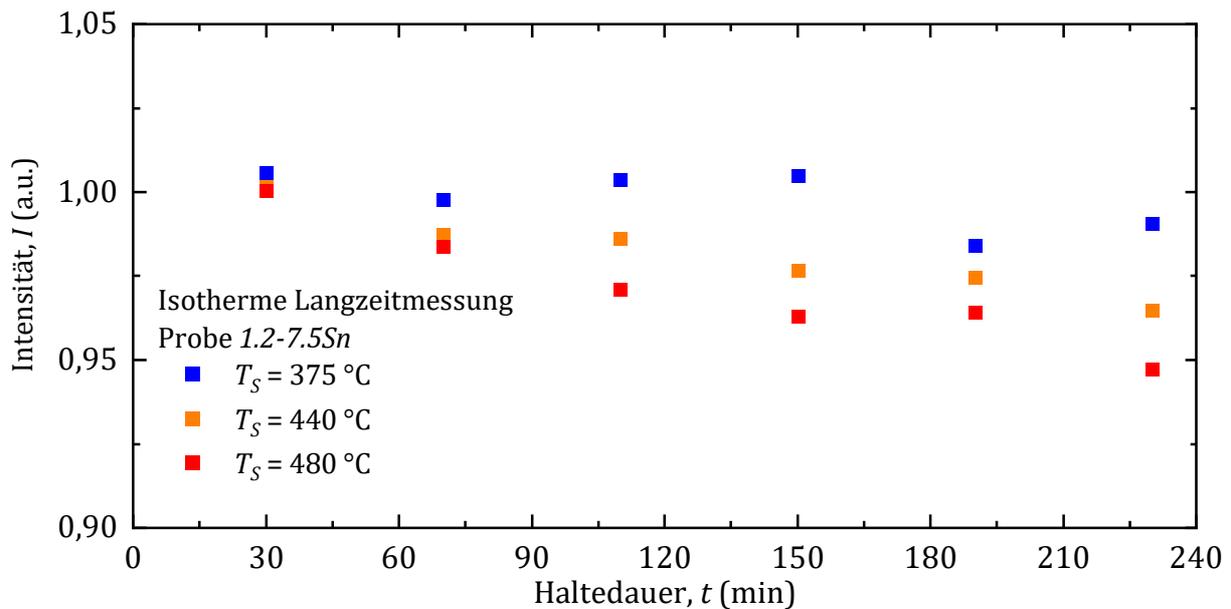


Abb. 3-36: Verlauf der Intensität des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes der Probe 1.2-7.5Sn über der Haltedauer  $t$  bei verschiedenen Temperaturen  $T_S$ .

Zuletzt wurde die Probe 1.2-12.5Sn ebenfalls nahe der Grenztemperatur für Phasenseparation, bei  $T_S = 320\text{ °C}$ , weiter untersucht. Der zeitabhängige Verlauf der Intensität des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes ist in Abb. 3-37 dargestellt. Während es bei Probe 1.2-7.5Sn zu einer schleichenden Phasenseparation der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht kommt, setzt diese bei Probe 1.2-12.5Sn bei einer Haltedauer von  $t = 180\text{ min}$  schlagartig ein und ist nach weiteren  $t = 120\text{ min}$  abgeschlossen.

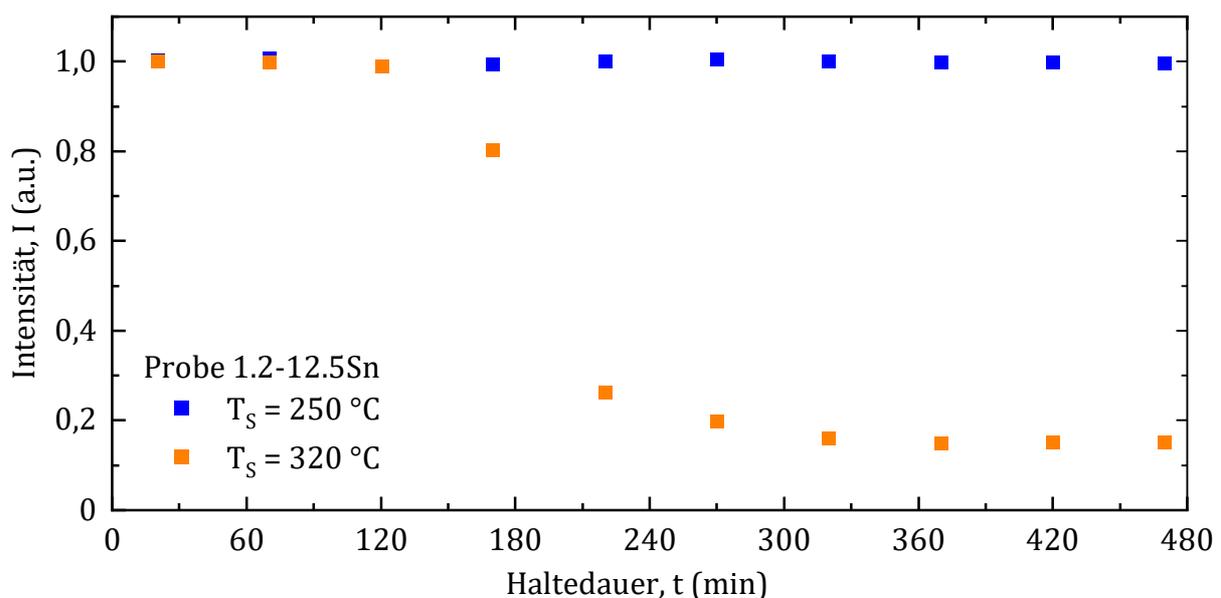


Abb. 3-37: Verlauf der Intensität des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes der Probe 1.2-12.5Sn über der Haltedauer  $t$  bei verschiedenen Temperaturen  $T_S$ .

Die Untersuchung der Langzeitstabilität zeigt, dass die Phasenseparation von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  hauptsächlich ab einer bestimmten Grenztemperatur  $T_{krit}$  einsetzt und nicht durch langandauernde thermische Belastung induziert ist. Da alle Proben bei einer Temperatur von  $T_S = 250 \text{ °C}$  eine große Langzeitstabilität aufweisen gilt diese Temperatur als maximale Prozesstemperatur für alle in dieser Arbeit durchgeführten Bauteilprozessierungen.

### 3.6. Zusammenfassung der Voruntersuchungen

Abschließend zeigten die ersten Untersuchungen zur Epitaxie von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ , dass es mit dem am Institut verwendeten MBE-System, insbesondere mit dem für Si verwendeten Elektronenstrahlverdampfer, möglich ist  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Legierungen gitterangepasst auf Ge herzustellen. Die Monokristallinität wurde dabei mittels XRD überprüft. Die Ergebnisse der XRD-Analyse zeigten allerdings auch, dass die Gitteranpassung von Probe zu Probe stark variiert, was zu einer residualen Verspannung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht führt. Dies hat sowohl Auswirkungen auf die Gitteranpassung als auch die elektro-optischen Eigenschaften des Materials, welche für die spätere Anwendung entscheidend sind.

Die nachfolgende RBS-Analyse zeigte dennoch, dass die tatsächliche Zusammensetzung nur bis zu 1 % von der angestrebten Zusammensetzung abweicht. Dennoch ist Ziel dieser Arbeit die Kalibrierung und Regelung der Zellenflüsse weiter zu präzisieren, um eine möglichst genaue Einhaltung der angestrebten Zusammensetzungen zu erreichen. Die Verschiebung der Gitterfehlpassung von Probe zu Probe ist ebenfalls ein Indikator dafür, dass die Kalibrierung und vor allem die Reproduzierbarkeit des Si und Sn-Flusses deutlich verbessert werden muss.

Eine weitere wichtige Erkenntnis der Voruntersuchungen, welche auch alle anderen Arbeiten am IHT beeinflusst, ist die hohe Durchstoßversetzungsdichte an der Grenzfläche des Ge-VS. Da diese Durchstoßversetzungen das Verhalten eines Halbleiter-Bauelements nachteilig beeinflussen, ist es essenziell notwendig das Ge-VS zu verbessern, um die Anwendung von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Heterostrukturen zu ermöglichen. Aus diesem Grund wurden im Rahmen dieser Arbeit verschiedene Konzepte getestet, um die Durchstoßversetzungsdichte zu reduzieren.

Der Vergleich mit anderen Forschungsgruppen hebt das Alleinstellungsmerkmal des IHTs hervor. Im Vergleich zur CVD basierten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Forschung ist es mittels MBE am IHT möglich auf Ge gitterangepasste  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Heterostrukturen herzustellen. Darüber hinaus erlaubt die am IHT verfügbare CMOS kompatible Technologie die Herstellung von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Heterobauelementen zur elektrischen Charakterisierung des Materialsystems, während sich die meisten anderen Arbeiten auf die Materialanalyse oder die optische Materialcharakterisierung spezialisiert haben.

Aufgrund der vorliegenden Schwierigkeiten steht die elektrische Charakterisierung des Materialsystems von auf Ge gitterangepasstem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  daher noch am Anfang und wird ein Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit.

Die erfolgten Vorbetrachtungen der dynamischen Änderungen der Substrattemperatur auf der Oberfläche mithilfe der MIR-Kamera heben die Notwendigkeit der präzisen Messung und Regelung der Substrattemperatur bei der Niedertemperatur-MBE bei  $T_S < 300\text{ °C}$  hervor. Die dazugehörigen Experimente zur  $\text{Ge}_{0,92}\text{Sn}_{0,08}$ -Epitaxie verdeutlichen dabei die Temperaturempfindlichkeit der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Epitaxie. Die vorliegende Arbeit beleuchtet daher die folgenden Ansätze zur Verbesserung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Epitaxie und zur Charakterisierung des Materialsystems:

- Verbesserung der Kalibrierung der Molekularstrahlflüsse der Legierungsbestandteile Si, Ge und Sn zur höheren Reproduzierbarkeit der Bedingung zur Gitteranpassung auf Ge
- Ermöglichung der präzisen Messung und Regelung der tatsächlichen Substrattemperatur auf der Oberfläche
- Optimierung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Epitaxieparameter zur Verbesserung der Kristallqualität
- Herstellung von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Bauelementen zur elektrischen Charakterisierung des Materialsystems

#### 4. Charakterisierung und Anpassung des MBE-Systems

*Dieses Kapitel befasst sich mit der Charakterisierung des vorhandenen MBE-Systems als Grundlage zur Verbesserung der Gitteranpassung auf Ge. Des Weiteren wird eine Anpassung des MBE-Systems durch ein MIR-Pyrometer vorgenommen, um Messung und Regelung der Substrattemperatur zu verbessern. Dies bildet die Grundlage für die anschließende Optimierung der Epitaxie von auf Ge gitterangepasstem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ . Die vorgestellten Anpassungen basieren auf den Erkenntnissen der in Kapitel 3 besprochenen Voruntersuchungen.*

##### 4.1. Bedingungen für das gitterangepasste Wachstum von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$

Zunächst wird die Bedingung für das gitterangepasste Wachstum von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  und die technologischen Grenzen des verwendeten A-MBE-Systems betrachtet. Die Gitterkonstante eines Legierungshalbleiters wie  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$   $a_{0,\text{SiGeSn}}$  folgt in erster Näherung einer linearen Interpolation zwischen den Gitterkonstanten  $a_{0,i}$  der Legierungsbestandteile bezogen auf deren prozentuale Legierungsanteile  $c_i$ . Dieser, auch als Vegard'sches Gesetz bekannter, Sachverhalt ist für  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  in Gleichung (4-1) dargestellt.

$$a_{0,\text{SiGeSn}} = a_{0,\text{Si}} \cdot c_{\text{Si}} + a_{0,\text{Ge}} \cdot c_{\text{Ge}} + a_{0,\text{Sn}} \cdot c_{\text{Sn}} \quad (4-1)$$

Die Bedingung für das gitterangepasste Wachstum einer Halbleiterschicht auf einem (virtuellen) Substrat ist wie folgt definiert: Die relaxierte Gitterkonstante des aufzuwachsenden Halbleiters  $A$   $a_{0,A}$  muss der lateralen Gitterkonstante des Halbleiters  $B$   $a_{\parallel,B}$  entsprechen. Dies bewirkt, dass der Halbleiter  $A$  relaxiert auf dem darunterliegenden Halbleiter  $B$  aufwächst und folglich kein Bestreben zur Relaxation besitzt.

Diese Arbeit beschränkt sich, wie bereits beschrieben, auf die Epitaxie auf virtuellen Ge-Substraten, deren parallele Gitterkonstante  $a_{\parallel,\text{Ge-VS}}$  der Gitterkonstante von Ge  $a_{0,\text{Ge}}$  entspricht. Aufgrund der in Abschnitt 3.2 beschriebenen Herstellungsweise des Ge-VS wird hier explizit zwischen der parallelen Gitterkonstante  $a_{\parallel,\text{Ge-VS}}$  und relaxierten Gitterkonstante  $a_{0,\text{Ge-VS}}$  des Ge-VS unterschieden. Aus der o.g. Bedingung folgt Gleichung (4-2) für die relaxierte Gitterkonstante von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$   $a_{0,\text{SiGeSn}}$ .

$$a_{0,\text{SiGeSn}} = a_{0,\text{Si}} \cdot c_{\text{Si}} + a_{0,\text{Ge}} \cdot c_{\text{Ge}} + a_{0,\text{Sn}} \cdot c_{\text{Sn}} \stackrel{!}{=} a_{0,\text{Ge}} \quad (4-2)$$

Durch Umformen von Gleichung (4-2) erhält man die Bedingung für ein festes Verhältnis der Konzentrationen von Si  $c_{\text{Si}}$  und Sn  $c_{\text{Sn}}$  nach Gleichung (4-3).

$$\frac{c_{\text{Si}}}{c_{\text{Sn}}} = \frac{a_{\text{Ge}} - a_{\text{Sn}}}{a_{\text{Si}} - a_{\text{Ge}}} = 3,67 \quad (4-3)$$

Die oben genannte Bedingung ist die Basis für die Wahl der Zusammensetzung aller in dieser Arbeit vorgestellten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserien. Aufgrund des dadurch fest vorgegebenen Verhältnisses der Si- und Sn-Konzentration kann aus einer gegebenen Sn-Konzentration  $c_{\text{Sn}}$  unter Anwendung von Gleichung (4-3) die vollständige Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht berechnet werden. Aus diesem Grund werden Proben lediglich mit der Sn-Konzentration referenziert.

## 4.2. Homogenität der Molekularstrahlflüsse

Die bereits angesprochene Inhomogenität der Molekularstrahlflüsse verursacht eine unvermeidliche Gitterfehlanspassung. In diesem Abschnitt wird die Verteilung der Molekularstrahlflüsse über dem Substrat anhand von Kalibrierschichten charakterisiert. Die Ergebnisse dienen anschließend zur Quantifizierung der Gitterfehlanspassung. Außerdem ermöglichen die Ergebnisse die Berechnung der Zusammensetzung in jedem Punkt des Substrats bei Kenntnis der tatsächlichen Zusammensetzung in einem bestimmten Punkt.

### 4.2.1. Homogenität der Molekularstrahlflüsse Si und Ge

Zur Untersuchung der Verteilung der Molekularstrahlflüsse Si und Ge wurde die in Abb. 4-1 dargestellte Schichtstruktur hergestellt. Sie besteht aus einer Ge-Schicht mit  $d_{\text{Ge}} = 200 \text{ nm}$  und einer darauffolgenden Si-Schicht mit  $d_{\text{Si}} = 200 \text{ nm}$ . Aufgrund der unterschiedlichen optischen Eigenschaften von Si und Ge können die tatsächlichen Schichtdicken anschließend mittels Ellipsometrie gemessen werden.

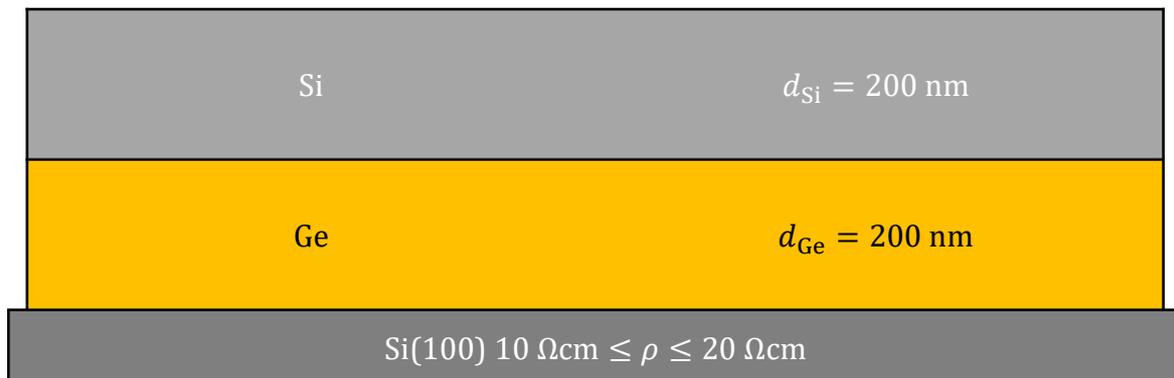


Abb. 4-1: Schichtstruktur zur Untersuchung der Verteilung der Molekularstrahlflüsse Si und Ge.

Der Epitaxieprozess startet auch hier wieder mit der in Abschnitt 3.2 beschriebenen thermischen Desorption zur Entfernung des nativen  $\text{SiO}_2$ . Da die Schicht nur zu Kalibrierzwecken dient wird hierbei auf die Abscheidung des standardgemäß verwendeten Si-Puffers verzichtet. Im Anschluss an die thermische Desorption wurde die Substrattemperatur daher auf  $T_s = 330 \text{ °C}$  abgesenkt. Nach Erreichen der angestrebten Substrattemperatur wurde eine Ge-Schicht mit  $d_{\text{Ge}} = 200 \text{ nm}$  abgeschieden. Direkt im Anschluss wurde, ebenfalls bei  $T_s = 330 \text{ °C}$ , die Si-Schicht mit  $d_{\text{Si}} = 200 \text{ nm}$  abgeschieden.

Die für Si und Ge resultierende Homogenität der Schichtdicke  $d$  über dem 4"-Substrat ist in Abb. 4-2 grafisch dargestellt. Es wird deutlich, dass die Dicke der Si-Schicht im Vergleich zur Ge-Schicht eine deutlich bessere Homogenität ausweist.

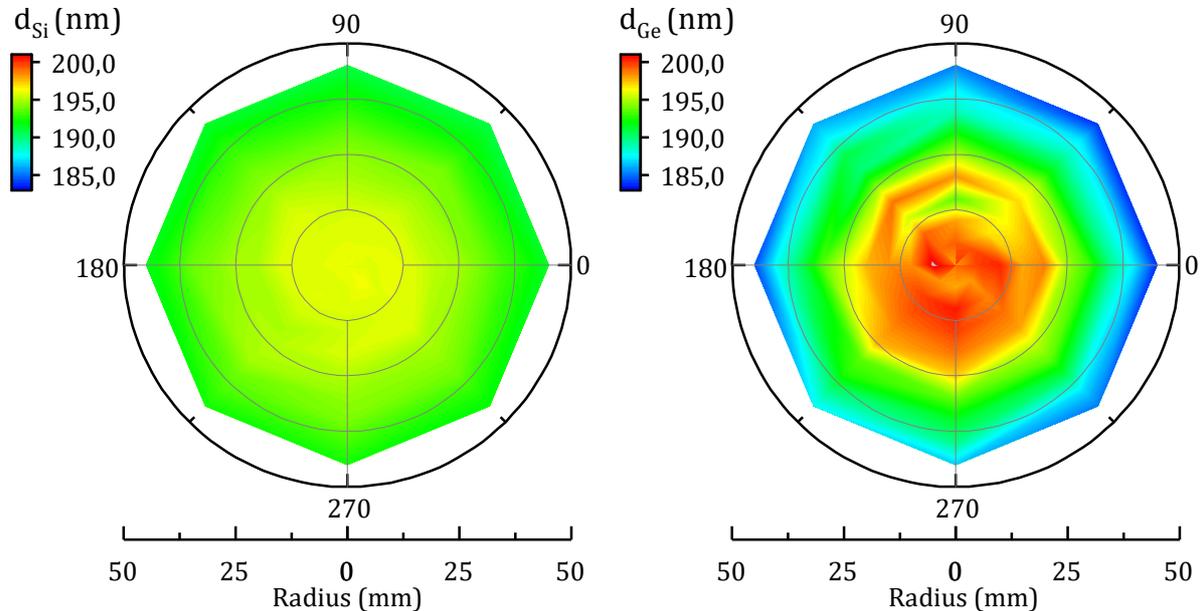


Abb. 4-2: Homogenität der Schichtdicke der hergestellten Schichtstruktur von Si (links) und Ge (rechts).

Da das Substrat während des Epitaxieprozesses rotiert, ergibt sich eine rotationssymmetrische Flussverteilung. Es wurden daher alle auf einem Umfang liegenden Messwerte gemittelt, um den Einfluss der Messungenauigkeit zu minimieren.

Unter Verwendung der Wachstumsdauer und der Volumenkonzentration von Si bzw. Ge wurde die Schichtdicke  $d$  in einen Molekularstrahlfluss  $F$  umgerechnet. In erster Näherung handelt es sich bei den Molekularstrahlquellen um Knudsen-Effusionszellen, welche H. Sitter zufolge eine Kosinus-förmige Abstrahlcharakteristik aufweisen [40]. Die Messdaten wurden daher mit einer Kosinus-Funktion interpoliert und angepasst. Die Ergebnisse werden in der nachfolgenden Zusammenfassung vorgestellt.

### 4.2.2. Homogenität des Molekularstrahlflusses Sn

Im nächsten Schritt wurde die Verteilung des Sn-Flusses untersucht. Die dafür hergestellte Schichtstruktur ist in Abb. 4-3 dargestellt. Hierbei wurde eine  $Ge_{0,94}Sn_{0,04}$ -Schicht mit  $d_{GeSn} = 100$  nm auf einem Si-Substrat aufgewachsen.

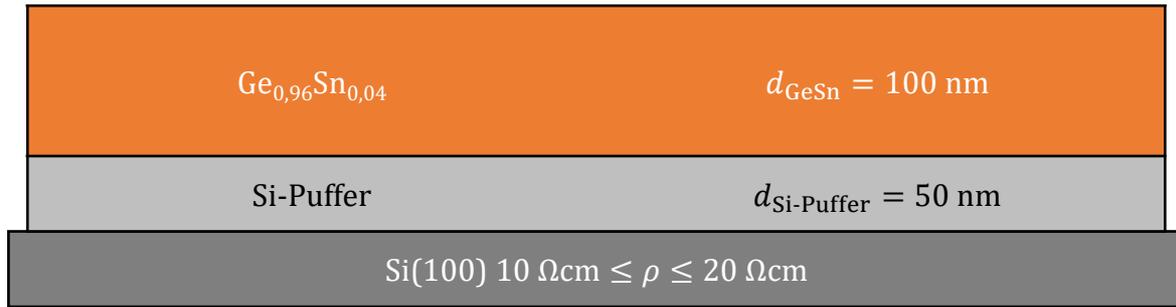


Abb. 4-3: Schichtstruktur zur Untersuchung der Verteilung des Molekularstrahlflusses Sn.

Der Epitaxieprozess startete hierbei ebenfalls mit der in Abschnitt 3.2 beschriebenen thermischen Desorption und der darauffolgenden Abscheidung des Si-Puffers mit  $d_{\text{Si-Puffer}} = 50 \text{ nm}$  bei  $T_S = 600 \text{ °C}$ . Hierbei wurde auf den Si-Puffer nicht verzichtet, um eine für die nachfolgende XRD-Analyse der  $\text{Ge}_{0,94}\text{Sn}_{0,04}$ -Schicht ausreichende Kristallqualität zu gewährleisten. Für die Epitaxie der zu analysierenden  $\text{Ge}_{0,94}\text{Sn}_{0,04}$ -Schicht wurde die Substrattemperatur anschließend auf  $T_S = 200 \text{ °C}$  abgesenkt.

Im Anschluss wurde die Zusammensetzung der  $\text{Ge}_{0,94}\text{Sn}_{0,04}$ -Schicht vom Zentrum des Substrats zu dessen Rand hin ermittelt. Hierzu wurden mittels XRD-RSM und unter Verwendung der Gleichungen (2-4) und (2-5) die vertikale und laterale Gitterkonstante  $a_{\perp, \text{GeSn}}$  und  $a_{\parallel, \text{GeSn}}$  der  $\text{Ge}_{0,94}\text{Sn}_{0,04}$ -Schicht bestimmt. Anschließend wurde mittels Gleichung (2-7) die relaxierte Gitterkonstante  $a_{0, \text{GeSn}}$  berechnet.

Die relaxierte Gitterkonstante  $a_{0, \text{GeSn}}$  folgt dabei der linearen Interpolation der Legierungsbestandteile nach Gleichung (4-4).

$$a_{0, \text{GeSn}} = a_{0, \text{Ge}} \cdot c_{\text{Ge}} + a_{0, \text{Sn}} \cdot c_{\text{Sn}} + a_{0, \text{Sn}} \cdot c_{\text{Sn}} \quad (4-4)$$

Durch Umformen von Gleichung (4-4) erhält man daraufhin Gleichung zur Berechnung der Sn-Konzentration  $c_{\text{Sn}}$ .

$$c_{\text{Sn}} = \frac{a_{0, \text{GeSn}} - a_{0, \text{Ge}}}{a_{0, \text{Sn}} - a_{0, \text{Ge}}} \quad (4-5)$$

Unter Verwendung von Gleichung (4-5) wurde die in Abb. 4-4 dargestellte radiale Abhängigkeit der Sn-Konzentration berechnet. Aufgrund der begrenzten Winkelauflösung des XRD unterliegt die auf diese Weise ermittelte Sn-Konzentration dem dargestellten Fehler von  $\Delta c_{\text{Sn}} \pm 0,1 \%$ .

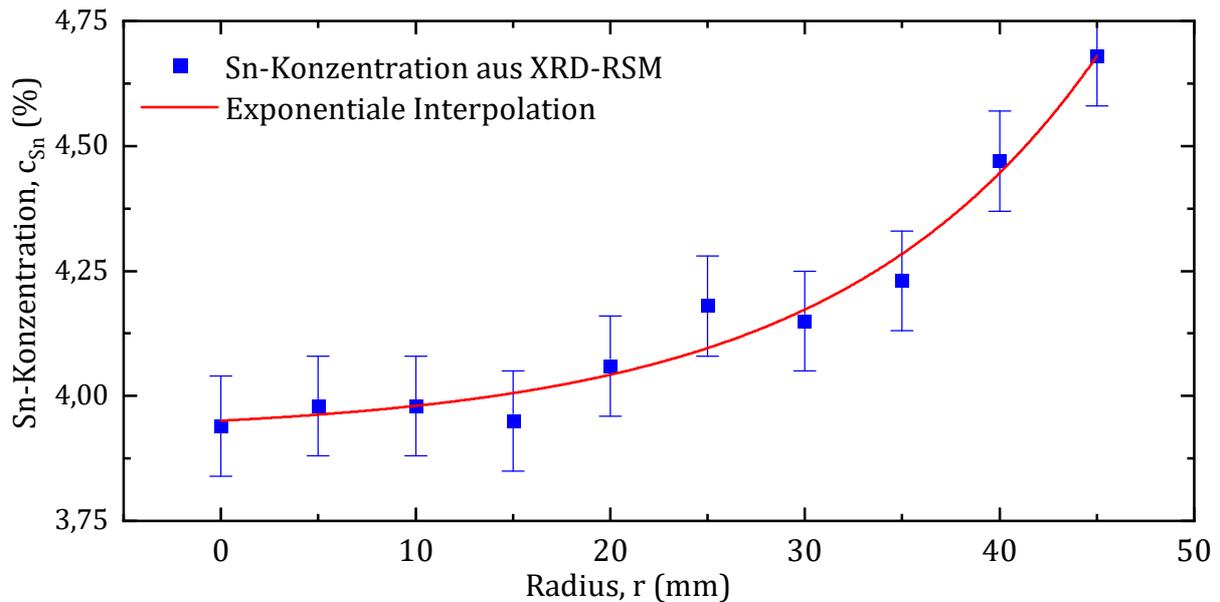


Abb. 4-4: Radiale Abhängigkeit der ermittelten Sn-Konzentration der hergestellten Schichtstruktur.

Die Messdaten wurden hierbei mit einer Exponentialfunktion, welche in Abb. 4-4 ebenfalls dargestellt ist, interpoliert. Bemerkenswert ist, dass die Sn-Konzentration und somit der Sn-Fluss zum Rand des Substrats zunehmen, während der Si- und Ge-Fluss zum Rand des Substrats hin abnehmen.

#### 4.2.3. Zusammenfassung der Homogenität der Molekularstrahlflüsse

Die auf diese Weise ermittelte, prozentuale Abweichung der Molekularstrahlflüsse über dem Radius  $r$  ist in Abb. 4-5 zusammenfassend dargestellt. Alle Werte wurden dabei auf den Mittelpunkt des Substrats ( $r = 0$  mm) bezogen.

Zunächst fällt auf, dass die prozentuale Abweichung des Si-Flusses mit  $\Delta F_{Si} = -2,7\%$  am geringsten ist. Dies ist auf die nahezu zentrischen Einbauposition unter dem Substrat und der optimierten Abstrahlcharakteristik des Si-ESVs zurückzuführen. Die prozentuale Abweichung des Ge-Flusses fällt hingegen mit  $\Delta F_{Ge} = -12\%$  deutlich höher aus. Bemerkenswert ist im Gegensatz dazu die Verteilung des Sn-Flusses. Der Sn-Fluss nimmt dabei zum Rand des Substrats hin um  $\Delta F_{Sn} = 13\%$  zu. Dies ist vor allem auf die geneigte Einbaulage der Sn-Molekularstrahlquelle zurückzuführen.

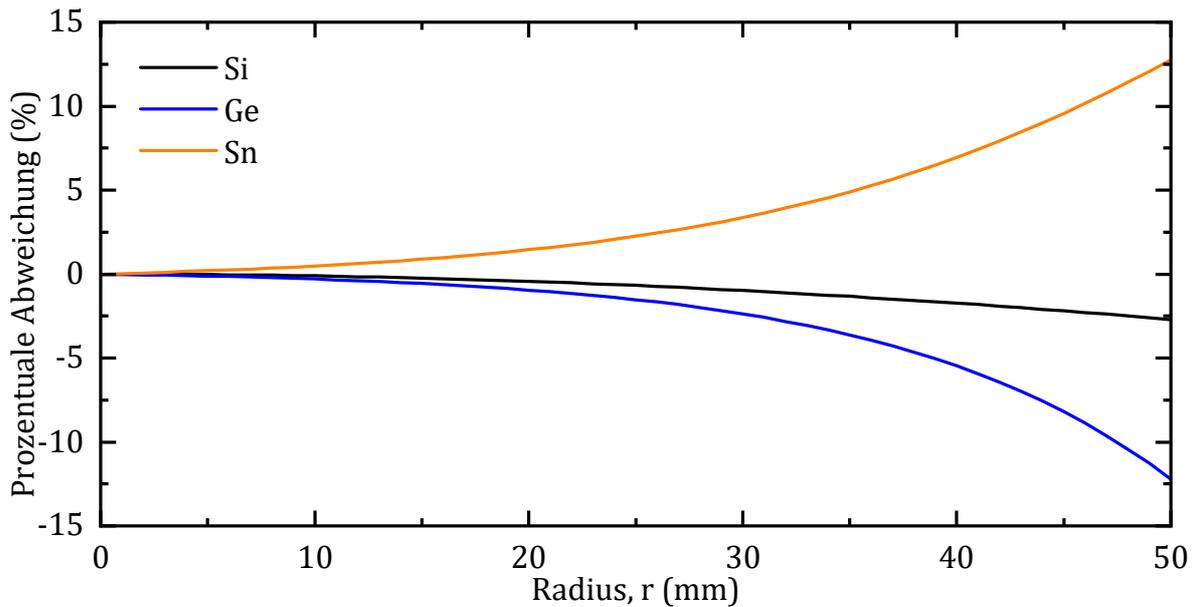


Abb. 4-5: Prozentuale Abweichung der Molekularstrahlflüsse über dem Substratradius  $r$ .

#### 4.2.4. Resultierende Abweichung der Gitteranpassung

Da die erfolgreiche Gitteranpassung ein konstantes Verhältnis des Si- und Sn-Flusses erfordert ergibt sich durch die gegebene Verteilung der Molekularstrahlflüsse eine unvermeidbare Gitterfehl-anpassung. Zur weiteren Quantifizierung dieser Gitterfehl-anpassung wurde zunächst unter der Voraussetzung einer perfekt erfüllten Gitteranpassung im Zentrum des Substrats die sich ergebende Gitterkonstante  $a_{0,\text{SiGeSn}}$  berechnet.

Durch die Abweichung vom idealen Flussverhältnis ist es nicht möglich auf dem ganzen Substrat die Gitteranpassung zu erfüllen. Im Idealfall ergibt sich daher lediglich eine verspannungsarme  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht. Die Verteilung der residualen Verspannung  $\varepsilon_{\parallel}$  über dem Substrat ist in Abb. 4-6 dargestellt. Es ergibt sich am Rand des Substrats eine residuale Druckverspannung von  $\varepsilon_{\parallel} = -0,47 \%$ .

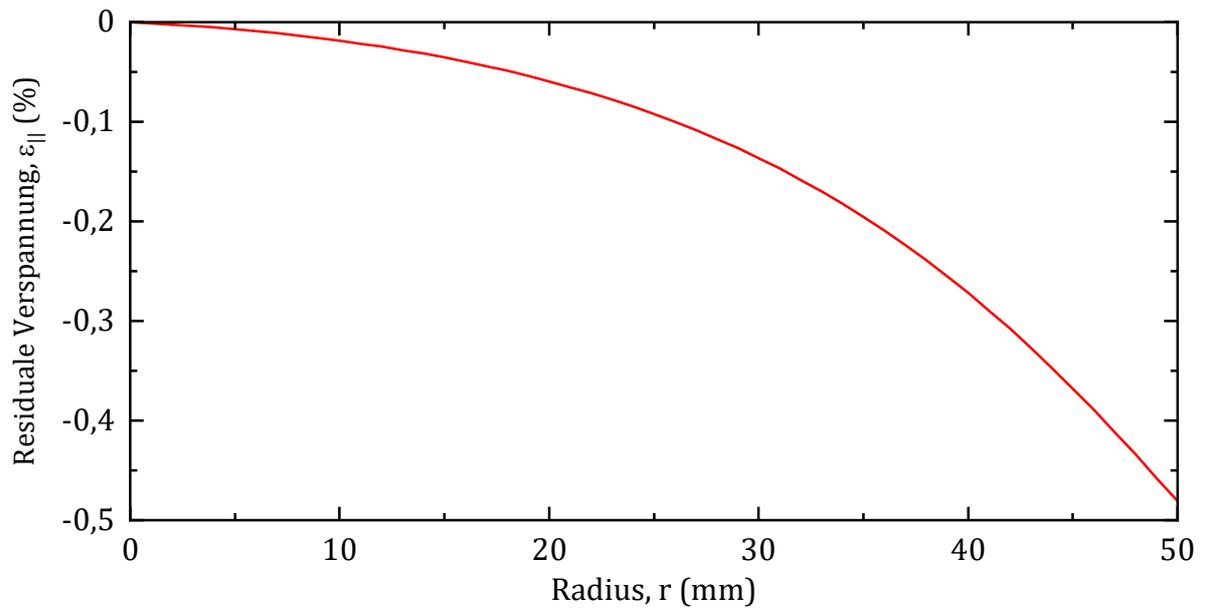


Abb. 4-6: Verteilung der residualen Verspannung  $\epsilon_{||}$  einer im Zentrum des Substrats perfekt auf Ge gitterangepassten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_y$ -Schicht.

### 4.3. Reproduzierbarkeit der Gitteranpassung.

Die Ergebnisse der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Probenserien 1.1 und 1.2 zeigen, dass nicht nur die Änderung der Gitteranpassung über dem Substrat, sondern auch deren Reproduzierbarkeit von Probe zu Probe von Bedeutung ist. Die Ursache für die mangelhafte Reproduzierbarkeit liegt hauptsächlich an den zeitlichen Fluktuationen des Si-Flusses bei einem bestimmten QMS-Regelwert. Hierdurch weicht der tatsächliche Si-Fluss vom erwarteten, zum Erreichen einer bestimmten Zusammensetzung eingestellten, Wert ab. Besonders zum Tragen kommt dieser Effekt, wenn wie bei den  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Probenserien 1.1 und 1.2, die quadratische Interpolation einzelner Kalibrierpunkte zur Bestimmung der QMS-Einstellwerte verwendet wird.

#### 4.3.1. Konditionierung des Si-ESVs

Von Bedeutung ist dabei zunächst die regelmäßige Konditionierung des Si-ESVs. Beim Betrieb des Si-ESVs wird die Schmelze, in Abb. 4-7 in Orange dargestellt, auf einen zentrischen Brennfleck mit einem Durchmesser  $D_{\text{Si-Schmelze}} \approx 1 \text{ cm}$  begrenzt. Durch das kontinuierliche Abdampfen von Si gräbt sich der Brennfleck dabei immer tiefer in den Si-Tiegel hinein (siehe Abb. 4-7 b). Dadurch kommt es, wie in Abb. 4-7 b) dargestellt, zu einer veränderten Abstrahlcharakteristik des ESVs. Im Grundzustand in Abb. 4-7 a) befindet sich die Schmelzoberfläche auf der ebenen Oberfläche des Si-Tiegels. Das Si kann daher ungehindert in den vollen Halbraum abstrahlen. Die Abstrahlcharakteristik wird dabei nur von einer kreisförmigen Blende der ESV-Verkleidung eingegrenzt. Aus Gründen der Übersichtlichkeit zeigt Abb. 4-7 a) diese Verkleidung nicht und lediglich den eingegrenzten Abstrahlkegel. Im Falle der eingegrabenen Schmelzoberfläche wird der Abstrahlkegel seitlich bereits durch das noch erstarrte Si nach oben hin begrenzt.

Aufgrund der veränderten Abstrahlcharakteristik des ESVs verringert sich dabei der relative Anteil des vom QMS gemessenen Si-Flusses. Da der Si-Fluss durch das QMS geregelt wird, steigt dadurch die resultierende Wachstumsrate  $R_{\text{Si}}$ . Zusätzlich wird durch die geänderte Abstrahlcharakteristik die Flussverteilung über dem Substrat nachteilig beeinflusst.

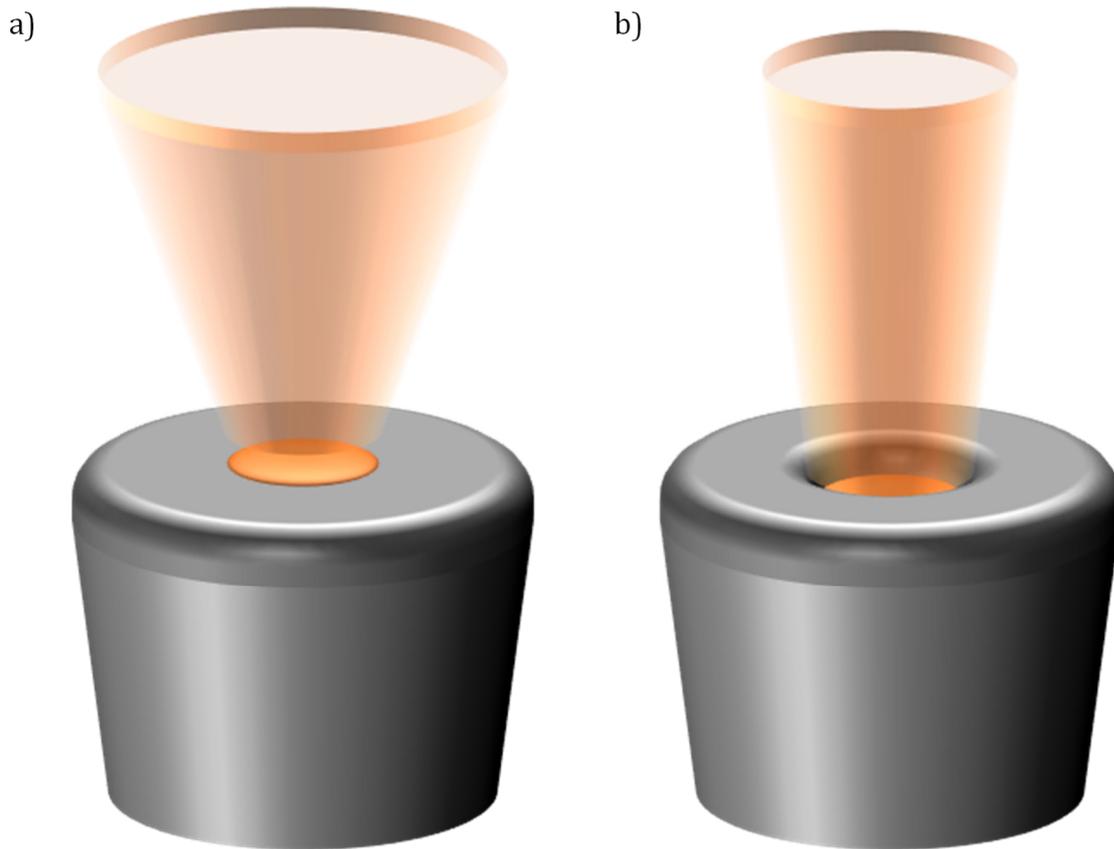


Abb. 4-7: Schematische Darstellung des Abdampfprozesses des Si-Tiegels innerhalb des Si-ESVs. a) Ebene Schmelzoberfläche, b) eingegrabene Schmelzoberfläche.

Um dem Eingraben der Schmelzoberfläche entgegenzuwirken, muss der Si-ESV daher in regelmäßigen Abständen konditioniert werden. Dabei wird der Brennfleck zunächst um den Faktor 1,5 vergrößert. Anschließend wird der Brennfleck am Rand des Si-Tiegels entlang um diesen herumgefahren. Dadurch kommt es zum Abschmelzen der entstandenen Randstruktur. Das Si fließt dabei in die entstandene Randstruktur hinein, wodurch sich erneut eine ebene Tiegeloberfläche bildet.

Der Abstand des Aufschmelzens richtet sich dabei empirisch nach der Gesamtdicke des aufgewachsenen Si  $d_{\text{Si,Ges}}$ . Im Falle einer Wachstumsrate von  $R_{\text{Si}} = 1 \text{ \AA} \cdot \text{s}^{-1}$  erfolgt standardgemäß nach  $d_{\text{Si,Ges}} = 1 \text{ \mu m}$  ein Aufschmelzvorgang.

Um die Reproduzierbarkeit des Si-Flusses für die Epitaxie von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zu erhöhen wurde im Rahmen dieser Arbeit allerdings vor jeder Probe ein Aufschmelzvorgang durchgeführt. Dies soll reproduzierbare, gleichbleibende Abdampfbedingungen für den ohnehin kritischen Si-Verdampfungsprozess sicherstellen.

#### 4.3.2. Konstanter QMS-Sollwert der Si-Regelung

Eine Möglichkeit die Unsicherheit und die Fluktuation des Si-Flusses auszugleichen ist, den Si-Fluss auf einen konstanten Sollwert der Regelung mittels QMS festzuhalten. Aus der Bedingung für die Gitteranpassung in Gleichung (4-3) ergibt sich daraus der notwendige Sn-Fluss. Zur Veränderung der Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht wird daraufhin lediglich der Ge-Fluss variiert. Der Vorteil dieses Ansatzes ist, dass für die Erfüllung der Gitteranpassung stets die gleichen Bedingungen herrschen. Etwaige Abweichungen davon ergeben sich also nur durch Fluktuationen des QMS-Signals. Nachteilig ist jedoch, dass die tatsächliche Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht von der genauen Kenntnis des Ge-Flusses bestimmt wird. Außerdem ergibt sich hierbei eine variable Gesamtwachstumsrate der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht. Diese beeinflusst ihrerseits ratenabhängige Effekte der Epitaxie wie z.B. Dotierstoff- oder Legierungssegregation.

Auf diese Weise wurde die in Kapitel 6 vorgestellte  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserie 4 hergestellt. Die Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht variiert dabei zwischen  $5,0\% \leq c_{\text{Sn}} \leq 15\%$ . Der Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren in Abb. 4-8 zeigt jedoch, dass sich die Position des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes von Probe zu Probe im Bereich  $65,7^\circ \leq 2\theta \leq 66,2^\circ$  schwankt. Die Fluktuationen des Si-Flusses sind also auch bei konstantem QMS-Sollwert zu groß, um eine zuverlässige Reproduzierbarkeit der Gitteranpassung zu gewährleisten.

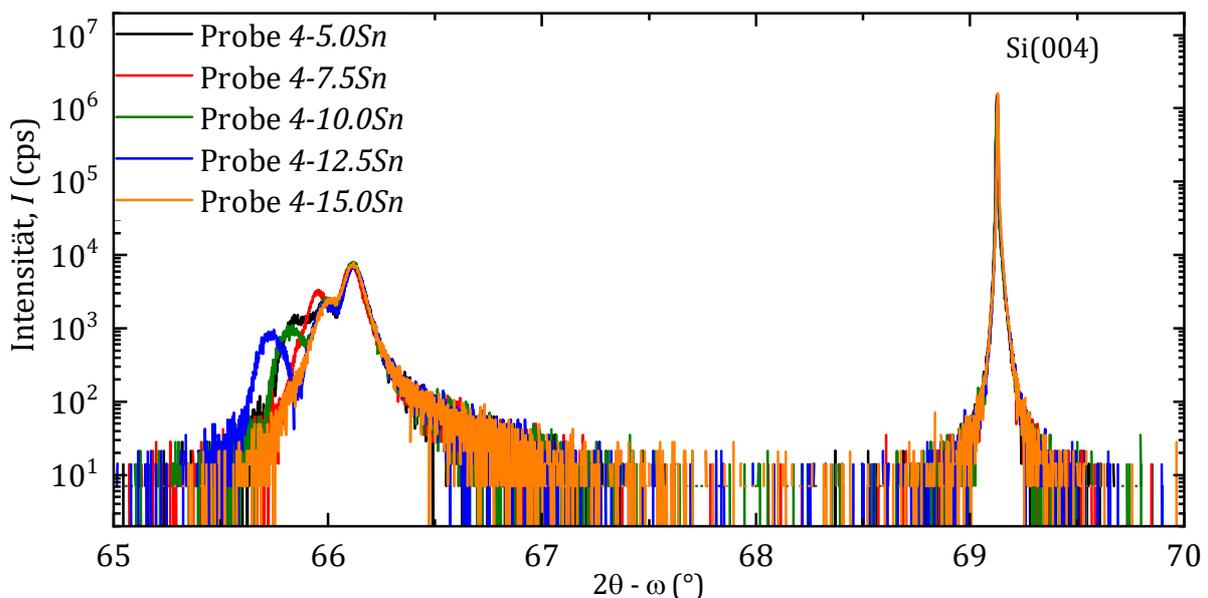


Abb. 4-8: Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probenserie 4 zur qualitativen Bewertung der Reproduzierbarkeit der Bedingung zur Gitteranpassung auf Ge.

#### 4.3.3. Konstante Leistung des Si-ESVs

Aus diesem Grund wurde die oben erläuterte Methode verfeinert, indem die Steuerung des Si-ESVs verändert wurde. Statt den Si-Fluss wie üblich über das QMS-Signal zu regeln, wird ein konstanter Emissionsstrom und somit eine konstante Leistung in den Si-ESV eingeprägt. Auf diese Weise wurde die in Kapitel 5 vorgestellte  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserie 3 mit unterschiedlicher Zusammensetzung zwischen  $5,0\% \leq c_{\text{Sn}} \leq 15\%$  hergestellt. Der Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probenteilserie 3- $X.X\text{Sn}-200\text{C}$  in Abb. 4-9 zeigt hierbei, dass die Bedingung zur Gitteranpassung bei dieser Methode am besten erfüllt wird. Die Position des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes variiert hier in einem deutlich kleineren Bereich von  $66,1^\circ \leq 2\theta \leq 66,3^\circ$ . Es ist außerdem zu beachten, dass die Verschiebung des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes bei Probe 3-12.5Sn-200C zu  $2\theta = 66,3^\circ$  auf eine Fehlfunktion des Si-ESVs zurückzuführen ist. Die tatsächliche Variation der Gitteranpassung ist demzufolge deutlich kleiner. Diese Methode ist daher für die nachfolgenden Untersuchungen zu bevorzugen und wird auch, falls nicht anders angegeben, so verwendet.

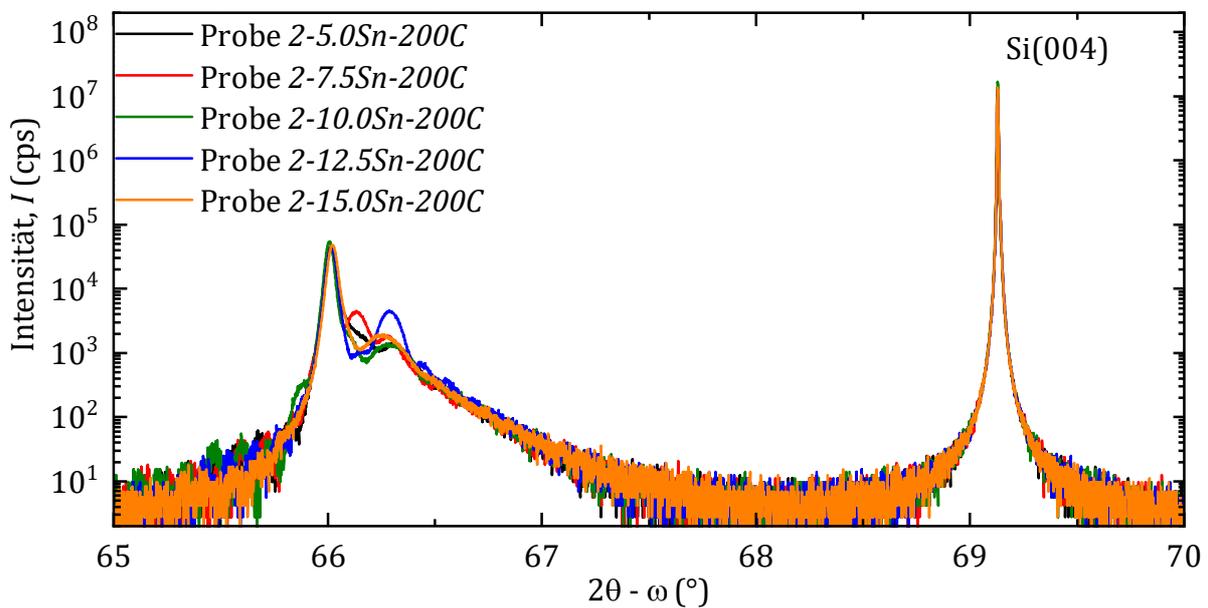


Abb. 4-9: Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probenserie 2- $X.X\text{Sn}-200\text{C}$  zur qualitativen Bewertung der Reproduzierbarkeit der Bedingung zur Gitteranpassung auf Ge.

#### 4.4. Verbesserung der Substrattemperaturregelung mittels MIR-Pyrometrie

##### 4.4.1. Kenndaten des MIR-Pyrometers

Basierend auf den mit der MIR-Kamera gewonnenen Erkenntnissen wurde das MBE-System um ein MIR-Pyrometer vom Typ *Raytek MI3* mit einer spektralen Empfindlichkeit von  $8 \mu\text{m} \leq \lambda \leq 13 \mu\text{m}$  erweitert. Im Gegensatz zur MIR-Kamera erlaubt es keine Aussage über die Temperaturverteilung auf der Substratoberfläche, da es nur über einen einzelnen Sensor verfügt. Eine vor dem Sensor angebrachte Linsenoptik ergibt ein Verhältnis von Messfleckdurchmesser  $D$  zum Messabstand  $S$  von  $D:S = 1:10$ .

Im Vergleich zur MIR-Kamera wurde die Einbauposition des MIR-Pyrometers verändert. Der Messstrahl der MIR-Kamera ist zur Senkrechten des Substrats geneigt (siehe Abb. 4-10). Dies hat den Nachteil, dass die MIR-Kamera auch MIR-Strahlung detektiert, welche wie in Abb. 4-10 dargestellt, von den Molekularstrahlquellen emittiert und der Substratoberfläche reflektiert wird.

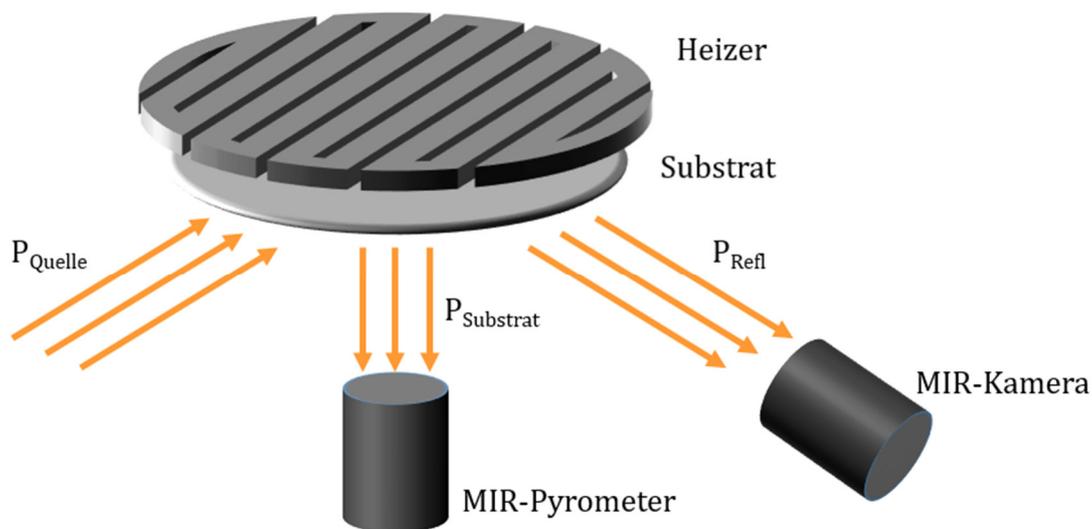


Abb. 4-10: Schematische Darstellung der Einbauposition der MIR-Kamera und des MIR-Pyrometers und den auftretenden Strahlquellen

Um eine Verfälschung der gemessenen Substrattemperatur hierdurch zu vermeiden, wurde das MIR-Pyrometer exakt senkrecht und zentrisch unter dem Substrat montiert. Da keine Molekularstrahlquelle exakt zentrisch unter dem Substrat angebracht ist kann daher keine Molekularstrahlquellenstrahlung direkt zum Pyrometer reflektiert werden.

Diese Modifikation des A-MBE-Systems ist ein wesentlicher Bestandteil dieser Arbeit und Basis für die weitere Optimierung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Epitaxieparameter.

Ein weiterer Vorteil der senkrechten Einbaulage ist, dass auf diese Weise ein runder Messfleck auf der Substratoberfläche entsteht, während er bei geneigter Einbaulage elliptisch verformt wird. In dieser Einbaulage, bei dem dadurch gegebenen Messabstand und der verwendeten Optik entsteht somit ein Messfleck mit einem Durchmesser von  $D = 50$  mm. Dies sorgt bei der üblicherweise verwendete Substratgröße von  $D_{\text{Substrat}} = 100$  mm einerseits für eine gute Abdeckung und andererseits für eine ausreichende Justagetoleranz des MIR-Pyrometers.

Im Gegensatz zur MIR-Kamera verfügt das MIR-Pyrometer außerdem über einen echtzeitfähigen Signalausgang. Dieser kann unter anderem als Thermoelement vom Typ *J* oder Typ *K* konfiguriert und daher direkt in das Thermoelement-Eingangsmodul der Anlagensteuerung eingespeist werden. Auf diese Weise kann das Pyrometersignal direkt zur Regelung der Substrateheizung verwendet werden.

### 4.4.2. Einstellung von Emissivität und Transmissivität

An dieser Stelle wird nochmals die Einstellung der Emissivität  $\epsilon$  und Transmissivität  $\tau$  ausführlicher diskutiert. Wie schon bei der MIR-Kamera sind diese Werte für die Korrektheit der absoluten Messwerte von großer Bedeutung.

Da das MIR-Pyrometer die gleiche spektrale Empfindlichkeit wie die MIR-Kamera aufweist, wird ebenfalls das ZnSe-Fenster mit der Transmissivität  $\tau_{\text{ZnSe}} = 0,73$  verwendet. Es ist allerdings zu beachten, dass die Transmissivität durch Sekundärbedampfung über einen längeren Zeitraum abnimmt. Aus diesem Grund wurde eine pneumatisch steuerbare Blende innerhalb der MBE-Kammer vor dem Fenster angebracht, um das Fenster bei Nichtgebrauch abzudecken.

Da zur präzisen Regelung der Substrattemperatur nun auch die absoluten Messwerte wichtig sind wird hier nochmals die korrekte Einstellung der Emissivität betrachtet. Aufgrund der teilweisen Transparenz von Si im betrachteten Spektralbereich setzt sich die thermische Strahlung aus zwei Effekten zusammen: Bei Temperaturen unterhalb von ungefähr  $T_S = 300$  °C entsteht die Strahlung hauptsächlich durch Gitterschwingungen

(vgl. Abb. 4-11), während sie bei Temperaturen oberhalb von ungefähr  $T_S = 300\text{ °C}$  hauptsächlich durch freie Ladungsträger verursacht wird (vgl. Abb. 4-11) [64]

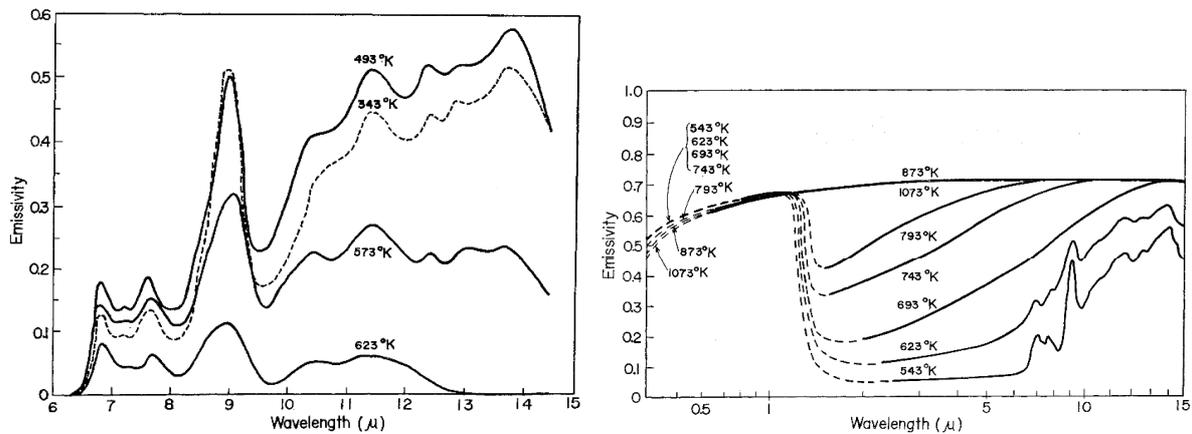


Abb. 4-11: Vergleich der Emissivität von Si hervorgerufen durch Gitterschwingungen (links) und freie Ladungsträger (rechts). (Grafiken entnommen aus [64]).

Die Emissivität des Substrats wird daher maßgeblich durch dessen Dotierart und -höhe beeinflusst. Außerdem wird deutlich, dass die Emissivität von der eigentlichen Substrattemperatur abhängig ist. Für Dotierstoffkonzentrationen ab  $N \approx 10^{17}\text{ cm}^{-3}$  erhöht sich die Emissivität im verwendeten Spektralbereich auf  $0,55 \leq \epsilon \leq 0,75$  [65]. Für den in dieser Arbeit hauptsächlich verwendeten Substrattyp (Si(100), p-typ,  $10\ \Omega\text{cm} \leq \rho \leq 20\ \Omega\text{cm}$ ) ergibt sich eine Emissivität von ungefähr  $0,45 \leq \epsilon \leq 0,55$ . Darüber hinaus kommt es an der Grenzschicht unterschiedlicher Materialien (Si, Ge,  $\text{Ge}_{1-z}\text{Sn}_z$ ,  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ ) zu Reflexion, Transmission und unterschiedlicher Emissivität der einzelnen Materialien. Aufgrund der teilweisen Transparenz des Substrats kann außerdem nicht ausgeschlossen werden, dass ein Teil der gemessenen Strahlung vom Substrateizer selbst emittiert wird.

Es wird deutlich, dass die Emissivität der Probe, von vielen Faktoren beeinflusst, in einem weiten Bereich schwankt. Um dennoch vergleichbare Prozessbedingungen für die nachfolgenden Epitaxie-Experimente zu schaffen, wurde die Emissivität hierbei auf dieselbe Weise kalibriert wie bei der MIR-Kamera.

An späterer Stelle wird jedoch noch deutlich, dass für eine sinnvolle Verwendung der MIR-Pyrometrie eine aktive Bestimmung und Nachführung der Emissivität  $\epsilon$  notwendig ist.

### 4.4.3. Einfahren der Regelung mittels MIR-Pyrometrie

Mithilfe des MIR-Pyrometers wurden anschließend verschiedene Experimente durchgeführt, um die Regelung der Substrattemperatur zu optimieren. Dabei müssen die folgenden Störeinflüsse der Regelung berücksichtigt werden.

- Heizwirkung der Molekularstrahlquellen, die zu Beginn des Wachstums zu einer Erhöhung der Substrattemperatur führen
- Trägheit des Systems durch die Einbaulage des Thermoelements
- Einfluss eventuell transmittierter Strahlung des Heizers

Das Ziel ist dabei, die angestrebte Substrattemperatur möglichst genau und ohne Überschwingen zu erreichen und zu halten.

#### ❖ *Epitaxie bei ausgeschalteter Substratheizung*

Der erste Ansatz ist es, die Substrattemperatur auf einen bestimmten Wert  $T_{S,\text{Kühl}} = T_{S,\text{Soll}} - \Delta T_{S,\text{Kühl}}$  abzukühlen. Die Differenz beträgt hierbei  $\Delta T_{S,\text{Kühl}} = 30$  K. Der resultierende Verlauf der Substrattemperatur ist in Abb. 4-12 dargestellt.

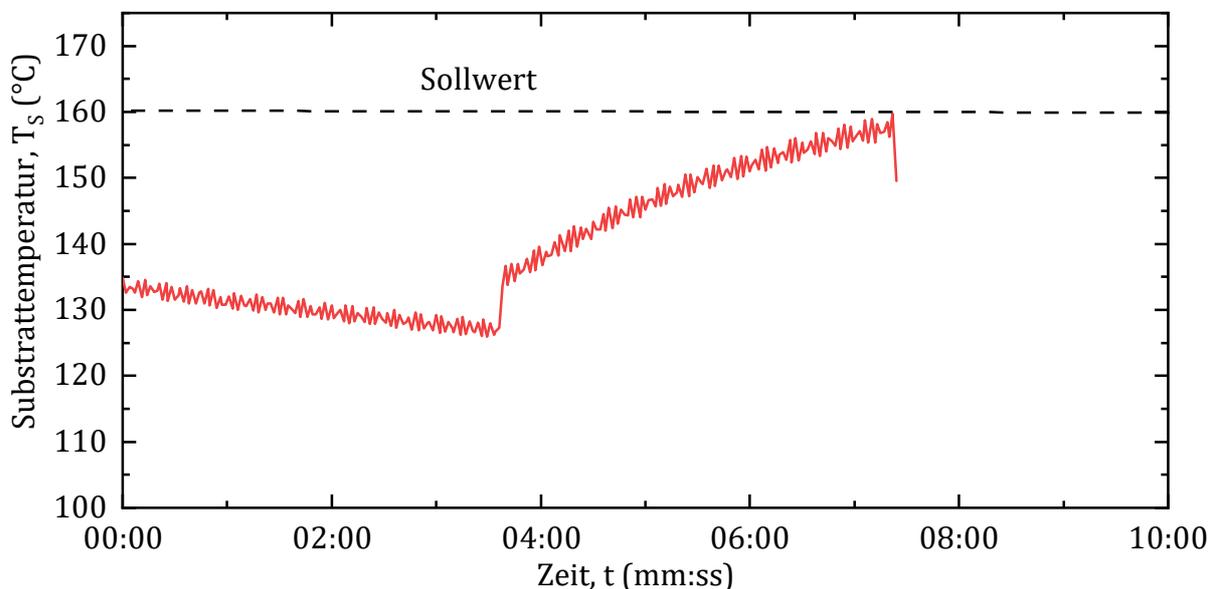


Abb. 4-12: Verlauf der Substrattemperatur  $T_S$ , gemessen mit dem MIR-Pyrometer, bei ausgeschalteter Substratheizung und Abkühlen bis  $T_S = 130$  °C.

Anschließend beginnt der Epitaxieprozess durch Öffnen der Molekularstrahlquellen. Die eigentliche Substratheizung ist dabei ausgeschaltet und das Substrat wird lediglich durch die Strahlung der Molekularstrahlquellen geheizt. Es wird deutlich, dass die Substrattemperatur nur sehr langsam ansteigt und es sich kein Gleichgewichtszustand einstellt. Der Mittelwert der Substrattemperatur unterschreitet den Sollwert um  $\Delta T_S = 10$  K. Es ist allerdings zu beachten, dass die Wachstumsdauer hierbei gering gewählt ist. Der gesamte Anstieg der Substrattemperatur beträgt dennoch  $\Delta T_S = 30$  K.

Im nächsten Schritt wurde diese Methode nochmals verwendet. Dabei wurde jedoch die Substrattemperatur auf den eigentlichen Sollwert abgekühlt, um die Heizwirkung der Molekularstrahlquellen nochmals zu quantifizieren. Der Verlauf der Substrattemperatur in Abb. 4-13 zeigt, dass hierbei der Anstieg nur  $\Delta T_S = 20$  K beträgt. Der Temperaturanstieg ist aufgrund der begrenzten Heizwirkung der Molekularstrahlquellen folglich abhängig vom Startwert zu Beginn des Epitaxieprozesses, was die Notwendigkeit der aktiven Regelung erneut verdeutlicht.

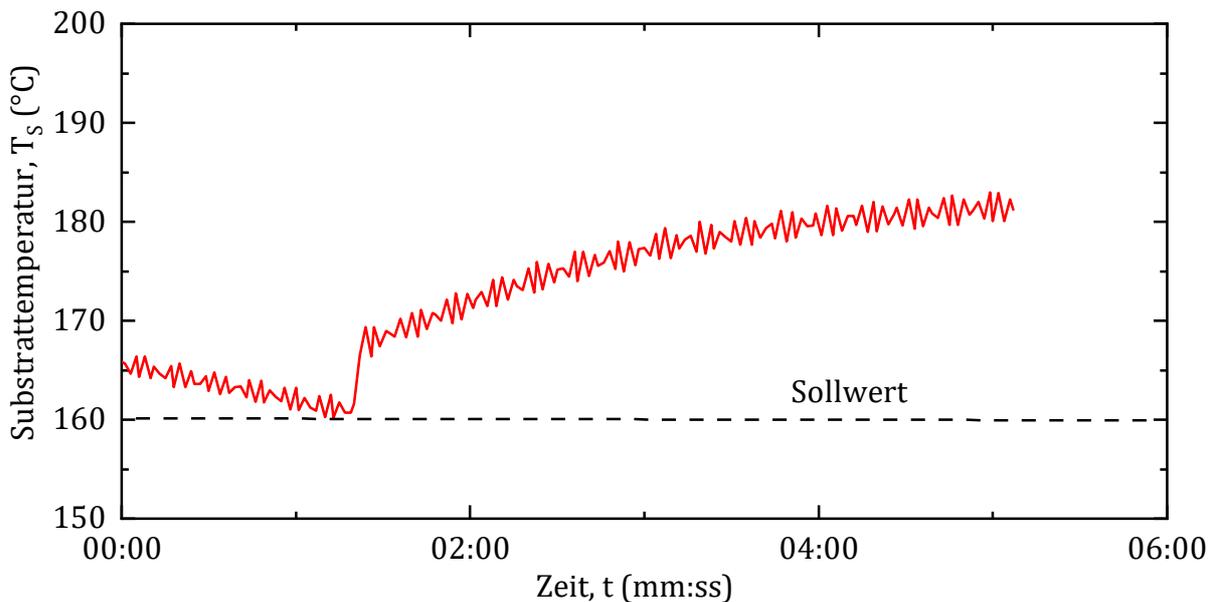


Abb. 4-13: Verlauf der Substrattemperatur  $T_S$ , gemessen mit dem MIR-Pyrometer, bei ausgeschalteter Substratheizung und Abkühlen bis  $T_S = 160$  °C.

### ❖ *Epitaxie mit aktiver Substratregelung auf Basis der MIR-Pyrometrie*

Zur Verbesserung des Verlaufs der Substrattemperatur wird im nächsten Schritt diese auf Basis des MIR-Pyrometersignals aktiv geregelt. Zunächst wird die Substrattemperatur wieder auf den reduzierten Sollwert  $T_{S,Kühl}$  abgekühlt. Die Differenz beträgt dabei

$\Delta T_{S,\text{Kühl}} = 15 \text{ K}$ . Durch die geringere Differenz zum Sollwert soll dieser nach Beginn des Epitaxieprozesses schneller erreicht werden. An dieser Stelle wird zudem die Regelung der Substrattemperatur auf den Sollwert aktiviert. Der Verlauf der Substrattemperatur ist in Abb. 4-14 dargestellt. Es zeigt sich hierbei jedoch, dass es zu einem starken Überschwingen der Substrattemperatur um  $\Delta T_S = 15 \text{ K}$  auf  $T_S = 175 \text{ °C}$  kommt. Dies ist auf den verzögerten Anstieg der Substrattemperatur durch die Heizwirkung der Molekularstrahlquellen zurückzuführen. Es kommt deshalb zu einer dynamischen Antwort des Reglers, um die Solltemperatur zu erreichen. Dadurch wird für kurze Zeit deutlich zu viel Leistung in den Substrateizer eingepreßt, was das Überschwingen der Substrattemperatur verursacht.

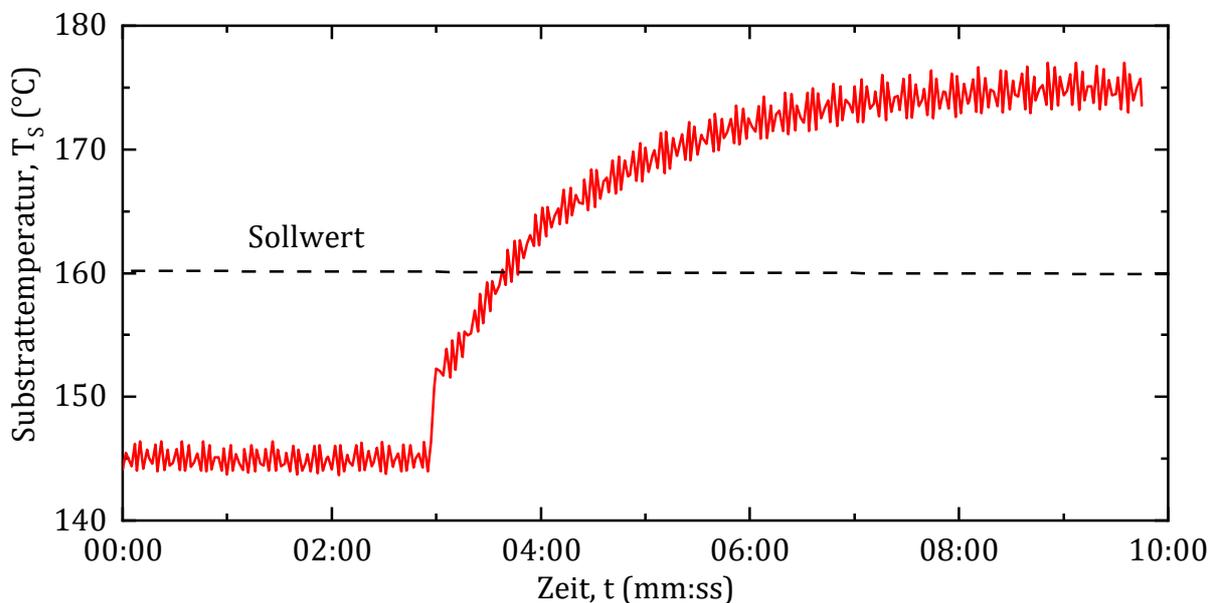


Abb. 4-14: Verlauf der Substrattemperatur  $T_S$ , gemessen mit dem MIR-Pyrometer, mit aktiver Regelung der Substrateheizung und Abkühlen bis  $T_S = 145 \text{ °C}$ .

Die nächste Verbesserung ist daher, die Solltemperatur zu Beginn des Epitaxieprozesses auf den Sollwert hochzurampen. Die Rampe wurde dabei so angepasst, um der verzögerten Heizwirkung der Molekularstrahlquellen zu entsprechen. Die Rampendauer wurde dabei in mehreren Schritten optimiert. Ein Vergleich verschiedener Temperaturverläufe ist in Abb. 4-15 dargestellt. Zunächst zeigt die zuvor betrachtete Regelstrategie mit einer Temperaturdifferenz von  $\Delta T_{S,\text{Kühl}} = 15 \text{ K}$  und einer Temperaturrampendauer von  $t_{\text{Rampe}} = 0 \text{ s}$ . Die Substrattemperatur übersteigt den Sollwert dabei um  $\Delta T_S = 15 \text{ K}$ . Im nächsten Schritt wurde die Substrattemperatur vor dem Wachstum weiter reduziert um  $\Delta T_S = 30 \text{ K}$ . Die Substrattemperatur wurde zu Beginn des Wachstums mit einer

Rampendauer von  $t_{\text{Rampe}} = 60 \text{ s}$  auf den Sollwert erhöht. Aufgrund der Regeldynamik kommt es hierbei dennoch zu einem zu starken Überschwingen von  $\Delta T_S = 15 \text{ K}$ .

Die Substrattemperatur vor dem Wachstum wurde daher noch weiter um  $\Delta T_{S,\text{Kühl}} = 45 \text{ K}$  reduziert während gleichzeitig die Rampendauer auf  $t_{\text{Rampe}} = 240 \text{ s}$  vergrößert wurde. Dadurch konnte das Überschwingen deutlich auf nur  $\Delta T_S = 5 \text{ K}$  reduziert werden. Im Anstieg der Substrattemperatur ist nach  $t = 60 \text{ s}$  ein erstes Anschwingen der Substrattemperatur zu erkennen. Dies ist ein Hinweis auf eine zu starke Heizleistung zu Beginn des Rampe, hervorgerufen durch eine zu große Differenz zum Sollwert  $\Delta T_{S,\text{Kühl}}$ .

Im letzten Optimierungsschritt wurde die Substrattemperatur daher nur um  $\Delta T_{S,\text{Kühl}} = 40 \text{ K}$  reduziert. Die Rampendauer blieb dabei mit  $t_{\text{Rampe}} = 240 \text{ s}$  unverändert. Hierbei zeigt sich ein optimales Erreichen der Solltemperatur zum Ende der Rampendauer.

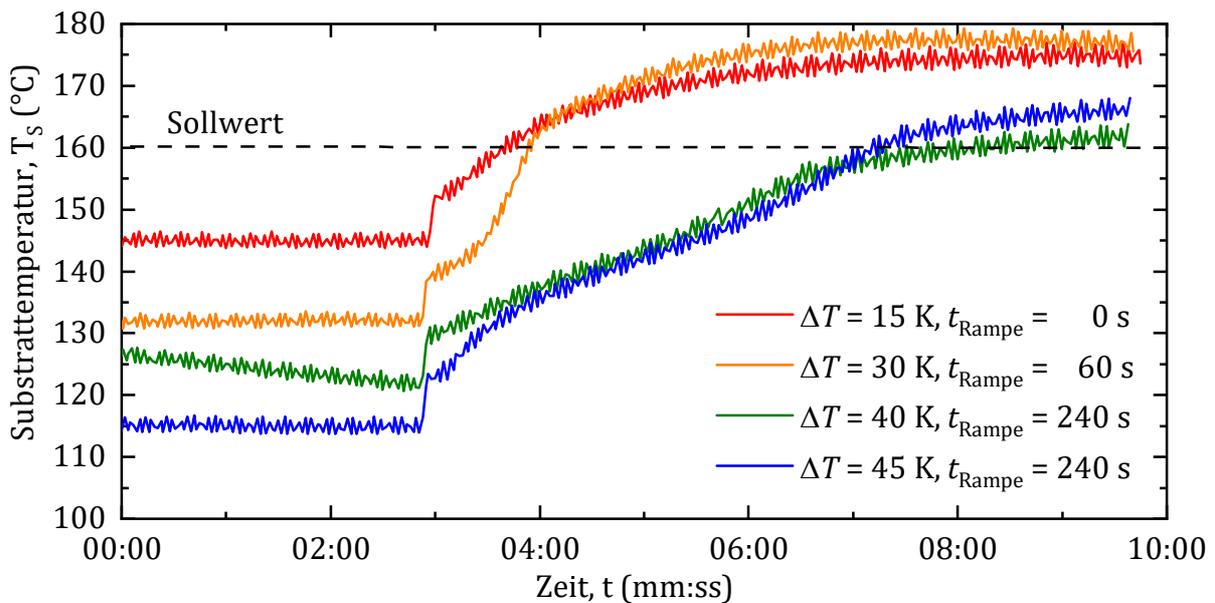


Abb. 4-15: Verlauf der Substrattemperatur  $T_S$  für unterschiedliche Regelstrategien.

Es wird deutlich, dass ein optimales Ergebnis maßgeblich durch die Differenz zum Sollwert  $\Delta T_{S,\text{Kühl}}$  und die Rampendauer  $t_{\text{Rampe}}$  beeinflusst wird.

❖ *Alternative Regelstrategien für besonders niedrige Substrattemperaturen*

Die vorgestellten Experimente zeigen, dass mit der aktiven Regelung der Substrattemperatur eine bestimmte Schwelle von ungefähr  $T_S = 160 \text{ °C}$  nur schwer unterschritten werden kann. Dies liegt an der fehlenden Möglichkeit das Substrat aktiv zu

kühlen. Für sehr geringe Substrattemperaturen von  $T_S \leq 100 \text{ °C}$  wurde daher eine alternative Regelstrategie entwickelt. Sie kann beispielsweise zur Epitaxie von auf Gitterangepasstem  $\text{Si}_{0,79}\text{Sn}_{0,21}$  zum Einsatz kommen.

Da in diesem Bereich die Substrattemperatur auch bei ausgeschalteter Substrateheizung deutlich über den Sollwert  $T_S = 100 \text{ °C}$  ansteigt wird der Epitaxieprozess immer wieder unterbrochen, um Abkühlphasen zu ermöglichen. Es handelt sich daher um eine klassische Zweipunktregelung. Die untere und obere Schwelltemperatur wurde dabei auf  $T_{S,u} = 90 \text{ °C}$  und  $T_{S,o} = 100 \text{ °C}$  festgelegt. Die hierfür notwendigen Programmsequenzen sind in Abb. 4-16 a) und b) gegenübergestellt und unterscheiden sich signifikant.

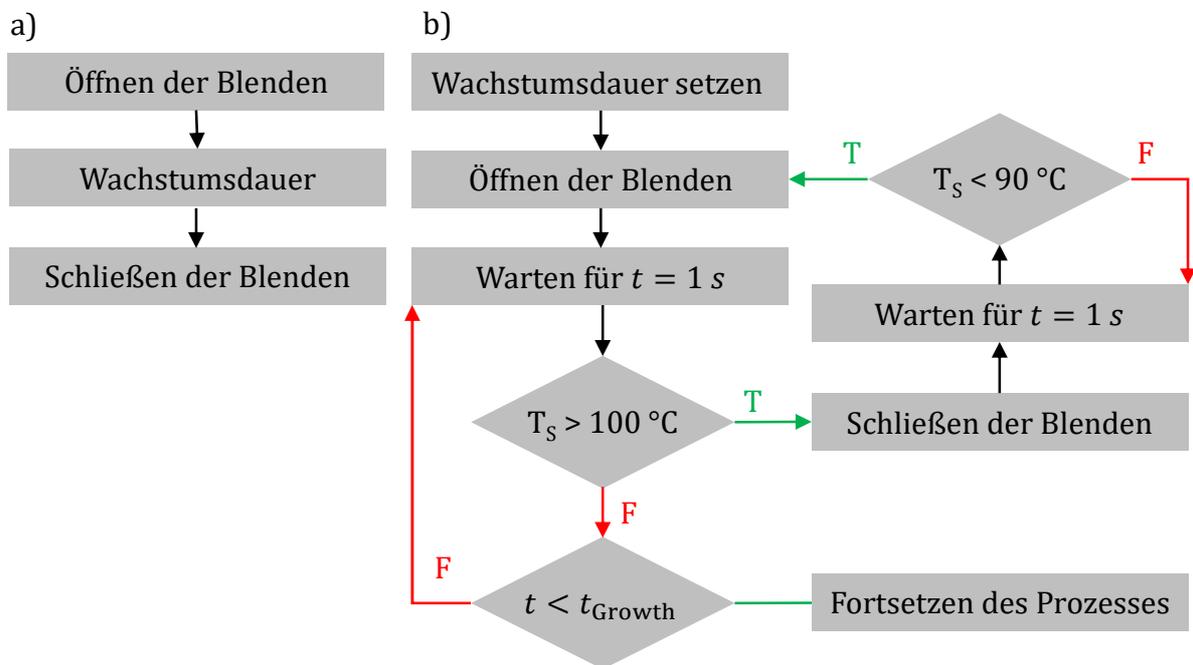


Abb. 4-16: Vergleich der Programmsequenzen für a) die Epitaxie bei  $T_S \gg 100 \text{ °C}$ . b) die Epitaxie bei  $T_S \approx 100 \text{ °C}$ .

Die standardgemäß verwendete Programmsequenz für die Epitaxie bei  $T_S \gg 100 \text{ °C}$  in Abb. 4-16 a) ist denkbar einfach: Nach dem Öffnen der Blenden der Molekularstrahlquellen wird eine Wartezeit  $t_{\text{Growth}}$  eingestellt, welche der für das Wachstum der Schichtdicke benötigten Wachstumsdauer entspricht. Anschließend werden die Blenden der Molekularstrahlquellen wieder geschlossen. Während der Wartezeit kann allerdings nicht in den Prozess eingegriffen werden, um beispielsweise einer Überhitzung des Substrats entgegenzuwirken.

An dieser Stelle unterscheidet sich die notwendige Programmsequenz für die Epitaxie bei  $T_S \approx 100 \text{ °C}$  signifikant. Die Wachstumsdauer  $t_{\text{Growth}}$  wird dabei über einen Zähler in Schritten von  $\Delta t = 1 \text{ s}$  überwacht, welcher im ersten Schritt initialisiert wird. Anschließend werden die Blenden der Molekularstrahlquellen geöffnet, das Wachstum beginnt und eine erste Wartephase von  $\Delta t = 1 \text{ s}$  wird eingefügt. Anschließend erfolgt eine Abfrage, ob die Substrattemperatur die Schwelltemperatur  $T_S > 100 \text{ °C}$  übersteigt. Liegt die Substrattemperatur unter der Schwelle ( $T_S < 100 \text{ °C}$ ) erfolgt im nächsten Schritt eine Abfrage des Zählers, ob die Wachstumsdauer abgelaufen ist. Für den Fall  $t < t_{\text{Growth}}$  erfolgt eine Schleife über die Wartephase von  $\Delta t = 1 \text{ s}$  und der Zähler wird iteriert. Für den Fall  $t > t_{\text{Growth}}$  ist das Wachstum der betreffenden Schicht beendet und der restliche Prozess wird fortgesetzt.

Übersteigt die Substrattemperatur die Schwelltemperatur  $T_S > 100 \text{ °C}$  werden zunächst die Blenden der Molekularstrahlquellen geschlossen, um das Wachstum der Schicht zu unterbrechen. Anschließend erfolgt eine Warteschleife mit Abfrage, ob die Substrattemperatur die untere Schwelltemperatur unterschreitet ( $T_S < 90 \text{ °C}$ ). In diesem Fall wird das Wachstum anschließend durch das Öffnen der Blenden der Molekularstrahlquellen wieder fortgesetzt. Der resultierende Verlauf der Substrattemperatur ist in Abb. 4-17 dargestellt. Der Verlauf ist dabei gekennzeichnet durch die deutlich unterschiedlichen Aufheiz- und Abkühlphasen mit stochastischer Dauer.

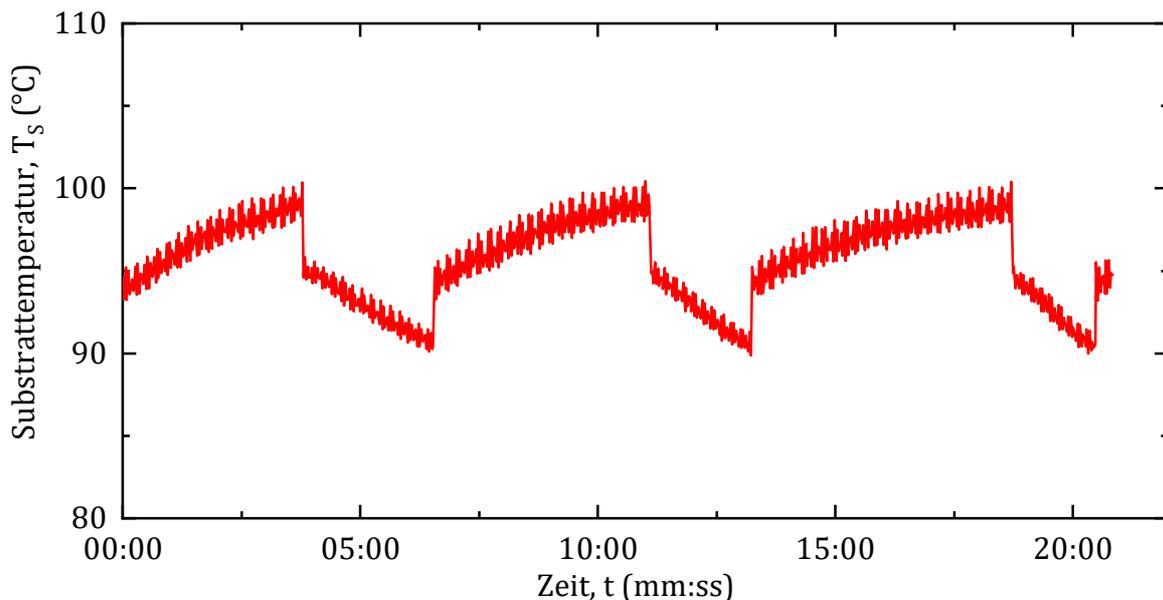


Abb. 4-17: Verlauf der Substrattemperatur  $T_S$ , gemessen mit dem MIR-Pyrometer, mit aktiver Zweipunktregelung durch stochastische Abkühlphasen.



## 5. Optimierung der Epitaxie von auf Ge gitterangepasstem $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$

*Dieses Kapitel behandelt die Optimierung der Epitaxie von auf Ge gitterangepasstem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ . Der Schwerpunkt liegt hierbei auf einer Variation der Substrattemperatur zur Findung der optimalen Epitaxieparameter. Eine Bewertung der Epitaxieparameter erfolgt anhand der Schichtqualität mittels XRD-Analysen. Außerdem erfolgt eine erste Materialcharakterisierung hinsichtlich der Zusammensetzung und Qualität der hergestellten Schichten. Die hierfür verwendeten Methoden sind ebenfalls XRD und zusätzlich RBS und TEM-EDXS.*

### 5.1. Schichtaufbau und Epitaxieparameter

Zur Eingrenzung des Epitaxiefensters von auf Ge gitterangepasstem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  wurde die Substrattemperatur  $T_S$  während der Epitaxie der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht variiert. In Abschnitt 4.3 wurden bereits Methoden vorgestellt, um die Reproduzierbarkeit der Bedingung zur Gitteranpassung auf Ge zu verbessern. Die beste Methode (siehe Abschnitt 4.3.3) wurde in dieser Untersuchung verwendet. Hierbei wurde die Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht gemäß Tab. 5-1 im Konzentrationsbereich von  $2,5\% \leq c_{\text{Sn}} \leq 15\%$  und der Bedingung zur Gitteranpassung auf Ge in Gleichung (4-3) folgend variiert. Der zur Optimierung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxie hergestellte Schichtstapel der Probenserie 2 ist in der nachfolgenden Abb. 5-1 dargestellt.

Der Schichtstapel basiert standardgemäß auf schwach p-typ dotierten Si(100) Substraten mit einem spezifischen Schichtwiderstand von  $10\ \Omega\text{cm} \leq \rho \leq 20\ \Omega\text{cm}$ . Der Prozess beginnt zunächst wieder mit der Herstellung des in Abschnitt 3.2 beschriebenen Ge-VS. Anschließend wurde die Substrattemperatur auf  $T_S = 330\ \text{°C}$  abgesenkt und eine zusätzliche Ge-Schicht mit einer Dicke von  $d_{\text{Ge}} = 400\ \text{nm}$  abgeschieden. Hierdurch soll die Durchstoßversetzungsdichte im Vergleich zu den Probenserien 1.1 und 1.2 deutlich reduziert werden.

Nach der Epitaxie der zusätzlichen Ge-Schicht wurden die Messung und Regelung der Substrattemperatur auf das MIR-Pyrometer umgestellt. Mithilfe der in Abschnitt 4.4 entwickelten Regelstrategie wurde anschließend die Substrattemperatur für die Epitaxie der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht eingeregelt.

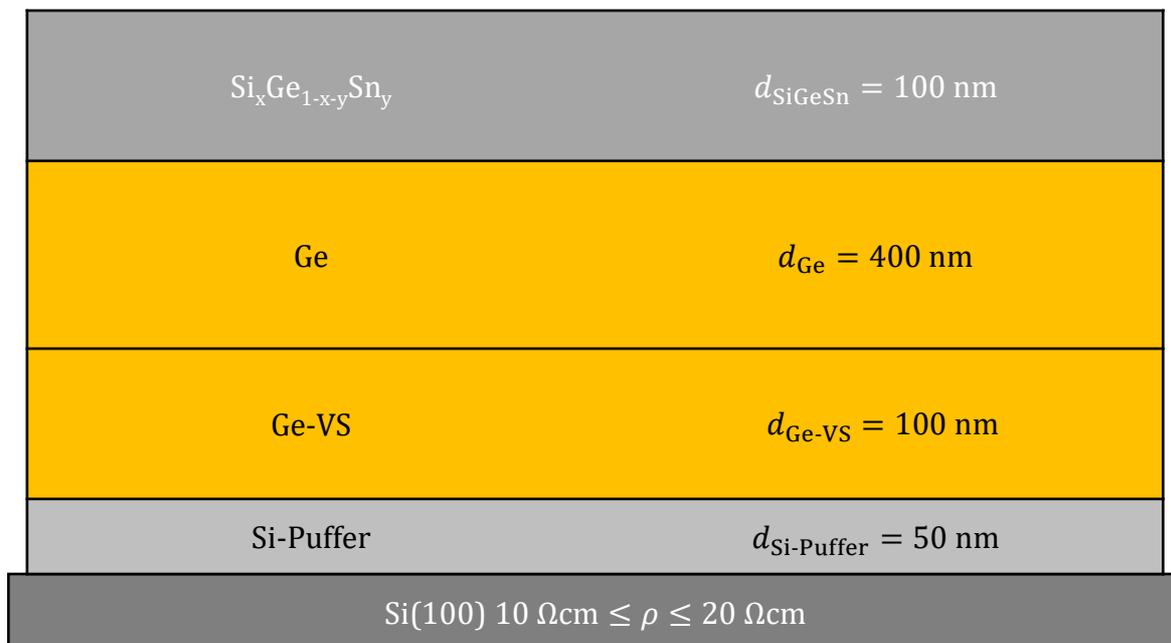


Abb. 5-1: Schematische Darstellung des Schichtstapels der Probenserie 2

Die Substrattemperatur wurde dabei zwischen  $T_S = 160 \text{ }^\circ\text{C}$  und  $T_S = 300 \text{ }^\circ\text{C}$  variiert. Es ist allerdings zu beachten, dass die Wachstumsbedingungen der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserien 1.1 und 1.2 nicht exakt reproduziert werden können, da zum damaligen Zeitpunkt keine Möglichkeit zur exakten Messung und Regelung der tatsächlichen Substrattemperatur auf der Probenoberfläche bestand. Es gibt daher keine Referenzprobe zu den  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserien 1.1 und 1.2. Die Substrattemperatur wurde schrittweise gemäß Tab. 5-1 erhöht, um eine Verbesserung der Kristallqualität zu erzielen. Eine Erhöhung der Substrattemperatur führt erfahrungsgemäß zu einer Reduktion der Punktdefekte innerhalb der Schicht und somit zu einer höheren Kristallqualität. Einerseits kann eine zu niedrige Substrattemperatur zu mehr Punktdefekten und außerdem zu Polykristallinität führen. Andererseits nimmt die Sn-Segregation mit steigender Substrattemperatur zu, was ab einem bestimmten Punkt schlussendlich zum Zusammenbruch der Epitaxie führen kann.

Das Ziel dieser Untersuchung ist demnach die optimalen Substrattemperatur als Mittelweg zwischen diesen Effekten zu finden. Eine komplette Übersicht der hergestellten Proben, deren Zusammensetzung und der Substrattemperatur während der Epitaxie der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht ist in Tab. 5-1 zusammengefasst.

<b>Probe</b>	<b><math>c_{\text{Si}}</math> (%)</b>	<b><math>c_{\text{Ge}}</math> (%)</b>	<b><math>c_{\text{Sn}}</math> (%)</b>	<b><math>T_S</math> (°C)</b>
<b>2-2.5Sn-150C</b>				150
<b>2-2.5Sn-170C</b>				170
<b>2-2.5Sn-250C</b>	9,2	88,3	2,5	250
<b>2-2.5Sn-300C</b>				300
<b>2-5.0Sn-160C</b>				160
<b>2-5.0Sn-200C</b>				200
<b>2-5.0Sn-250C</b>	18,4	76,6	5,0	250
<b>2-5.0Sn-300C</b>				300
<b>2-7.5Sn-160C</b>				160
<b>2-7.5Sn-200C</b>				200
<b>2-7.5Sn-250C</b>	27,5	65,0	7,5	250
<b>2-7.5Sn-300C</b>				300
<b>2-10.0Sn-160C</b>				160
<b>2-10.0Sn-200C</b>				200
<b>2-10.0Sn-250C</b>	36,7	53,3	10,0	250
<b>2-10.0Sn-300C</b>				300
<b>2-12.5Sn-160C</b>				160
<b>2-12.5Sn-200C</b>				200
<b>2-12.5Sn-250C</b>	45,9	41,6	12,5	250
<b>2-12.5Sn-300C</b>				300
<b>2-15.0Sn-160C</b>				160
<b>2-15.0Sn-200C</b>				200
<b>2-15.0Sn-250C</b>	55,1	29,9	15,0	250
<b>2-15.0Sn-300C</b>				300

Tab. 5-1: Vollständige Probenübersicht der Probenserie 2

Für die Epitaxie der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht wurde der Si-Fluss zunächst auf einen Wert von  $F_{\text{Si}} = 2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$  kalibriert. Der Si-ESV wurde dabei gemäß der Optimierung in Abschnitt 4.3.3 mit einem konstanten Emissionsstrom von  $I_{\text{Emiss,ESV}} = 80 \text{ mA}$  und somit einer konstanten Leistung betrieben. Aus Gleichung (4-3) folgt daraus ein Sn-Fluss von  $F_{\text{Sn}} = 5,38 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ . Zur Variation der Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht wurde anschließend der Ge-Fluss in einem Bereich von  $1,90 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1} \geq F_{\text{Ge}} \geq 1,05 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ . Durch die Änderung des Gesamtflusses  $F_{\text{SiGeSn}}$  ergibt sich variiert die Gesamtwachstumsrate in einem Bereich von  $4,87 \text{ \AA} \cdot \text{s}^{-1} \geq R_{\text{SiGeSn}} \geq 0,81 \text{ \AA} \cdot \text{s}^{-1}$ .

Zur Bewertung der Kristallqualität der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht wurden die Proben anschließend mittels XRD analysiert. Es wurde dabei von allen Proben ein  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum aufgezeichnet. Darüber hinaus wurden die Proben mit der geringsten Substrattemperatur einer Poly-Analyse (siehe Abschnitt 2.3.1) unterzogen. Von ausgewählten Proben wurde außerdem ein RSM erstellt, um den Verspannungszustand der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht zu quantifizieren.

Eine anschließende ausführliche TEM-Analyse der Proben dient zur weiteren Bewertung der Kristallqualität und Legierungshomogenität. Eine in diesem Zusammenhang durchgeführte TEM-EDXS-Analyse ausgewählter Proben erlaubt die Bestimmung der tatsächlichen Zusammensetzung. Die TEM-EDXS-Analysen wurden dabei im Rahmen einer Kooperation von Dr. Holm Kirmse an der Humboldt Universität zu Berlin durchgeführt. Zur Gegenprüfung der Ergebnisse TEM-EDXS-Analyse wurden zusätzlich RBS-Analysen durchgeführt. Diese wurden, ebenfalls im Rahmen einer Kooperation, von Oliver Steuer am Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf durchgeführt. Im Folgenden werden zunächst die Ergebnisse der XRD-Analysen für jede  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Zusammensetzung in einem separaten Abschnitt diskutiert.

## 5.2. Analyse der Kristallqualität mittels XRD

### 5.2.1. Substrattemperaturvariation der Probenteilserie 2-2.5Sn

Abb. 5-2 zeigt zunächst das  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum der Probe 2-2.5Sn-150C. Die rosafarbene Strichlinie bei  $2\theta = 66^\circ$  markiert dabei den Reflex, welcher der Ge-Pufferschicht zugeordnet werden kann.

Rechtsseitig davon ist der Reflex des Ge-VS zu erkennen. Es ist zu beachten, dass keine eindeutige Aussage getroffen werden kann, welcher Reflex mit dem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflex überlagert ist. Dies liegt vor allem an der gewünschten Gitteranpassung und der gleichzeitigen Unkenntnis der exakten Zusammensetzung.

Aus diesem Grund wurde eine Referenzprobe 2-0.0Sn-Ref hergestellt. Hierbei wurde der Epitaxieprozess nach der Abscheidung der Ge-Pufferschicht beendet, so dass die Probe keine obere  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht enthält. Das dazugehörige  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum ist ebenfalls in Abb. 5-2 zum Vergleich mit dem  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum der Probe 2-2.5Sn-150C dargestellt. Der Vergleich der Referenzprobe 2-0.0Sn-Ref erfolgt dabei nur exemplarisch mit der Probe 2-2.5Sn-150C. Im direkten Vergleich wird deutlich, dass die Dickenoszillationen im Spektrum der Referenzprobe 2-0.0Sn-Ref nicht sichtbar sind und deren Ursprung somit in der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht liegen.

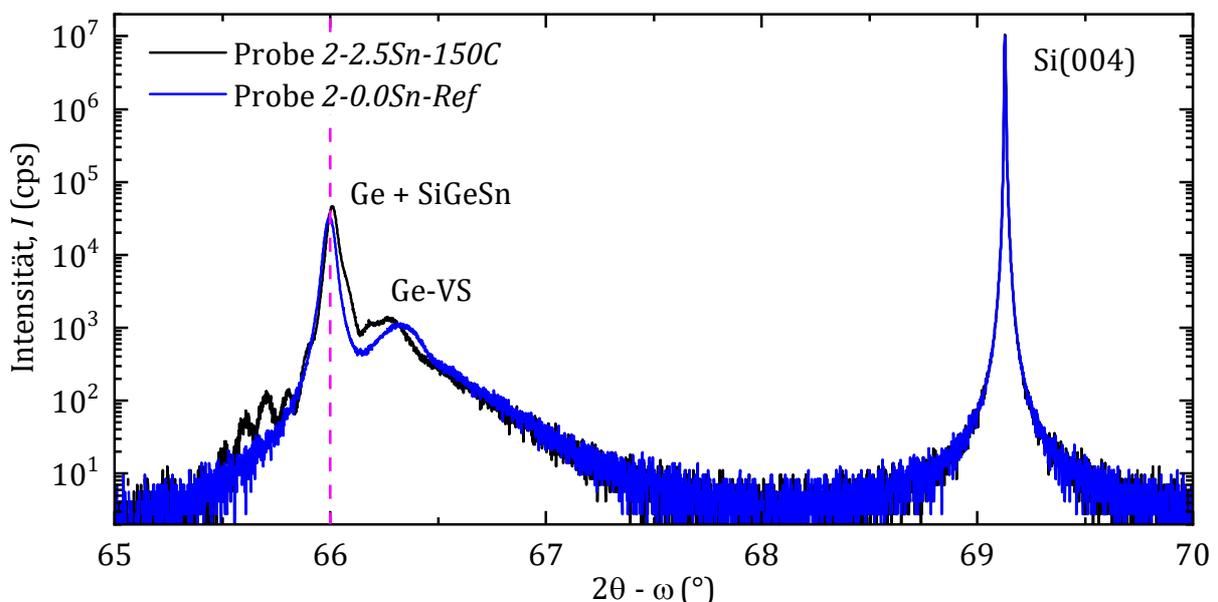


Abb. 5-2: Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probe 2-2.5Sn-150C und der Ge-Referenzprobe 2-0.0Sn-Ref ohne obere  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht.

Zur weiteren Verdeutlichung der Unterschiede wurde die Differenz der beiden Spektren gebildet, welche in Abb. 5-3 dargestellt ist. Hier ist ein einziger, deutlicher Reflex bei  $2\theta = 66,05^\circ$  erkennbar. Da dieser nur im Spektrum der Probe *2-2.5Sn-150C* enthalten ist lässt er sich eindeutig der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht zuordnen. Die Verbreiterung des Reflexes und die zusätzlichen Reflexe um diesen herum haben ihren Ursprung in den zuvor beobachteten Dickenoszillationen. Dies beweist, dass die Überlagerung des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes mit dem Ge zugehörigen Reflex bei  $\theta = 66^\circ$  in der vollständigen Darstellung in Abb. 5-2. Die Bedingung zur Gitteranpassung auf Ge ist bei dieser Probe also deutlich besser erfüllt als bei der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Probenserie 1.

Aus Gründen der Übersichtlichkeit und zum besseren Vergleich der Proben untereinander ist in den folgenden Betrachtungen dennoch stets das volle  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum dargestellt.

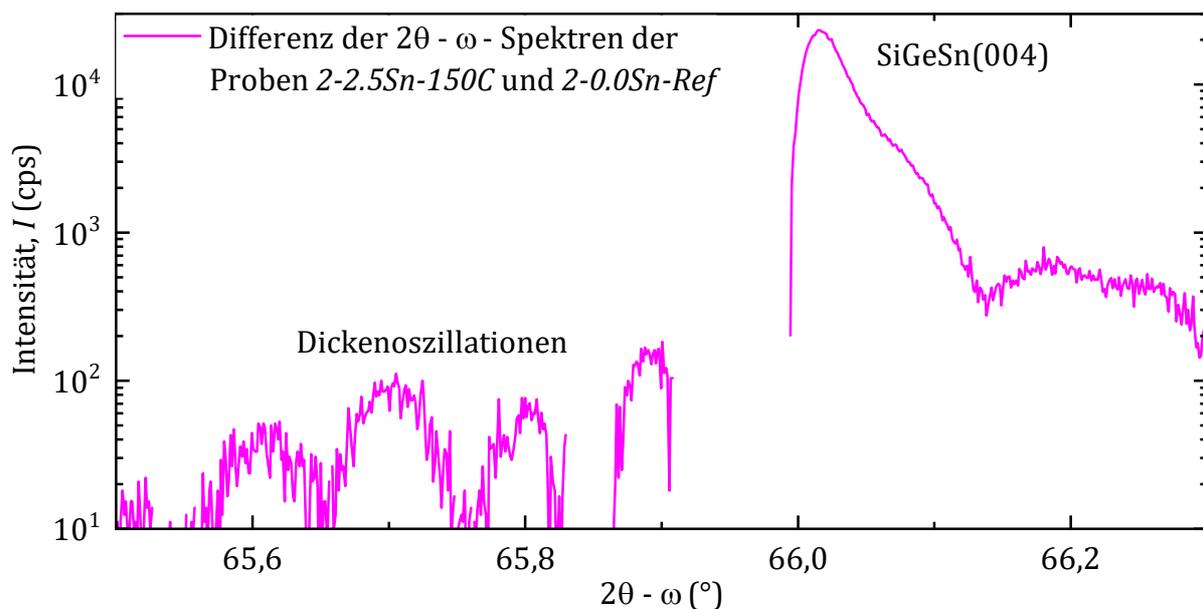


Abb. 5-3: Differenz der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Proben *2-2.5Sn-150C* und *2-0.0Sn-Ref*.

In Abb. 5-4 sind die  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Proben *2-2.5Sn* mit  $c_{\text{Sn}} = 2,5\%$  und den verschiedenen Wachstumstemperaturen zusammengefasst. Zu beachten ist hierbei, dass den Proben *2-2.5Sn-150C* und *2-2.5Sn-170C* bei  $T_S = 150^\circ\text{C}$  statt  $T_S = 160^\circ\text{C}$  und  $T_S = 170^\circ\text{C}$  statt  $T_S = 200^\circ\text{C}$  hergestellt wurden. Dies liegt daran, dass die Regelung der Substrattemperatur (siehe Abschnitt 4.4) bei diesen Proben noch nicht optimal eingestellt war. Die durchgehend zu beobachtende Überlagerung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  und der Ge zugehörigen Reflexe im Vergleich der Proben zeigt die deutlich bessere Erfüllung und

Reproduzierung der Gitteranpassung im Vergleich zu den eingangs vorgestellten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserien 1.1 und 1.2. Ein weiterer Hinweis hierauf ist, dass keine deutliche Verschiebung des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes erkennbar ist.

Die Überlagerung der Reflexe erlaubt allerdings keine Bewertung der Kristallqualität der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Schicht anhand der Reflexform. Das Vorhandensein der Dickenoszillationen ist dennoch ein Hinweis auf eine sehr gute Kristallqualität, da diese bereits bei kleinsten Versetzungsfehlern verschwinden. Positiv hervorzuheben ist außerdem die hohe in-situ Temperaturstabilität bis zu  $T_S = 300\text{ °C}$ .

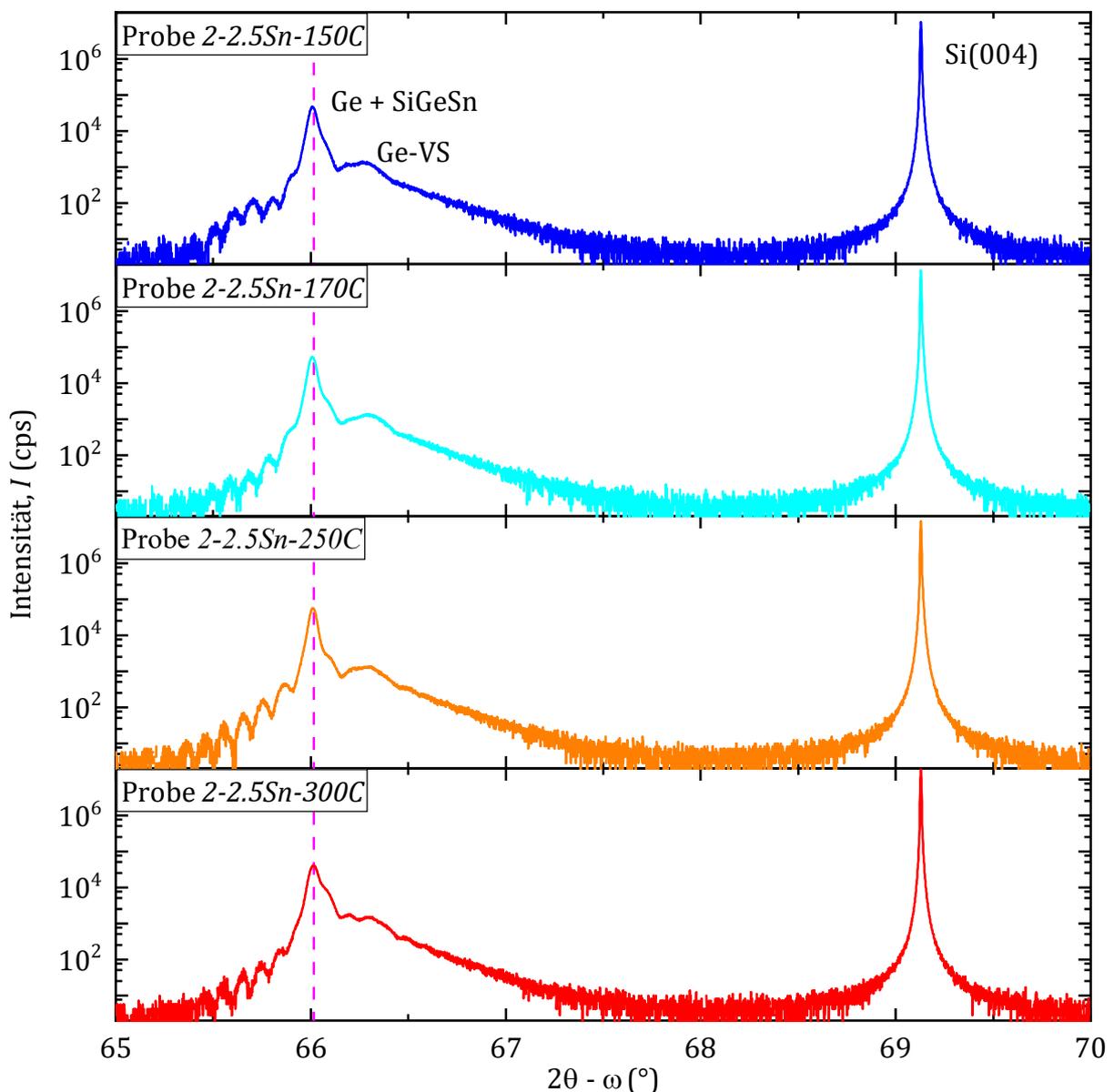


Abb. 5-4: Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probenteilserie 2-2.5Sn. Die rosafarbene Strichlinie markiert zur Verdeutlichung den Reflex, welcher der Ge-Pufferschicht zugeordnet werden kann.

Zur weiteren Bewertung der Kristallqualität ist in Abb. 5-5 das  $2\theta$ -Spektrum der Poly-Analyse der Probe *2-2.5Sn-150C* dargestellt. Es zeigt keinerlei Anzeichen von Polykristallinität bei der geringsten Substrattemperatur.

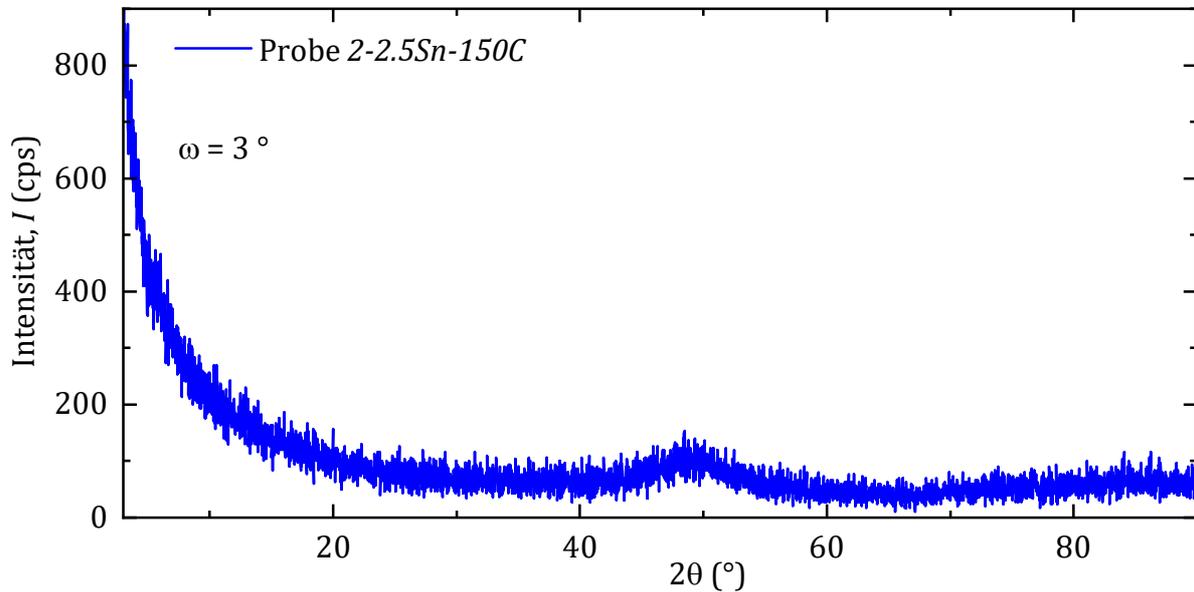


Abb. 5-5: Ergebnis der Poly-Analyse der Probe *2-2.5Sn-150C* als  $2\theta$ -Spektrum. Der Einfallswinkel beträgt  $\omega = 3^\circ$ .

Um die Gitteranpassung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht auf Ge weiter zu quantifizieren, wurde ein RSM des Si-Reflexes und des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Reflexes der Probe *2-2.5Sn-170C* aufgezeichnet. In Abb. 5-6 a) ist die Komplettübersicht aller Reflexe und in Abb. 5-6 b) die Detailansicht des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes dargestellt. Die vertikale Ausrichtung der Reflexe des Ge-VS und der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht beweist die perfekte Pseudomorphie des Schichtstapels.

Anhand der Form und Ausdehnung des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes in der Detailansicht in Abb. 5-9 b) sind zudem keine Anzeichen von Inselwachstum oder Mosaizität erkennbar, welche auf eine schlechte Kristallqualität hinweisen würden (siehe Abschnitt 2.3.1).

Die extrahierte vertikale Gitterkonstante  $a_{\perp}$  und die laterale Gitterkonstante  $a_{\parallel}$ , die daraus berechnete relaxierte Gitterkonstante  $a_0$  und die laterale Verspannung  $\varepsilon_{\parallel}$  der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht sind in Tab. 5-2 zusammengefasst.

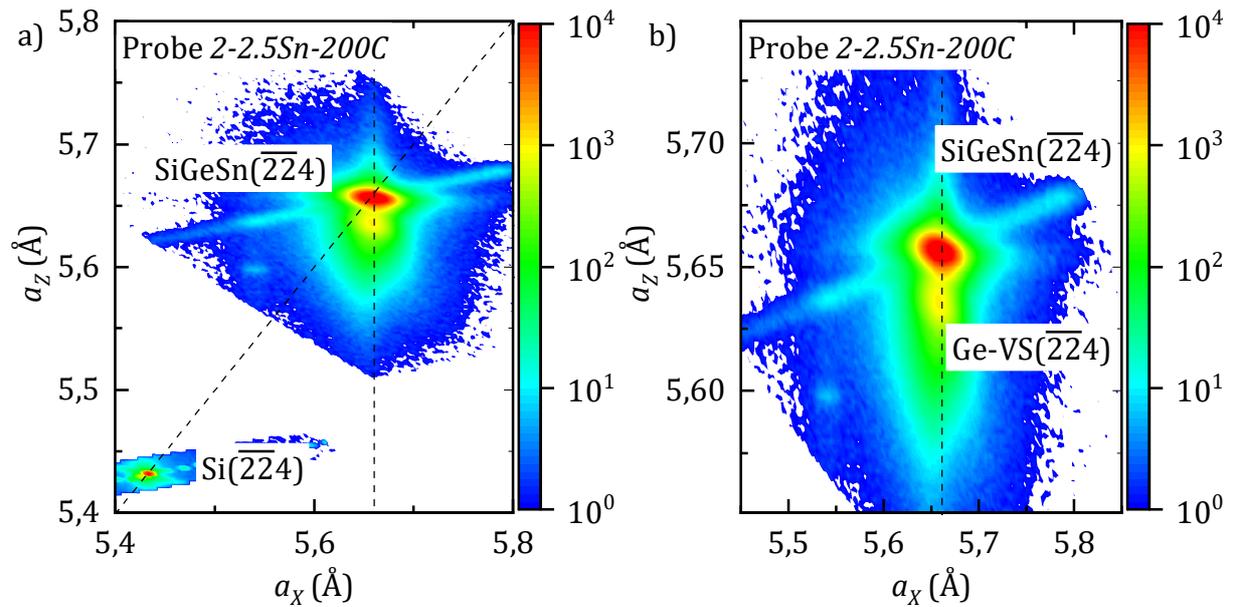


Abb. 5-6: a) Komplettübersicht der Reflexe des RSMs der Probe 2-2.5Sn-200C. b) Detailausschnitt des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes des RSMs der Probe 2-2.5Sn-200C.

Probe	Reflex	$a_{\perp}$ (Å)	$a_{\parallel}$ (Å)	$a_0$ (Å)	$\varepsilon_{\parallel}$ (%)
2-2.5Sn-170	Ge-VS	5,6371	5,6575	5,6460	0,20
	SiGeSn	5,6566	5,6580	5,6572	0,01

Tab. 5-2: Übersicht der aus der XRD-RSM-Analyse extrahierten Kristallparameter  $a_{\perp}$ ,  $a_{\parallel}$ ,  $a_0$  und  $\varepsilon_{\parallel}$  der Probe 2-2.5Sn-200C.

Die Ergebnisse bestätigen die Übereinstimmung von  $a_{0,\text{SiGeSn}} = a_{0,\text{Ge}}$  und somit die sehr gute Gitteranpassung. Dies zeigt auch die sehr geringe Verspannung von  $\varepsilon_{\parallel} = 0,01\%$ .

Zusammenfassend zeigen die Ergebnisse, dass bei dieser Zusammensetzung jede der getesteten Substrattemperaturen zu einer sehr guten Kristallqualität ohne erkennbare Sn-Segregation führen.

### 5.2.2. Substrattemperaturvariation der Probenteilserie 2-5.0Sn

Die Probenteilserie 2-5.0Sn wurde bereits mit der optimierten Regelung der Substrattemperatur hergestellt. Die angestrebten Substrattemperaturen  $T_S = 160\text{ °C}$  und  $T_S = 200\text{ °C}$  wurden daher erfolgreich eingeregelt. Zunächst wird wieder der Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren, dargestellt in Abb. 5-7, betrachtet. Die rosafarbene Strichlinie markiert wieder den Ge zugehörigen Reflex zur besseren Visualisierung von Unterschieden der

Proben. Bei dieser Zusammensetzung ist ebenfalls eine gute Gitteranpassung zu beobachten.

Bei genauer Betrachtung ist jedoch erkennbar, dass sich der Reflex des Ge-VS ab Probe 2-5.0Sn-200C leicht verändert. Eine mögliche Erklärung ist die Verschiebung des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes. Offenbar nimmt die Reproduzierbarkeit nach ungefähr fünf Proben ab und die Flussverhältnisse zur Gitteranpassung verschieben sich geringfügig. Die Variationen der Gitteranpassung ist dennoch deutlich geringer als es mit der aktiven Regelung des Si-Flusses mittels QMS in Abschnitt 4.3.2 zu beobachten war.

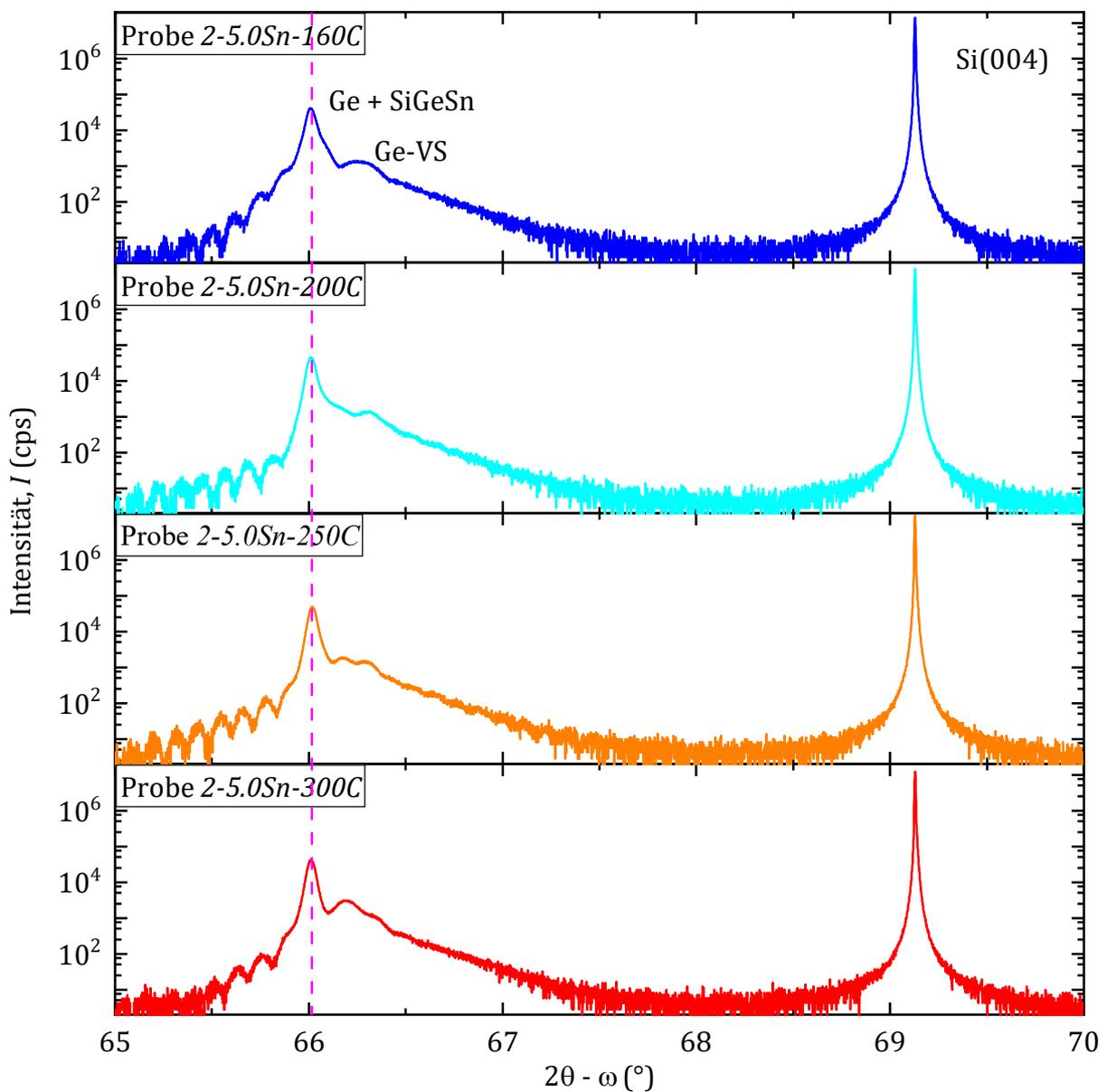


Abb. 5-7: Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probenteilserie 2-5.0Sn. Die rosafarbene Strichlinie markiert zur Verdeutlichung den Reflex, welcher der Ge-Pufferschicht zugeordnet werden kann.

Es sei an dieser Stelle jedoch ausdrücklich darauf hingewiesen, dass sich nicht die Position des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes ändert. Bei näherer Betrachtung des  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrums im Bereich  $65^\circ \leq \theta \leq 66^\circ$  ist deutlich zu erkennen, dass sich die Dickenoszillationen in ihrer Anzahl und Periodizität unterscheiden. Die sichtbaren Unterschiede im Bereich des Ge-VS zugehörigen Reflexes sind demnach auch auf die unterschiedliche Ausprägung der Dickenoszillationen und deren Überlagerung mit dem Ge-VS zugehörigen Reflex zurück-zuführen.

Offensichtlich ist der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörige Reflex bei allen Proben der Probenteilserie 2-5.0Sn mit dem Reflex der zusätzlichen Ge-Pufferschicht überlagert. Das Fehlen weiterer Reflexe im Bereich  $66,2^\circ \leq \theta \leq 69,1^\circ$  zeigt, dass es hier keine Anzeichen für eine überhöhte Sn-Segregation und der daraus folgenden Zerlegung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Legierung gibt. Die Temperaturstabilität ist daher auch bei dieser Zusammensetzung bis zu  $T_S = 300^\circ\text{C}$  bemerkenswert.

Zum Ausschluss eventuell vorhandener Poly-Kristallinität bei der geringsten Substrattemperatur  $T_S = 160^\circ\text{C}$  wurde auch hier eine Poly-Analyse der Probe 2-5.0-160C durchgeführt. Die Ergebnisse der Poly-Analyse sind im  $2\theta$ -Spektrum in Abb. 5-8 dargestellt. Es sind dabei, wie schon zuvor bei der Probenteilserie 2-2.5Sn -160C, keine Anzeichen von Poly-Kristallinität erkennbar.

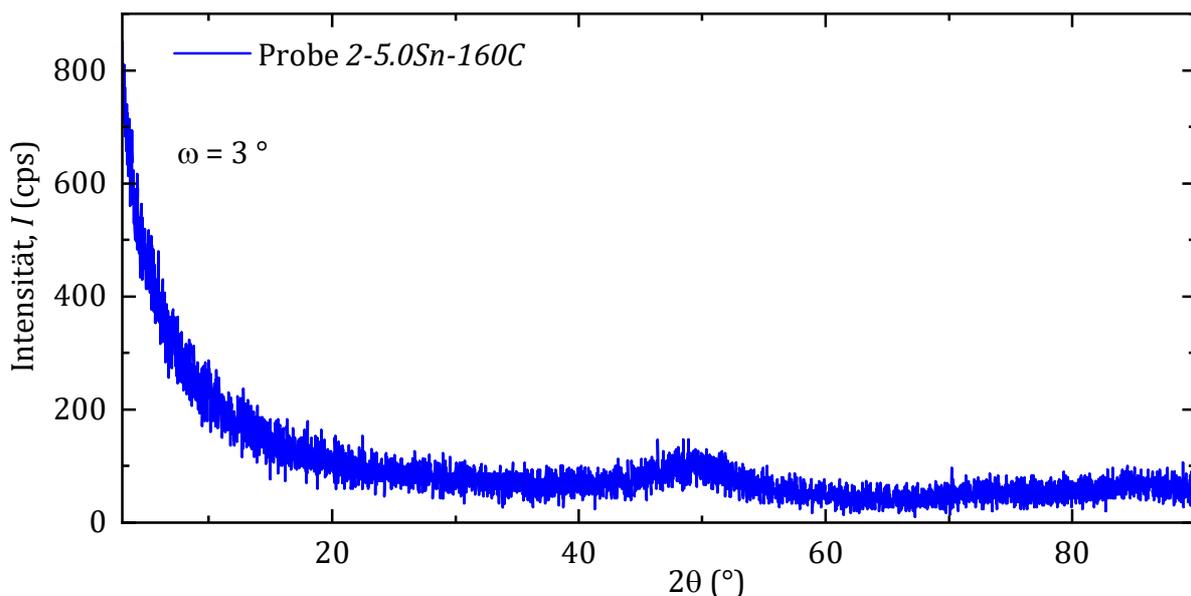


Abb. 5-8: Ergebnis der Poly-Analyse der Probe 2-5.0Sn-160C als  $2\theta$ -Spektrum. Der Einfallswinkel beträgt  $\omega=3^\circ$ .

Zur weiteren Analyse des Verspannungszustands der Probe *2-5.0Sn-200C* wurde wieder ein RSM aufgezeichnet. Die Übersicht der gemessenen Reflexe und der detaillierte Ausschnitt des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes sind in Abb. 5-9 a) und b) dargestellt.

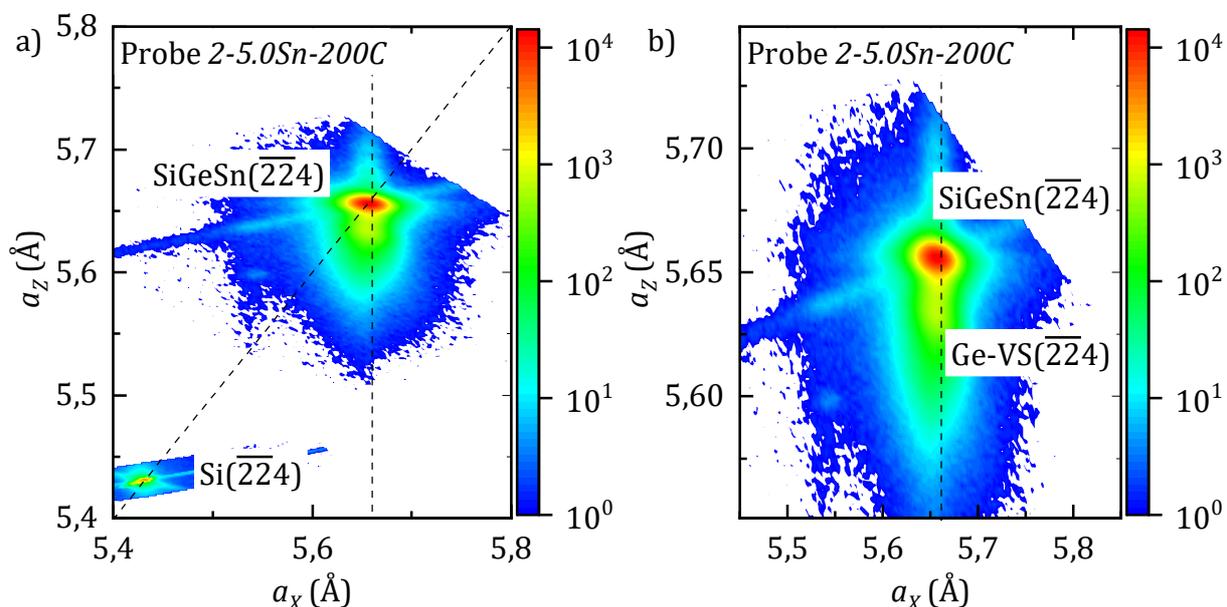


Abb. 5-9: a) Komplettübersicht der Reflexe des RSMs der Probe *2-5.0Sn-200C*. b) Detailausschnitt des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes des RSMs der Probe *2-5.0Sn-200C*.

Es zeigt sich auch bei dieser Probe eine perfekte vertikale Ausrichtung des Ge-VS zugehörigen und des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes. Auch bei dieser Probe *2-5.0Sn-200C* zeigen sich keine Anzeichen für Inselwachstum oder Mosaizität anhand der Form und Ausdehnung des Reflexes. Die Kristallparameter  $a_{\parallel}$ ,  $a_{\perp}$ ,  $a_0$  und  $\epsilon_{\parallel}$  der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht wurden auch hier aus den Ergebnissen des RSMs extrahiert und sind in Tab. 5-3 zusammengefasst. Bei dieser Zusammensetzung ist ebenfalls keine Phasenseparation der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Schicht während des Epitaxieprozesses zu beobachten. Diese Zusammensetzung zeigte allerdings bei der Voruntersuchung auch eine post-epitaktische Temperaturstabilität bis  $T = 680\text{ °C}$ . Es führt folglich wie bei der vorigen Zusammensetzung jede getestete Substrattemperatur zu einer guten Kristallqualität.

Probe	Reflex	$a_{\perp}$ (Å)	$a_{\parallel}$ (Å)	$a_0$ (Å)	$\epsilon_{\parallel}$ (%)
2-5.0Sn-200C	Ge-VS	5,6404	5,6547	5,6466	0,14
	SiGeSn	5,6558	5,6560	5,6559	0,00

Tab. 5-3: Übersicht der aus der XRD-RSM-Analyse extrahierten Kristallparameter  $a_{\perp}$ ,  $a_{\parallel}$ ,  $a_0$  und  $\epsilon_{\parallel}$  der Probe *2-5.0Sn-200C*.

## 5.2.3. Substrattemperaturvariation der Probenteilserie 2-7.5Sn

In Abb. 5-10 ist wieder der Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren zur qualitativen Bewertung und Diskussion der verwendeten Epitaxieparameter dargestellt.

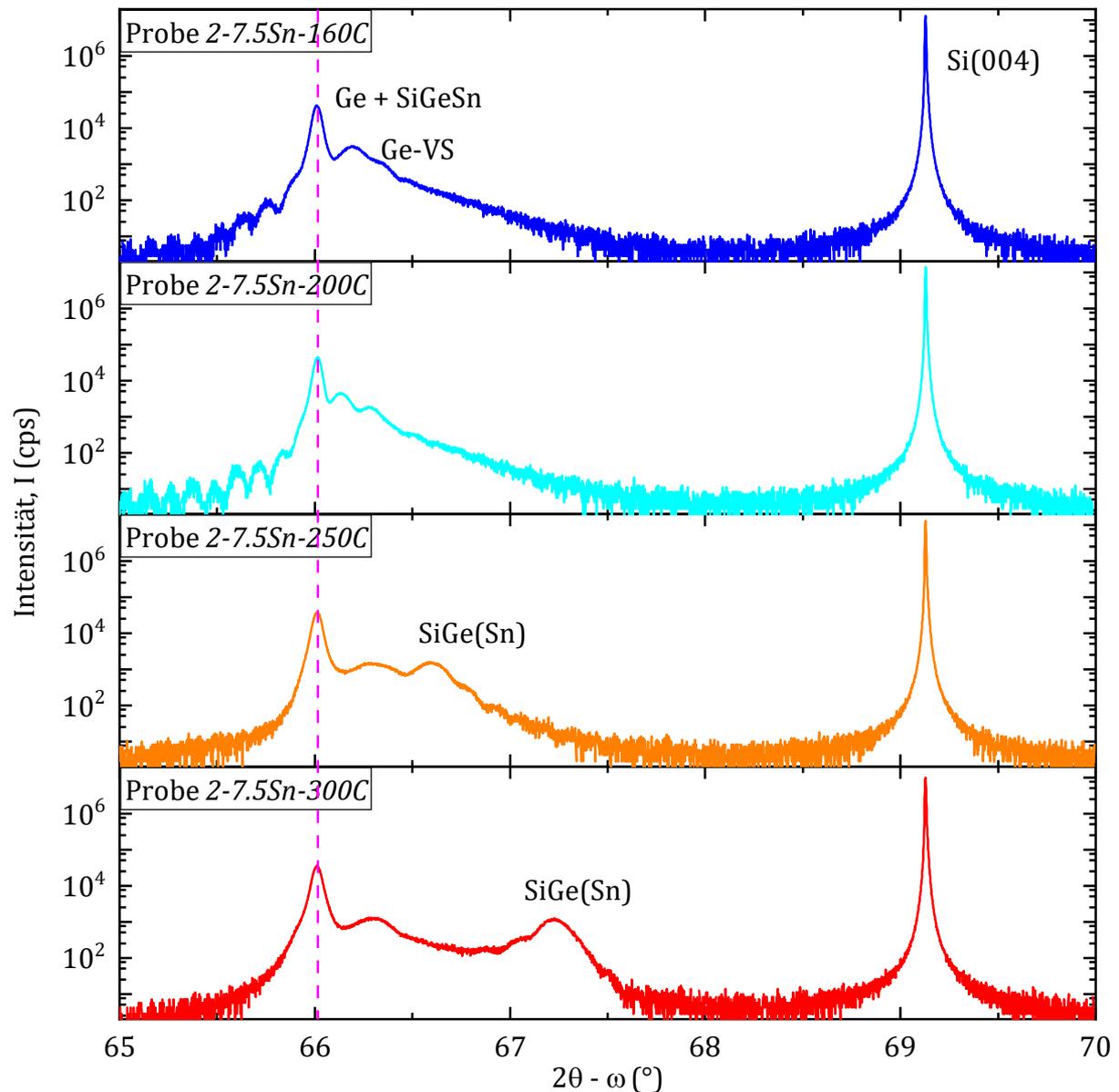


Abb. 5-10: Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probenteilserie 2-7.5Sn. Die rosafarbene Strichlinie markiert zur Verdeutlichung den Reflex, welcher der Ge-Pufferschicht zugeordnet werden kann.

Die Ergebnisse unterscheiden sich dabei deutlich von den beiden Probenteilserien 2-2.5Sn und 2-5.0Sn. Bis zu einer Substrattemperatur von  $T_S = 200^\circ\text{C}$  sind Dickenoszillationen der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Schicht, als Hinweis auf eine sehr gute Kristallqualität, zu erkennen. Ab  $T_S = 250^\circ\text{C}$  verschiebt sich jedoch der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörige Reflex hin zu größeren Winkeln. Die Position entspricht einer höheren Si-Konzentration bzw. einer

niedrigeren Sn-Konzentration in der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Schicht. Dies ist auf eine deutlich erhöhte Segregation und somit reduzierten Einbau von Sn zurückzuführen.

Gleichzeitig nimmt die Intensität der Dickenoszillationen stark ab, was auf die Ausbildung erster Versetzungen und Defekte an der Grenzfläche zwischen Ge und SiGeSn hinweist. Es sind lediglich noch leichte Ansätze von Dickenoszillationen zwischen  $66,9^\circ \leq \theta \leq 67,5^\circ$  erkennbar.

Bei einer weiteren Erhöhung der Substrattemperatur bei Probe *2-7.5Sn-300C* auf  $T_S = 300^\circ\text{C}$  nimmt die Sn-Segregation weiter drastisch zu bis nahezu kein Sn mehr eingebaut wird. Der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörige Reflex verschiebt sich daher weiter zu größeren Winkeln. Gleichzeitig verbreitert sich der Reflex immer weiter, was auf eine zunehmende Inhomogenität der Schicht hinweist. Die Dickenoszillationen sind bei dieser Probe nun gänzlich verschwunden.

Das segregierte Sn ist nach dem Epitaxieprozess auf der Probenoberfläche in Form von metallischen  $\beta$ -Sn Tropfen zu finden. Dies ist auf die Cluster-Bildung aufgrund der hohen Oberflächendiffusionslängen bei diesen Substrattemperaturen zurückzuführen. Da die  $\alpha$ -Sn Phase nur bis  $T = 13,2^\circ\text{C}$  stabil ist, formt das Sn auf der Oberfläche  $\beta$ -Sn-Cluster in Tropfenform. Die dadurch verursachte Oberflächenrauigkeit ist bereits mit bloßem Auge zu erkennen. Eine Mikroskopieaufnahme der Oberfläche der Probe *2-7.5Sn-300C* in Abb. 5-11 a) zeigt die Größe und Form der Tropfenstrukturen. Zum Vergleich ist eine Mikroskopieaufnahme der Oberfläche der Probe *2-7.5Sn-200C* in Abb. 5-11 b). Hier sind keine Tropfenstrukturen erkennbar.

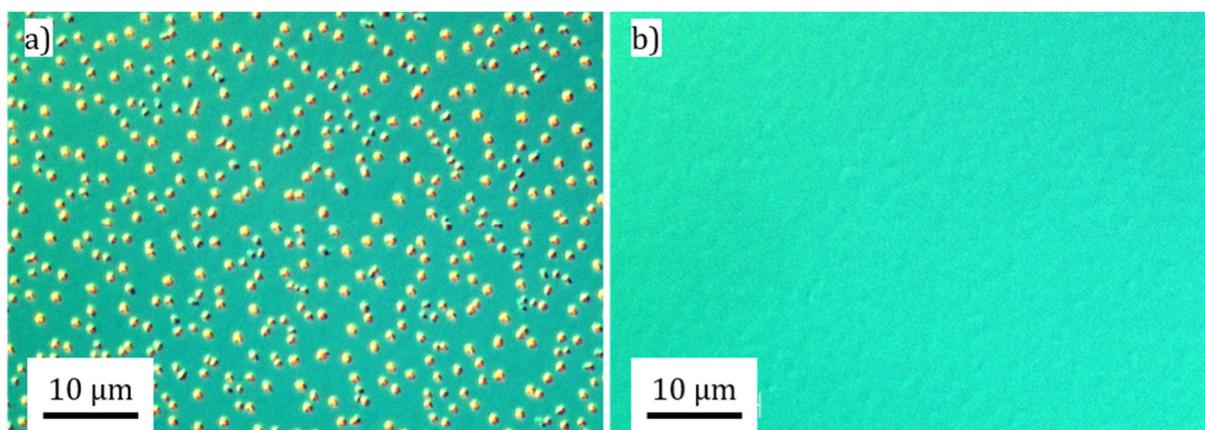


Abb. 5-11: a) Mikroskopieaufnahme der Oberfläche der Probe *2-7.5Sn-300C*, b) Mikroskopieaufnahme der Oberfläche der Probe *2-7.5Sn-200C*.

Im nächsten Schritt werden die Ergebnisse der Poly-Analyse der Probe *2-7.5Sn-160C* mit der geringsten Substrattemperatur  $T_S = 160\text{ °C}$  im  $2\theta$ -Spektrum in Abb. 5-12 betrachtet. Wie bei den vorigen Zusammensetzungen gibt es auch hier keinerlei Anzeichen für Polykristallinität. Da eine höhere Substrattemperatur jedoch, wie bereits erwähnt, eine Verbesserung der Kristallqualität bewirkt ist folglich  $T_S = 200\text{ °C}$  die optimale Substrattemperatur für die Epitaxie von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  in dieser Zusammensetzung.

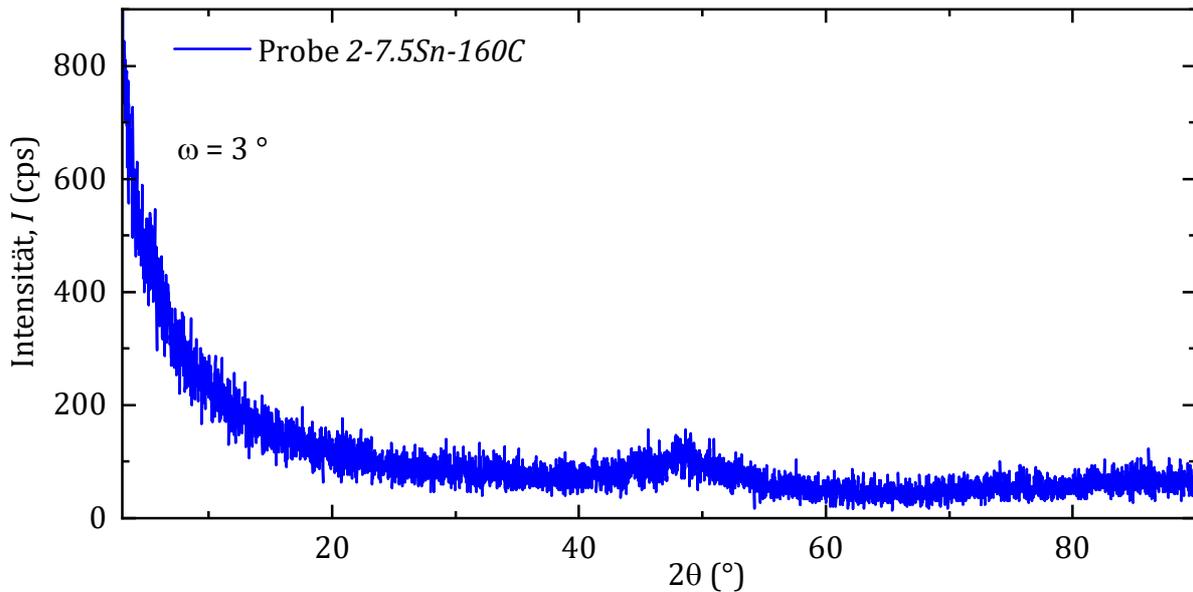


Abb. 5-12: Ergebnis der Poly-Analyse der Probe *2-7.5Sn-160C* als  $2\theta$ -Spektrum. Der Einfallswinkel beträgt  $\omega=3^\circ$ .

Es wurde auch hier von der Probe *2-7.5Sn-200C* ein RSM Spektrum aufgezeichnet. Abb. 5-13 a) zeigt die Übersicht der gemessenen Reflexe und Abb. 5-13 b) den Detailausschnitt des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes.

Der einzelne sichtbare Reflex in der Detailansicht liegt genau auf der Gitterkonstante von Ge. Dies ist ein Beweis für die perfekte Anpassung der Gitterkonstante der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Schicht auf Ge. Die Ausdehnung des Reflexes zeigt außerdem, dass es keine Anzeichen von Inselwachstum oder Mosaizität gibt, die auf eine schlechte Kristallqualität hinweisen würden. In Tab. 5-4 sind die extrahierten Kristallparameter abschließend zusammengefasst.

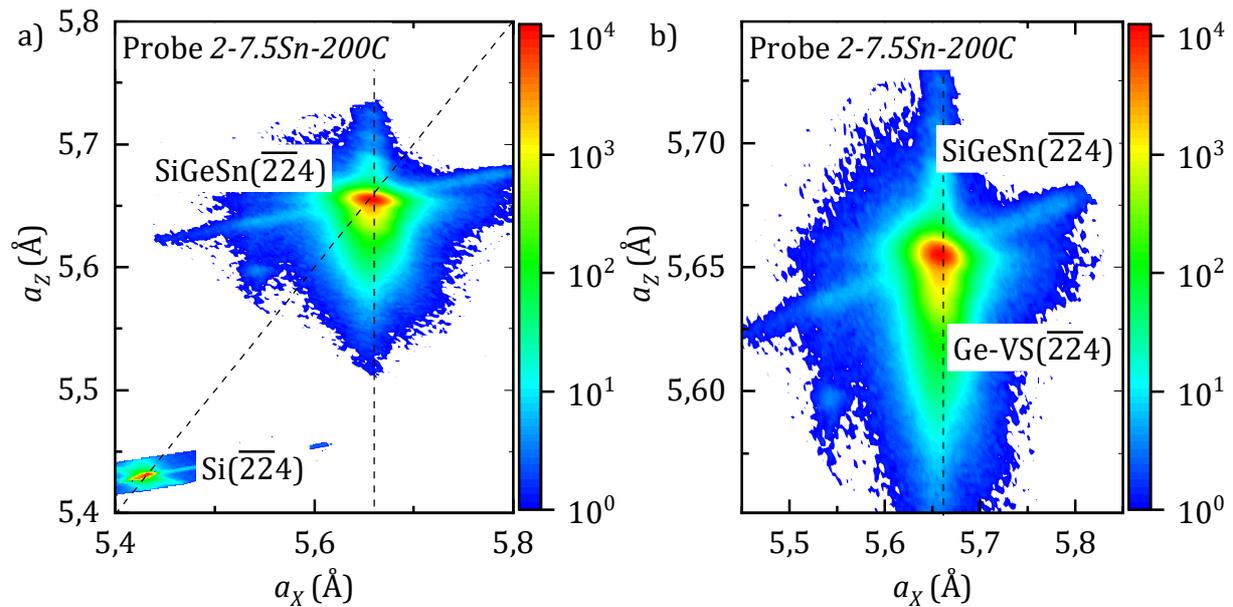


Abb. 5-13: Komplettübersicht der Reflexe des RSMs der Probe 2-7.5Sn-200C. b) Detailausschnitt des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes des RSMs der Probe 2-7.5Sn-200C.

Probe	Reflex	$a_{\perp}$ (Å)	$a_{\parallel}$ (Å)	$a_0$ (Å)	$\epsilon_{\parallel}$ (%)
2-5.0Sn-200C	Ge-VS	5,6404	5,6547	5,6466	0,14
	SiGeSn	5,6558	5,6560	5,6559	0,00

Tab. 5-4: Übersicht der aus der XRD-RSM-Analyse extrahierten Kristallparameter  $a_{\perp}$ ,  $a_{\parallel}$ ,  $a_0$  und  $\epsilon_{\parallel}$  der Probe 2-7.5Sn-200C.

#### 5.2.4. Substrattemperaturvariation der Probenteilserie 2-10.0Sn

Im nächsten Schritt wird die Probenteilserie 2-10.0Sn analysiert. Es wird erneut der Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren in Abb. 5-14 betrachtet.

Für die Proben 2-10.0Sn-160C mit  $T_S = 160$  °C und 2-10.0Sn-200C mit  $T_S = 200$  °C sind auch hier Dickenoszillationen als Indikator der sehr guten Kristallqualität zu beobachten. Wie schon zuvor bei der Probenteilserie 2-7.5Sn beobachtet, nimmt die Sn-Segregation ab einer Substrattemperatur von  $T_S = 250$  °C jedoch deutlich zu. Durch den somit verringerten Einbau von Sn in die Kristallmatrix verschiebt sich der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörige Reflex deshalb hin zu größeren Winkeln  $2\theta$ . Es ist dabei zu beachten, dass der Reflex deutlich weiter verschoben ist als bei der Probenteilserie 2-7.5Sn. Dies ist auf die höhere prozentuale Si-Konzentration in dieser Zusammensetzung zurückzuführen. Die Segregation des Sn führt folglich zu einer Si-reicheren  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Schicht. Darüber hinaus zeigt die Probe 2-10.0Sn-250C kaum noch Anzeichen von Dickenoszillationen.

Bei Probe *2-10.0Sn-300C* mit  $T_S = 300\text{ °C}$  hat die Sn-Segregation nochmals deutlich zugenommen, wodurch sich der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörige Reflex weiter zu größeren Winkeln  $2\theta$  verschiebt. Darüber hinaus kommt es zu einer deutlichen Verbreiterung des Reflexes durch eine erhöhte Schichtinhomogenität.

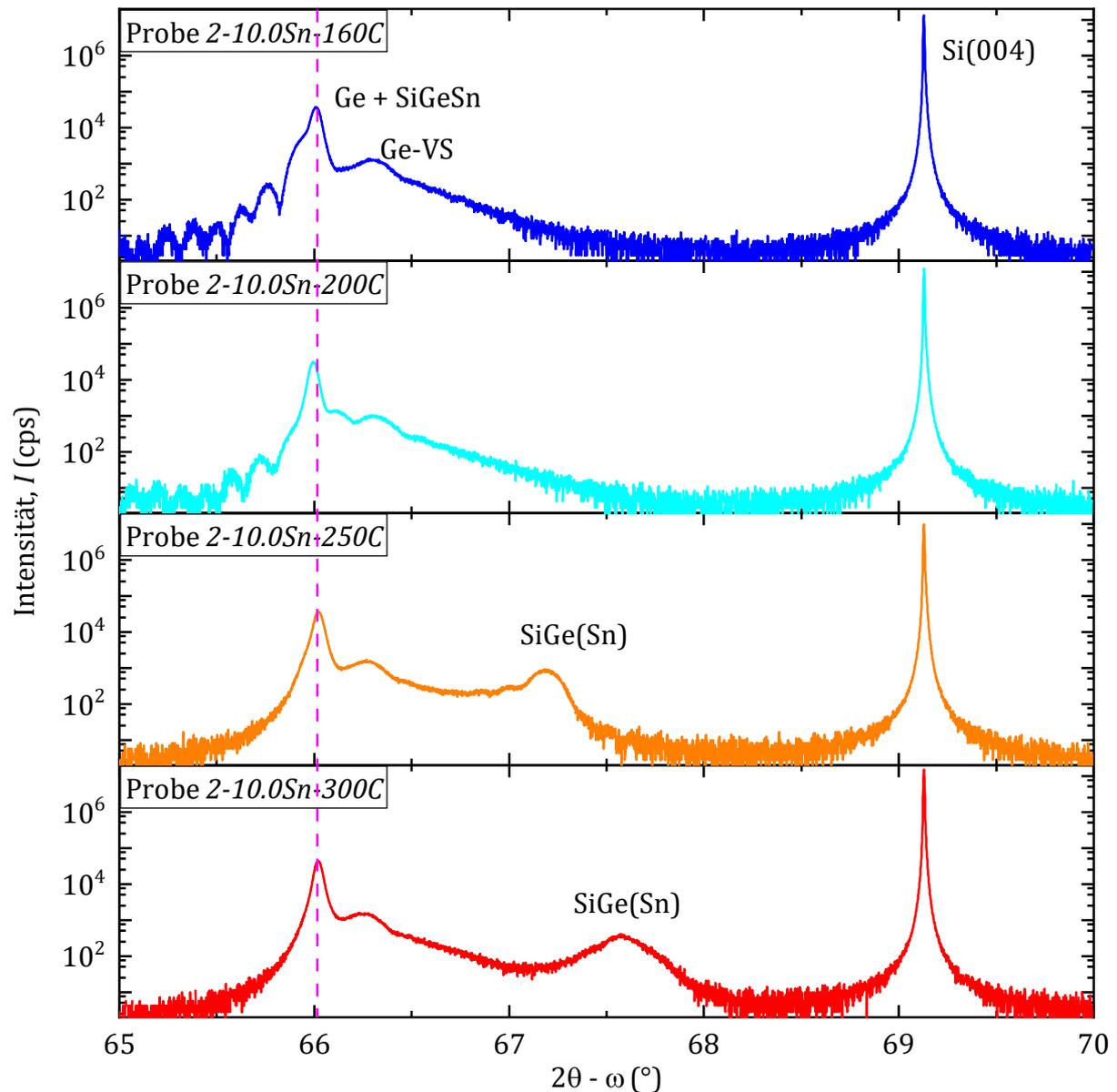


Abb. 5-14: Vergleich der  $2\theta - \omega$ -Spektren der Probenteilserie *2-10.0Sn*. Die rosafarbene Strichlinie markiert zur Verdeutlichung den Reflex, welcher der Ge-Pufferschicht zugeordnet werden kann.

Die Ergebnisse der Poly-Analyse der Probe *2-10.0Sn-160C* im  $2\theta$ -Spektrum in Abb. 5-15 zeigen auch bei dieser Zusammensetzung keinerlei Anzeichen von Polykristallinität.

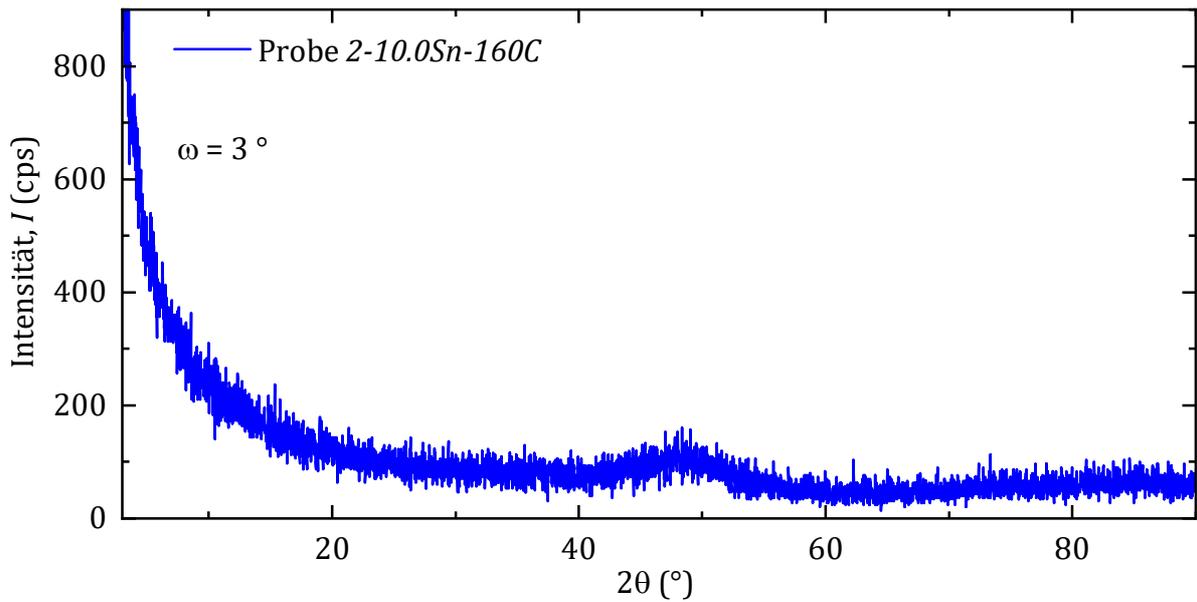


Abb. 5-15: Ergebnis der Poly-Analyse der Probe 2-10.0Sn-160C als 2θ-Spektrum.

Abschließend wurde auch hier von der Probe 2-10.0Sn-200C zur weiteren Quantifizierung des Spannungszustandes ein RSM aufgezeichnet. Die Übersicht der Reflexe in Abb. 5-16 a) und die Detailansicht des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes in Abb. 5-16 b) stellen die Ergebnisse zusammenfassend dar.

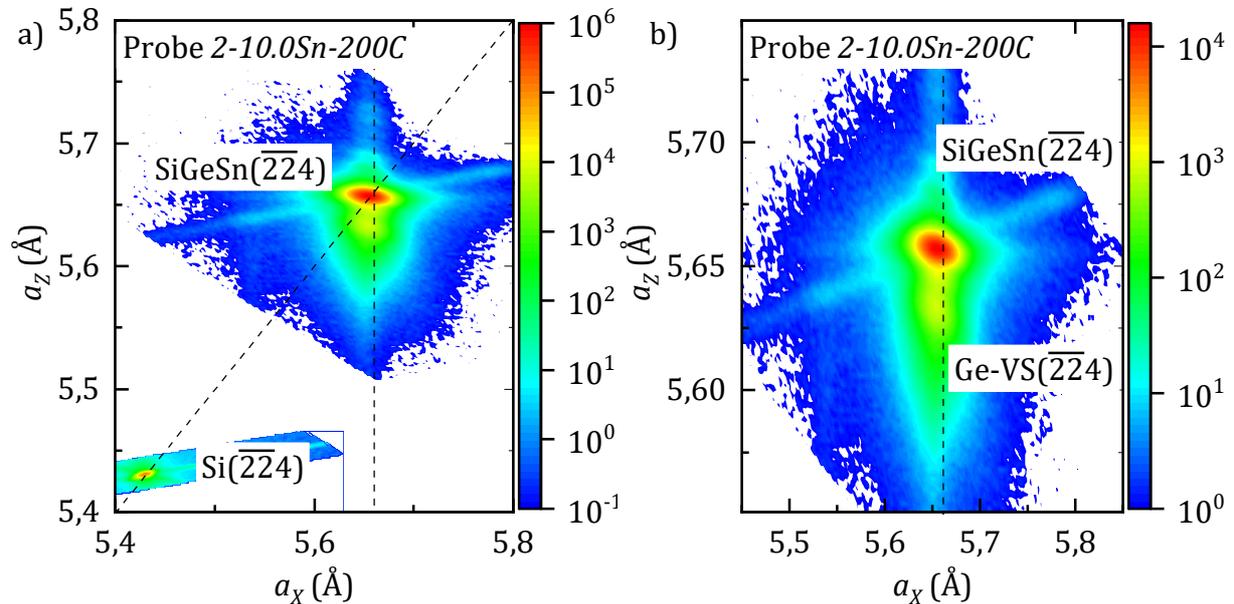


Abb. 5-16: Komplettübersicht der Reflexe des RSMs der Probe 2-10.0Sn-200C. b) Detailausschnitt des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes des RSMs der Probe 2-10.0Sn-200C.

Wie bereits bei den vorigen Proben beobachtet zeigt sich auch hier eine perfekte vertikale Ausrichtung des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  und des Ge-VS zugehörigen Reflexes. Dies beweist die perfekte Pseudomorphie des Schichtstapels.

Die aus dem RSM extrahierten Kristallparameter der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht und des Ge-VS sind in Tab. 5-5 zusammengefasst. Wie zuvor bei den Proben *2-2.5Sn-200C*, *2-5.0Sn-200C* und *2-7.5Sn-200C* ist die SiGeSn-Schicht der Probe *2-10.0Sn-200C* nahezu verspannungsfrei mit einer sehr geringen kompressive Restverspannung von  $\epsilon_{\parallel} = -0,03$ .

Probe	Reflex	$a_{\perp}$ (Å)	$a_{\parallel}$ (Å)	$a_0$ (Å)	$\epsilon_{\parallel}$ (%)
<b>2-10.0Sn-200C</b>	Ge-VS	5,6352	5,6539	5,6433	0,19
	SiGeSn	5,6573	5,6541	5,6559	-0,03

Tab. 5-5: Übersicht der aus der XRD-RSM-Analyse extrahierten Kristallparameter  $a_{\perp}$ ,  $a_{\parallel}$ ,  $a_0$  und  $\epsilon_{\parallel}$  der Probe *2-10.0Sn-200C*.

### 5.2.5. Temperaturvariation der Probenteilserie *2-12.5Sn*

Bei der Probenteilserie *2-12.5Sn* kam es durch einen Schaden in der Anlagensteuerung des Si-ESVs mit anschließender Reparatur zu einer Abweichung des tatsächlichen Si-Flusses vom angestrebten Wert. Dies führte folglich zu einer Nichterfüllung der Gitteranpassung auf Ge. Der Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren in Abb. 5-17 zeigt daher deutlich die Verschiebung des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes der Probe *2-12.5Sn-160C*. Dadurch sind zum ersten Mal die Reflexe der Schichten einzeln erkennbar. Der Ge-VS zugehörige Reflex von Probe *2-12.5Sn-160C* hat dabei eine ähnliche Intensität wie bei den vorherigen Proben. Es ist ein weiterer Hinweis darauf, dass der Reflex der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Schicht mit dem Reflex der zusätzlichen Ge-Schicht überlagert ist. Um die Gitteranpassung zu verbessern wurde der Si-Fluss bei Probe *2-12.5Sn-200C* leicht erhöht. Die höhere Intensität des Ge-VS zugehörigen Reflexes beweist die Überlagerung des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes mit dem des Ge-VS. Für die nachfolgenden Proben wurde der Si-Fluss daher durch zusätzliche Kalibrierschichten nachkalibriert.

Dennoch zeigen die Proben *2-12.5Sn-160C* mit  $T_S = 160$  °C und *2-12.5Sn-200C* mit  $T_S = 200$  °C deutliche Dickenoszillationen als Beweis für die gute Kristallqualität. Ab einer Substrattemperatur von  $T_S = 250$  °C bei Probe *2-12.5Sn-250C* ist erneut die Auswirkung der erhöhten Sn-Segregation zu erkennen. Der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörige Reflex verschiebt sich hier zu einem Winkel von ca.  $2\theta = 67,6$  °. Die Dickenoszillationen verschwinden bei dieser Zusammensetzung bereits gänzlich ab  $T_S = 250$  °C.

Bei Probe 2-12.5Sn-300C verschiebt sich der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörige Reflex erwartungsgemäß weiter zu größeren Winkeln durch die hohe Sn-Segregation. Zudem ist auch hier eine deutliche Verbreiterung des Reflexes bei gleichzeitiger Intensitätsabnahme zu beobachten.

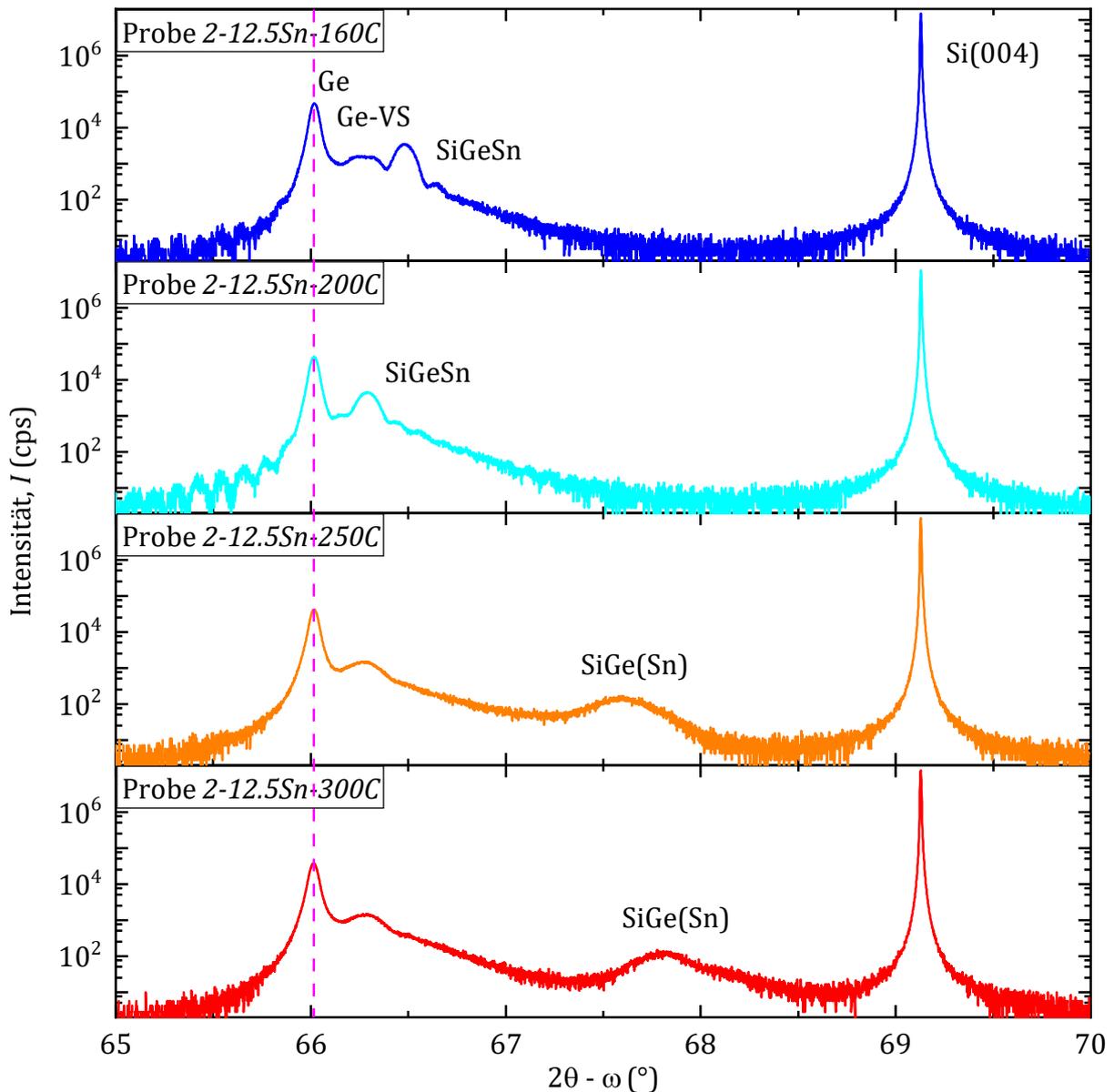


Abb. 5-17: Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probenteilerie 2-12.5Sn. Die rosafarbene Strichlinie markiert zur Verdeutlichung den Reflex, welcher der Ge-Pufferschicht zugeordnet werden kann.

Die Ergebnisse der Poly-Analyse der Probe 2-12.5Sn-160C ist im  $2\theta$ -Spektrum in Abb. 5-18 dargestellt. Bei dieser Probe sind ebenfalls keinerlei Anzeichen von Poly-Kristallinität der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht erkennbar.

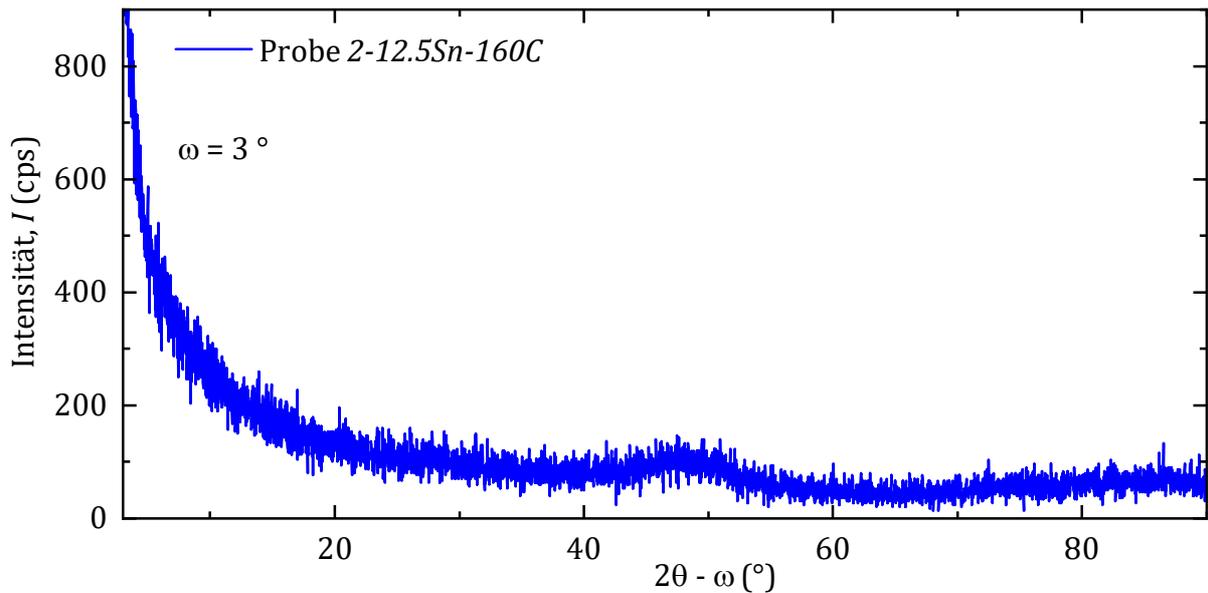


Abb. 5-18: Ergebnis der Poly-Analyse der Probe 2-12.5Sn-160C als  $2\theta$ -Spektrum.

Aufgrund der Abweichung der Gitteranpassung wurde der Verspannungszustand bei beiden Proben 2-12.5Sn-160C und 2-12.5Sn-200C mittels RSM-Analyse quantifiziert. Die Ergebnisse der Probe 2-12.5Sn-160C sind im Übersichtsspektrum in Abb. 5-19 a) und in der Detailansicht Abb. 5-19 b) zusammengefasst.

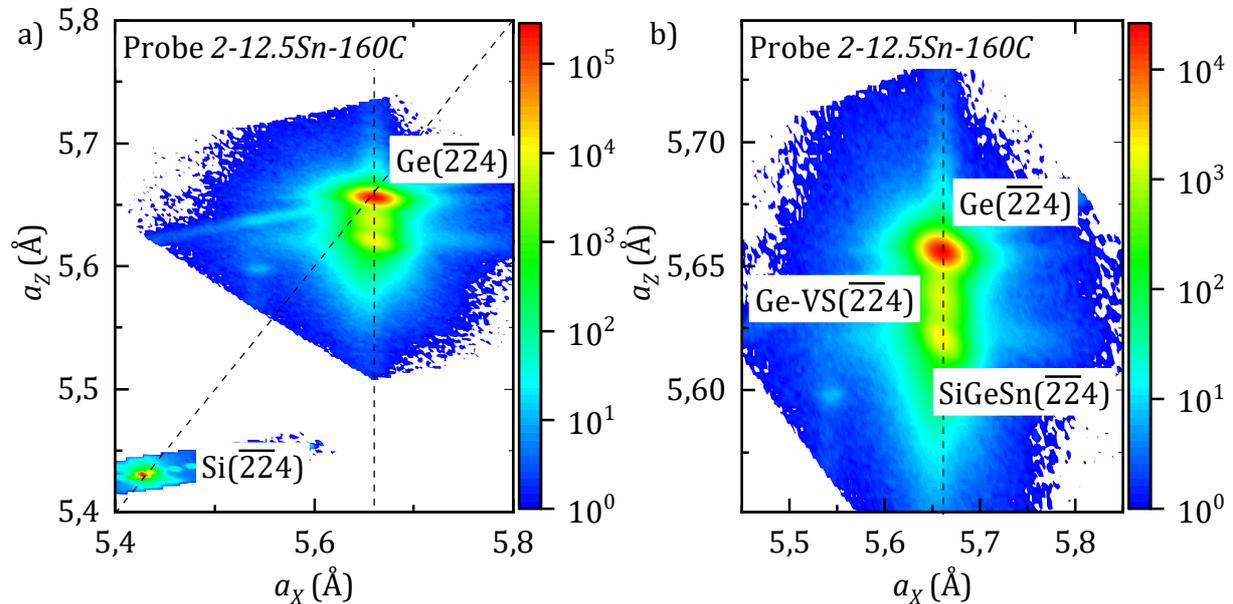


Abb. 5-19: Komplettübersicht der Reflexe des RSMs der Probe 2-12.5Sn-160C. b) Detailausschnitt des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes des RSMs der Probe 2-12.5Sn-160C.

Die Detailansicht zeigt, dass trotz der Gitterfehlانpassung der gesamte Schichtstapel perfekt pseudomorph ist. Die Form des Reflexes weist auch hier auf eine gute Kristallqualität hin.

Zusätzlich sind in Tab. 5-6 die extrahierten Kristallparameter des Schichtstapels aufgelistet. Die  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht weist eine relaxierte Gitterkonstante von  $a_0 = 5,6379 \text{ \AA} < a_{\text{Ge}}$  auf. Die resultierende tensile Verspannung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht beträgt  $\varepsilon_{\parallel, \text{SiGeSn}} = 0,37 \%$ . Die Übereinstimmung der lateralen Gitterkonstanten  $a_{\parallel, \text{Ge}} = a_{\parallel, \text{SiGeSn}}$  beweist dennoch die Pseudomorphie der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht.

Probe	Reflex	$a_{\perp}$ (Å)	$a_{\parallel}$ (Å)	$a_0$ (Å)	$\varepsilon_{\parallel}$ (%)
2-12.5Sn-200C	Ge	5,6562	5,6588	5,6573	0,03
	SiGeSn	5,6217	5,6589	5,6379	0,37
	Ge-VS	5,6351	5,6566	5,6444	0,21

Tab. 5-6: Übersicht der aus der XRD-RSM-Analyse extrahierten Kristallparameter  $a_{\perp}$ ,  $a_{\parallel}$ ,  $a_0$  und  $\varepsilon_{\parallel}$  der Probe 2-12.5Sn-160C.

Abb. 5-20 a) und b) zeigen die Übersicht und die Detailansicht der RSM-Spektren der Probe 2-12.5Sn-200C. Auch hier ist eine perfekte Pseudomorphie und eine gute Kristallqualität anhand der Reflexform zu erkennen. Im Vergleich zum  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum der Probe sei nochmal auf die Überlagerung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  und der Ge-VS zugehörigen Reflexe hingewiesen.

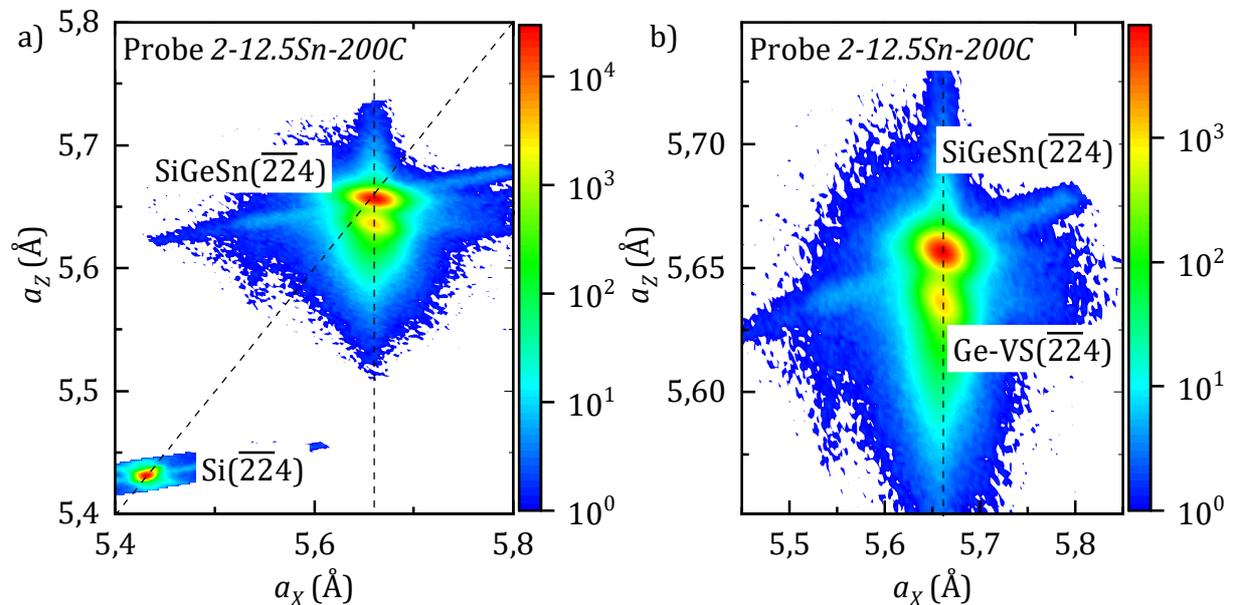


Abb. 5-20: Komplettübersicht der Reflexe des RSMs der Probe 2-12.5Sn-200C. b) Detailausschnitt des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes des RSMs der Probe 2-12.5Sn-200C.

Die Auswertung der Kristallparameter in Tab. 5-7 ist daher beiden Schichten zugeordnet. Durch die leichte Erhöhung des Si-Flusses wurde die relaxierte Gitterkonstante  $a_{0,\text{SiGeSn}}$  deutlich der Ge-Gitterkonstante  $a_{\text{Ge}}$  angenähert. Die tensile Verspannung wurde der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht wurde daher auf  $\varepsilon_{\parallel} = 0,24 \%$  verringert.

Probe	Reflex	$a_{\perp}$ (Å)	$a_{\parallel}$ (Å)	$a_0$ (Å)	$\varepsilon_{\parallel}$ (%)
2-12.5Sn-200C	Ge	5,6568	5,6601	5,6583	0,03
	Ge-VS	5,6361	5,6598	5,6464	0,24

Tab. 5-7: Übersicht der aus der XRD-RSM-Analyse extrahierten Kristallparameter  $a_{\perp}$ ,  $a_{\parallel}$ ,  $a_0$  und  $\varepsilon_{\parallel}$  der Probe 2-12.5Sn-160C.

### 5.2.6. Substrattemperaturvariation der Probenteilserie 2-15.0Sn

Durch die zuvor erwähnte Nachkalibrierung des Si-Flusses wurde die Güte und Reproduzierbarkeit der Gitteranpassung bei dieser Probenteilserie 2-15.0Sn wieder deutlich verbessert. Dies zeigt der Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren in Abb. 5-21.

Bei dieser Probenteilserie wird im Vergleich zu den vorigen Zusammensetzungen deutlich, dass es bei keiner Probe zur Ausbildung von Dickenoszillationen kommt. Selbst bei der geringsten Substrattemperatur von  $T_S = 160 \text{ °C}$  ist durch den linksseitigen Teilreflex nur ein schwacher Ansatz einer Dickenoszillation zu vermuten. Es kann demnach keine zur Probe 2-12.5Sn-200C vergleichbare Kristallqualität erzielt werden. Dies ist vermutlich auf die hohe Sn-Konzentration von  $c_{\text{Sn}} = 15 \%$  zurückzuführen. Bereits bei früheren  $\text{Ge}_{1-z}\text{Sn}_z$ - und  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserien war ab dieser Sn-Konzentration eine reduzierte Kristallqualität zu beobachten.

Dennoch ist bis zu  $T_S = 200 \text{ °C}$  der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörige Reflex, mit dem des Ge-VS überlagert. Erst ab  $T_S = 250 \text{ °C}$  nimmt die Sn-Segregation wieder deutlich zu. Aufgrund der hohen Si-Konzentration bei dieser Zusammensetzung verschiebt sich der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörige Reflex bei Probe 2-15.0Sn-250C bis  $\theta = 67,9 \text{ °}$ . Durch die weitere Zunahme der Sn-Segregation verschiebt sich der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörige Reflex bei Probe 2-15.0Sn-300C noch weiter auf  $\theta = 68,1 \text{ °}$ .

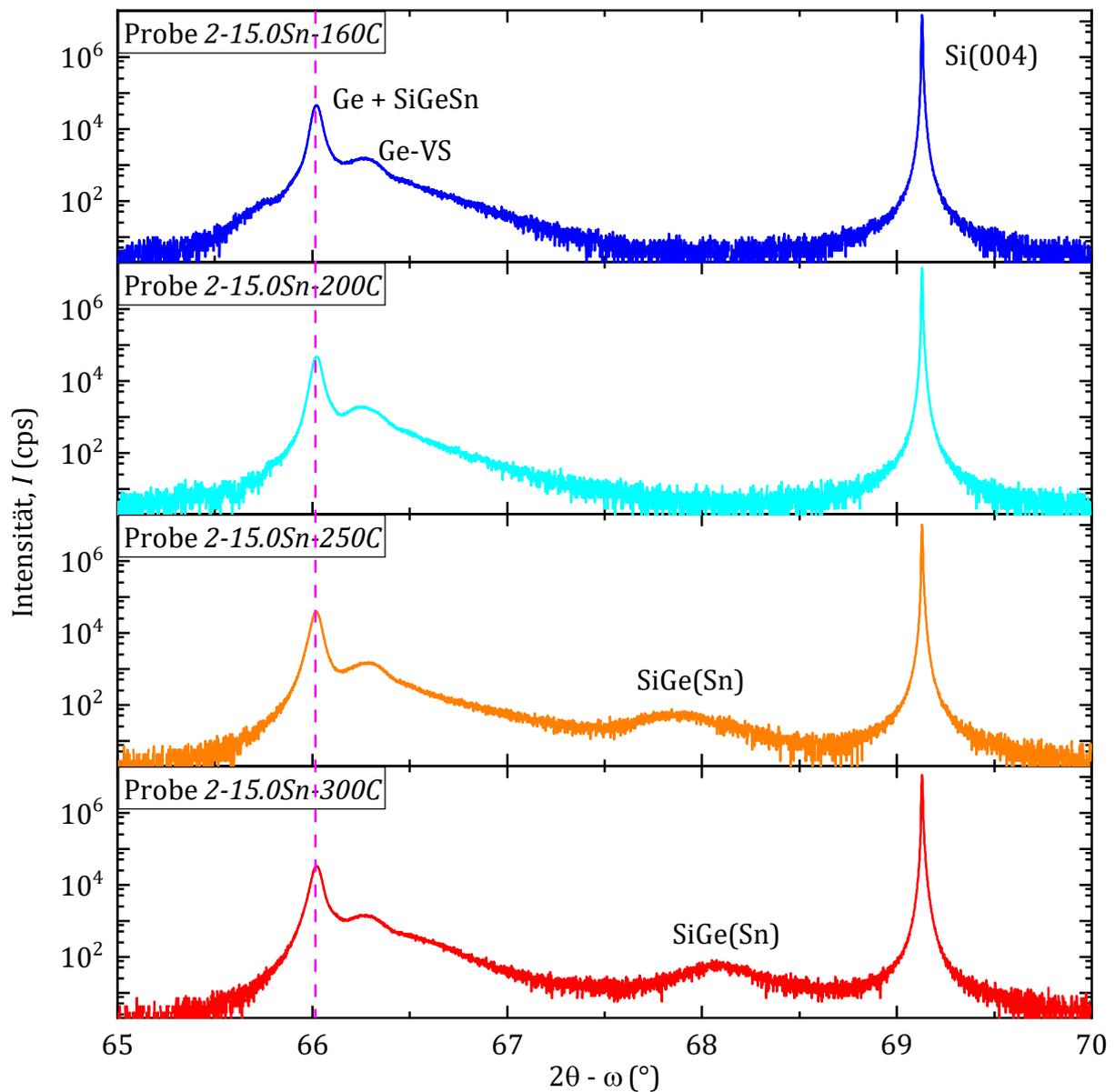


Abb. 5-21: Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Probenteilserie 2-15.0Sn. Die rosafarbene Strichlinie markiert zur Verdeutlichung den Reflex, welcher der Ge-Pufferschicht zugeordnet werden kann.

Bei dieser Probenteilserie wurde wieder die Probe 2-15.0Sn-160C einer Poly-Analyse unterzogen. Das Ergebnis ist im  $2\theta$ -Spektrum in Abb. 5-22 dargestellt. Im Gegensatz zu den vorigen Zusammensetzungen zeigt sich hier zum ersten Mal ein deutliches Anzeichen von Poly-Kristallinität durch einen zusätzlichen Reflex bei  $2\theta = 27,3^\circ$ . Diese Substrattemperatur ist daher ebenfalls nachteilig für die Kristallqualität der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_y$  Schicht.

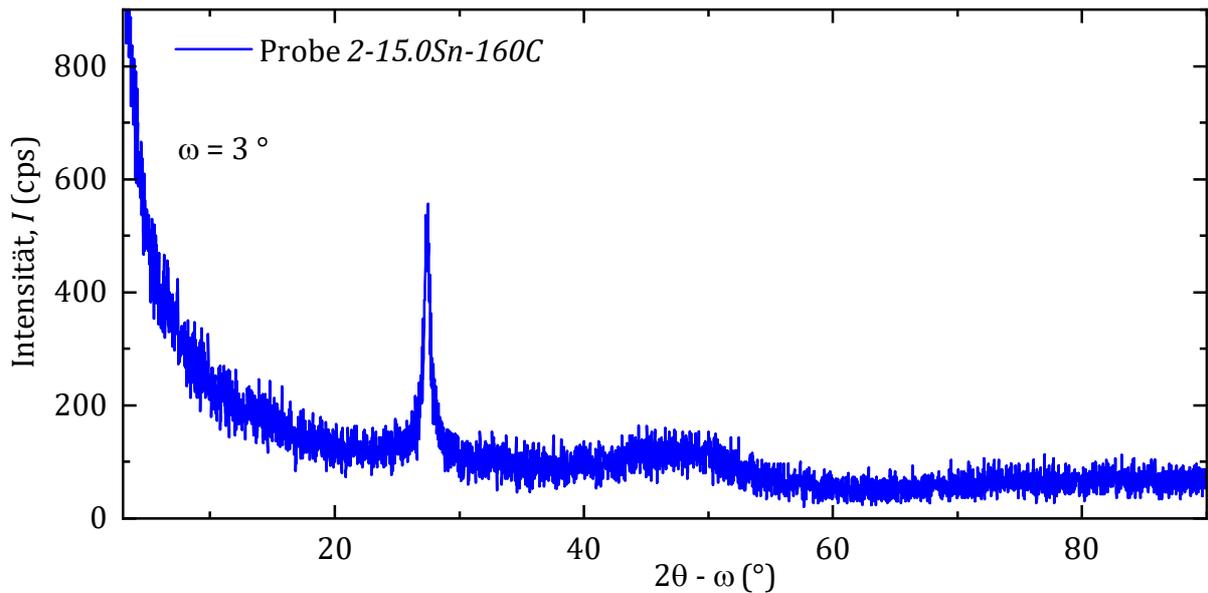


Abb. 5-22: Ergebnis der Poly-Analyse der Probe 2-12.5Sn-160C als  $2\theta$ -Spektrum.

Zur weiteren Quantifizierung des Verspannungszustandes von Probe 2-15.0Sn-200C wurde auch hier eine RSM-Analyse durchgeführt. Die Ergebnisse sind in der Reflex-Übersicht in Abb. 5-23 a) und der Detailansicht in Abb. 5-23 b) zusammengefasst.

Trotz der fehlenden Dickenoszillationen im  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum weist die vertikale Ausrichtung der Reflexe im RSM auf die Pseudomorphie des Schichtstapels hin.

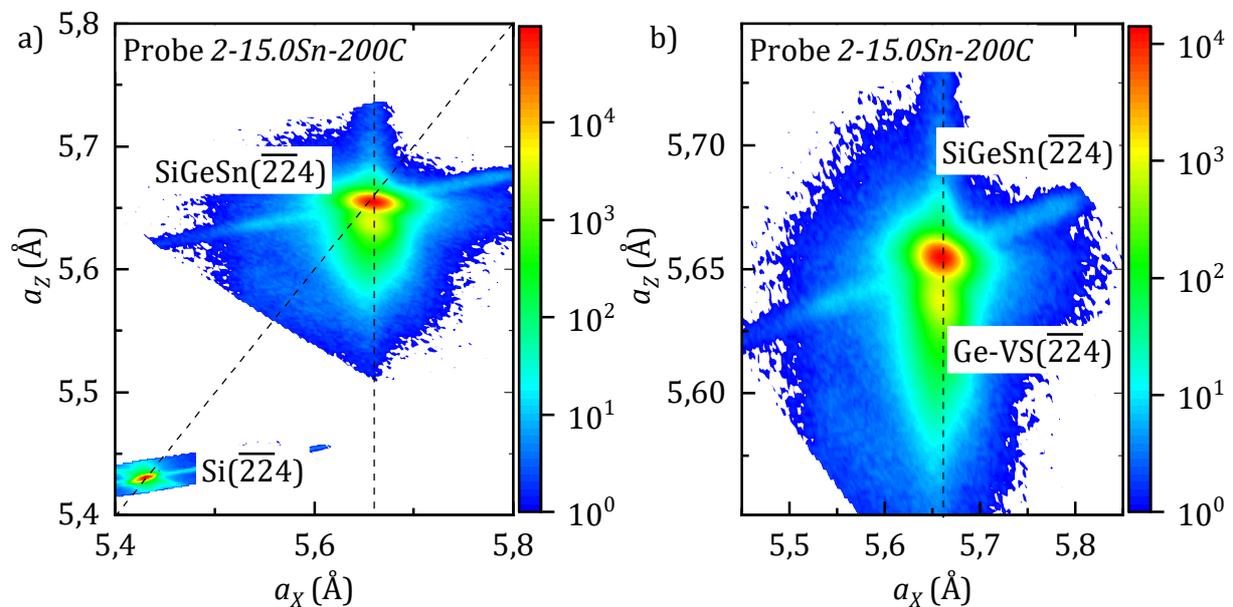


Abb. 5-23: Komplettübersicht der Reflexe des RSMs der Probe 2-15.0Sn-200C. b) Detailausschnitt des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes des RSMs der Probe 2-15.0Sn-200C.

Die zusätzliche aus den Daten des RSMs extrahierten Kristallparameter sind in Tab. 5-8 aufgelistet. Sie bestätigen ebenfalls die Pseudomorphie des Schichtstapels.

<b>Probe</b>	<b>Reflex</b>	$a_{\perp}$ (Å)	$a_{\parallel}$ (Å)	$a_0$ (Å)	$\epsilon_{\parallel}$ (%)
<b>2-15.0Sn-200C</b>	Ge-VS	5,6382	5,6576	5,6466	0,19
	SiGeSn	5,6349	5,6586	5,6565	0,04

Tab. 5-8: Übersicht der aus der XRD-RSM-Analyse extrahierten Kristallparameter  $a_{\perp}$ ,  $a_{\parallel}$ ,  $a_0$  und  $\epsilon_{\parallel}$  der Probe 2-15.0Sn-160C.

## 5.3. Analyse der Schichtzusammensetzung mittels RBS

Zur Analyse der tatsächlichen Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht wurden jeweils die Proben, welche bei einer Substrattemperatur  $T_S = 200\text{ °C}$  gewachsen wurden,  $2\text{-}X.\text{XSn}\text{-}200\text{C}$ , einer RBS-Analyse unterzogen. Die Ergebnisse sind in Abb. 5-24 dargestellt.

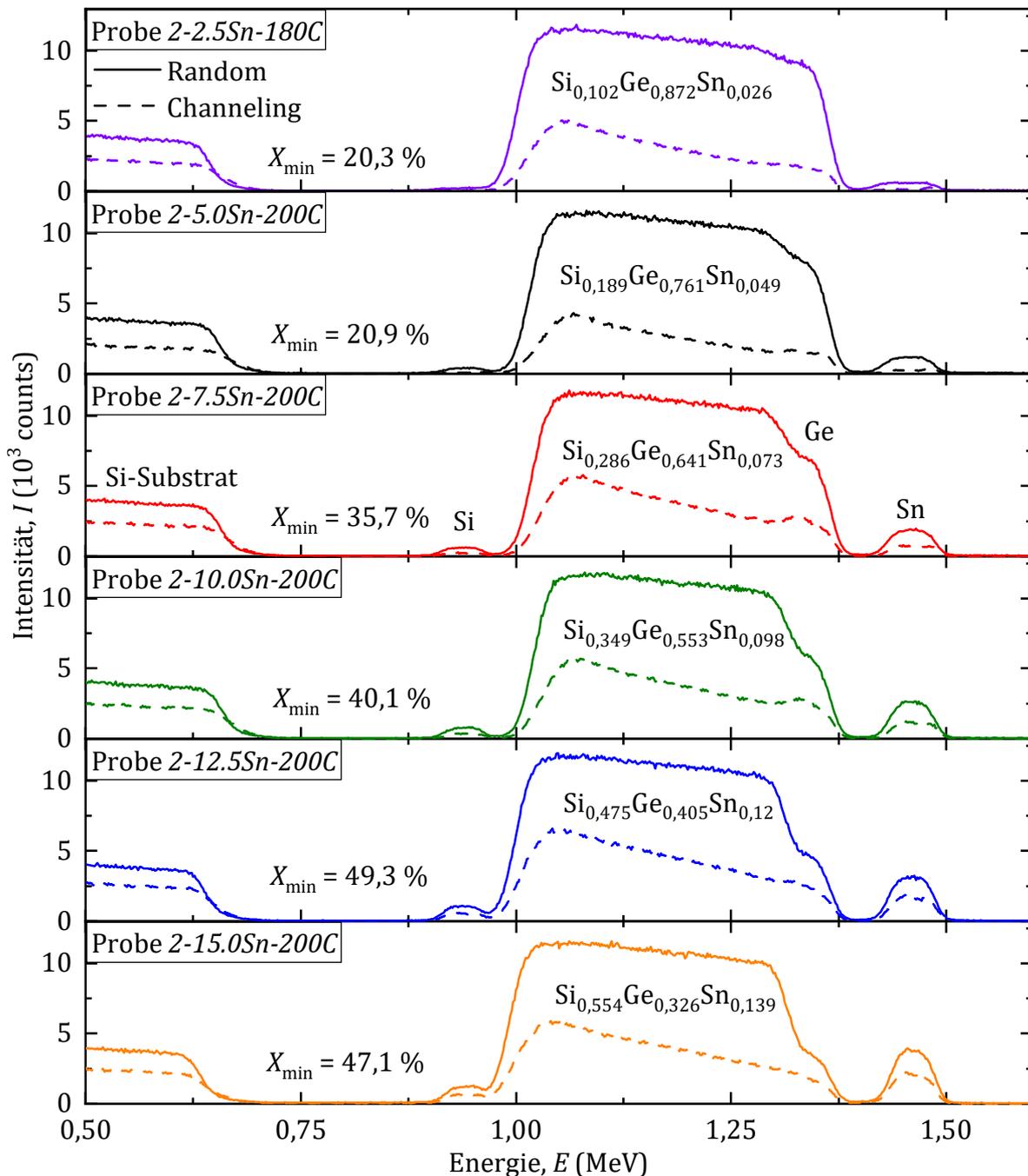


Abb. 5-24: Vergleich der RBS-Spektren der Probenteilerie  $2\text{-}X.\text{XSn}\text{-}200\text{C}$ . Die durchgezogene Linie zeigt das „Random“-Signal und die Strichlinie das „Channeling“-Signal.

Es ist dabei jedoch zu beachten, dass eine RBS-Analyse nur eine integrale Information über die Schichtzusammensetzung ohne eine detaillierte Tiefeninformation gibt. Abb. 5-24 zeigt zunächst die Spektren des „Random“-Signals (durchgezogene Linie) und des „Channeling“-Signals (Strichlinie) zusammenfassend dargestellt.

Die einzelnen Peaks sind auch hier den Bestandteilen des Schichtstapels zugeordnet. Im Vergleich zu den Ergebnissen der RBS-Analyse der Probenserien 1.1 und 1.2 ist der Peak, welcher sich dem Ge-VS und der Ge-Pufferschicht zuordnen lässt deutlich verbreitert. Dies lässt sich auf die zusätzliche Ge-Pufferschicht zurückführen. Auffallend ist außerdem das stetig steigende „Channeling“-Signal ab einer Sn-Konzentration von  $c_{\text{Sn}} \geq 7,5 \%$ . Hier nimmt die Zahl der Punktdefekte auf Zwischengitterplätzen offensichtlich zunächst sprunghaft und anschließend kontinuierlich mit steigender Sn-Konzentration zu.

Die Ergebnisse wurden auch hier durch Simulation und Anpassung des RBS-Spektrums des Schichtstapels weiter ausgewertet. Auf diese Weise wurde die tatsächliche Zusammensetzung und Dicke der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht ermittelt. Die Ergebnisse der Anpassung der Probenteilserie 2-*X.XSn-200C* sind in Tab. 5-9 zusammengefasst.

Probe	Nominell			RBS-Analyse			
	$c_{\text{Si}}$ (%)	$c_{\text{Ge}}$ (%)	$c_{\text{Sn}}$ (%)	$c_{\text{Si}}$ (%)	$c_{\text{Ge}}$ (%)	$c_{\text{Sn}}$ (%)	$d$ (nm)
<b>2-2.5Sn-170C</b>	9,2	88,3	2,5	10,2	87,2	2,6	110,2
<b>2-5.0Sn-200C</b>	18,4	76,6	5,0	18,9	76,1	4,9	96,7
<b>2-7.5Sn-200C</b>	27,5	65,0	7,5	28,6	64,1	7,3	94,4
<b>2-10.0Sn-200C</b>	36,7	53,3	10,0	34,9	55,3	9,8	92,2
<b>2-12.5Sn-200C</b>	45,9	41,6	12,5	47,5	40,5	12,0	92,5
<b>2-15.0Sn-200C</b>	55,1	29,9	15,0	55,4	32,6	13,9	93,0

Tab. 5-9: Ergebnisse der RBS-Analyse der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Probenteilserie 2-*X.XSn-200C*.

Die Ergebnisse der Zusammensetzungsanalyse mittels RBS zeigen dabei eine sehr gute Übereinstimmung der nominellen und tatsächlichen Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht. Die einzelnen Legierungskonzentrationen weichen meist nur um  $\Delta c = \pm 1 \%$  von den angestrebten Werten. Nur bei der Probe 2-10.0Sn-200C fällt die Ge-Konzentration um

$\Delta c_{\text{Ge}} = +2\%$  höher aus. Dies ist allerdings durch eine leichte Abweichung des Ge-Flusses von Außerdem zeigt sich bei Probe *2-15.0Sn-200C* eine niedrigere Sn-Konzentration, welche auf eine erhöhte Sn-Segregation hinweist.

Da durch die Variation der Zusammensetzung auch die Gesamtwachstumsrate der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht  $R_{\text{SiGeSn}}$  variiert ist auch die sehr gute Übereinstimmung der angestrebten Schichtdicke bemerkenswert.

#### 5.4. Analyse der Kristallqualität mittels TEM

Zur weiteren Analyse der Kristallqualität wurden exemplarisch die Probe *2-5.0Sn-200C* einer TEM-Analyse unterzogen. Die Analysen wurden dabei an der Humboldt-Universität zu Berlin von Dr. Holm Kirmse durchgeführt. Die Ergebnisse der Analyse erlauben insbesondere die Bestimmung der bereits erwähnten Durchstoßversetzungsdichte  $N_{TDD}$ . Die Durchstoßversetzungen sind in einer TEM-Aufnahme dabei als senkrechte, helle Linien zu erkennen. Zunächst wird exemplarisch die TEM-Aufnahme der Probe *2-5.0Sn-200C* in Abb. 5-25 a) betrachtet.

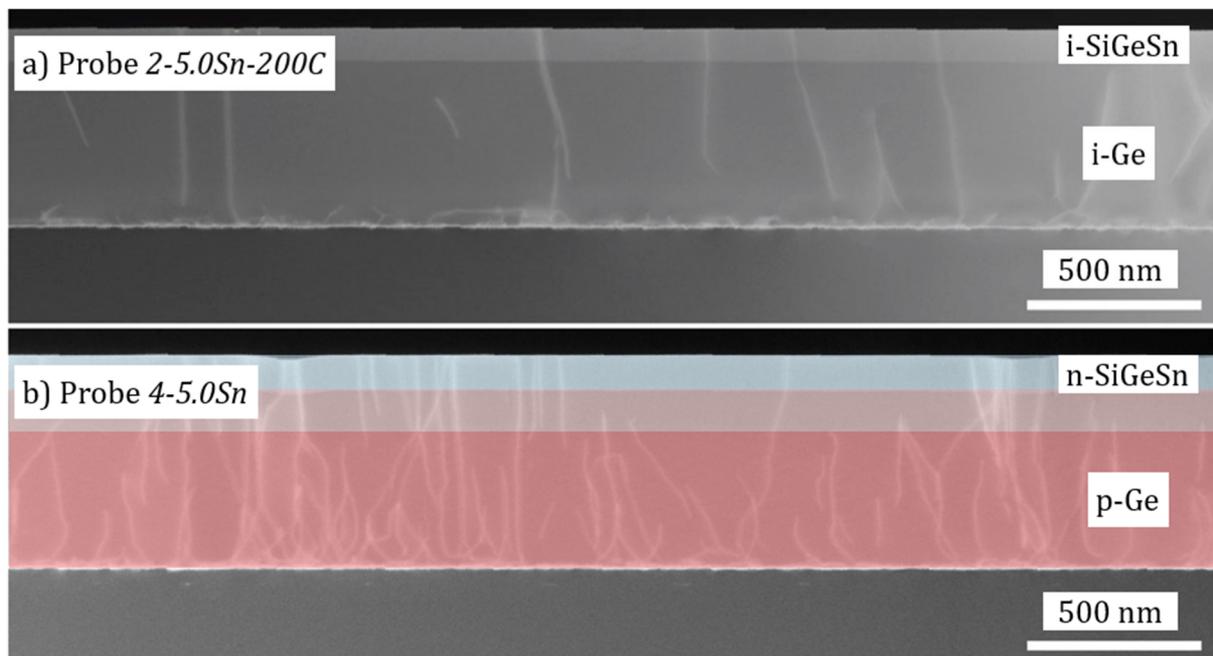


Abb. 5-25: Vergleich der TEM-Aufnahmen der Proben *2-5.0Sn-200C* (a) und *4-5.0Sn* (b).

Es ist deutlich zu sehen, dass die Ge-Schicht oberhalb des Ge-VS sehr defektarm ist. Außerdem enden einige der sichtbaren Durchstoßversetzungen bereits innerhalb des Ge-VS bzw. in der darauffolgenden Ge-Schicht. Nur einzelne Durchstoßversetzungen propagieren bis in die aktive  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht. Die Durchstoßversetzungsdichte wurde hier auf einen Wert von  $N_{TDD} \approx 1 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-3}$  bestimmt.

Zum Vergleich ist in Abb. 5-25 b) eine identische TEM-Aufnahme der Probe *4-5.0Sn*, welche noch in Kapitel 6 eingehender diskutiert wird, dargestellt. Probe *4-5.0Sn* weist dabei einen nahezu identischen Schichtstapel wie die Proben der Probenserie 2 auf. Der einzige Unterschied zum Schichtstapel der Probenserie 2 ist, dass sowohl das Ge-VS als auch die aufgewachsene Ge-Schicht hoch p-typ dotiert sind. Die Dotierstoffkonzentration

der letzten 100 nm der Ge-Schicht ist dabei um zwei Größenordnungen geringer (siehe Abb. 6-11).

Es zeigt sich hierbei eine signifikant höhere Anzahl an Durchstoßversetzungen. Obwohl sich auch hier einige Durchstoßversetzungen innerhalb des Ge-VS annihilieren, reicht eine Vielzahl davon in die Ge-Schicht und darüber hinaus in die  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht. Bei genauer Betrachtung des mittleren Teils der TEM-Aufnahme ist eine Reduktion der Durchstoßversetzungen an der Grenzfläche zwischen hochdotiertem und schwachdotiertem Gebiet erkennbar. Die Durchstoßversetzungsdichte wurde hier auf  $N_{\text{TDD}} \approx 1 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$  und demnach eine Größenordnung höher bestimmt. Da vor allem eine Vielzahl der Durchstoßversetzungen den hergestellten pn-Übergang durchdringen haben sie einen erheblichen negativen Einfluss auf dessen elektrisches Verhalten.

Offensichtlich hat also die Art und Höhe der Dotierung des Ge-VS einen signifikanten Einfluss auf die resultierende Durchstoßversetzungsdichte und somit die Funktionalität des Ge-VS. Aus diesem Grund werden alle künftig hergestellten Bauelemente auf einem undotierten Ge-VS realisiert. Dotierstrukturen werden auf dieses Ge-VS aufbauend aufgewachsen.

## 5.5. Analyse der Schichtzusammensetzung mittels TEM-EDXS

Die RBS-Analyse gibt, wie bereits erwähnt, keine Tiefeninformation über die tatsächliche Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht. Da aufgrund der Sn-Segregation jedoch sowohl eine inhomogene Verteilung in Wachstumsrichtung als auch lokale Häufungen von Legierungsbestandteilen zu befürchten sind, ist eine detaillierte Betrachtung der Schichtzusammensetzung notwendig. Hierzu wurde die Probenreihe *2-XXSn-200C* einer TEM-EDXS-Analyse unterzogen. Die Analysen entstanden im Zusammenhang mit der zuvor erwähnten TEM-Analyse an der Humboldt-Universität zu Berlin. Die Probenpräparation erfolgte dabei auf konventionelle Art (siehe Abschnitt 2.3.3). Der Vorteil der Analyse der Zusammensetzung mittels TEM-EDXS liegt dabei in der örtlichen Auflösung der Zusammensetzung entlang des Schichtquerschnitts. Dadurch erhält man, im Gegensatz zur Analyse mittels RBS in Abschnitt 5.2.4, eine detaillierte Tiefeninformation über die tatsächliche Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht.

Abb. 5-26 zeigt exemplarisch eine vollständige TEM-EDXS-Aufnahme der Probe *2-10.0Sn-200C* mit der TEM-Aufnahme und den EDXS-Spektren der drei erwarteten Legierungsbestandteile Si, Ge und Sn.

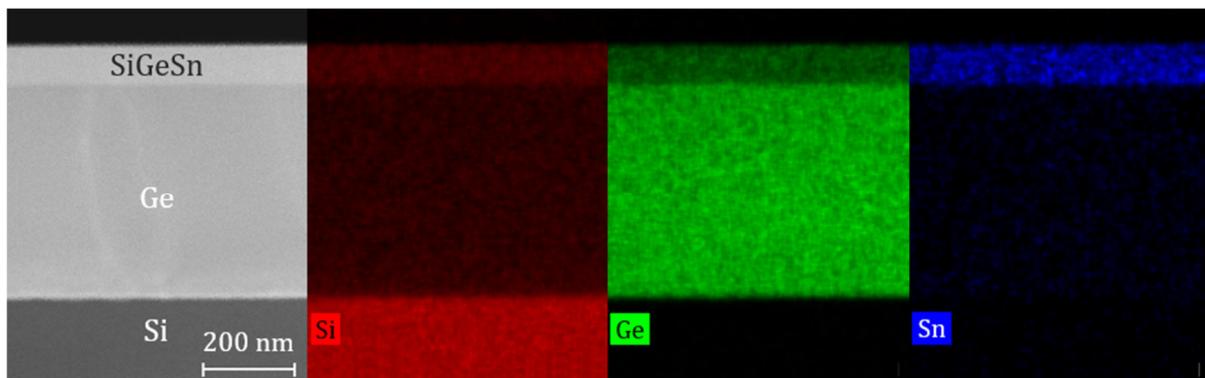


Abb. 5-26: TEM-EDXS Aufnahme der Probe *2-10.0Sn-200C*. V.l.n.r.: TEM -Aufnahme, Si-EDXS-Spektrum, Ge-EDXS-Spektrum, Sn-EDXS-Spektrum.

Bei genauer Betrachtung des EDXS-Spektrums von Si ist eine konstante Si-Konzentration in der Ge-Pufferschicht zu erkennen. Dies widerspricht der Erwartung einer reinen Ge-Pufferschicht. Aufgrund der konventionellen Probenpräparation [46, S. 173] kommt es an der zu betrachtenden Oberfläche zu einer Kontamination durch Si aus dem Substrat [66]. Dies führt zu einer Verfälschung des Messsignals, wodurch die ermittelte Si-Konzentration stets zu hoch und die Ge und Sn-Konzentration demnach zu niedrig

ausfallen. Aus diesem Grund wurde eine Kalibrierprobe sowohl mit konventioneller Probenpräparation als auch mittels Focused Ion Beam (FIB) präpariert [46, S. 173]. Das Verhältnis der ermittelten Konzentrationen erlaubt anschließend die Korrektur der mit konventioneller Probenpräparation gewonnener Ergebnisse [66].

Ungeachtet dessen sind im EDXS-Spektrum von Sn keine lokalen Häufungen von Sn erkennbar. Zusammengefasst deuten die EDXS-Spektren von Si, Ge und Sn auf eine homogene Verteilung der Legierungselemente hin. In deutlichem Kontrast hierzu stehen die Ergebnisse der TEM-EDXS-Analyse der Probe *2-15.0Sn-200C*, welche in Abb. 5-27 dargestellt sind. Bei genauer Betrachtung des EDXS-Spektrums von Sn sind deutliche Anzeichen von Phasenseparation erkennbar.

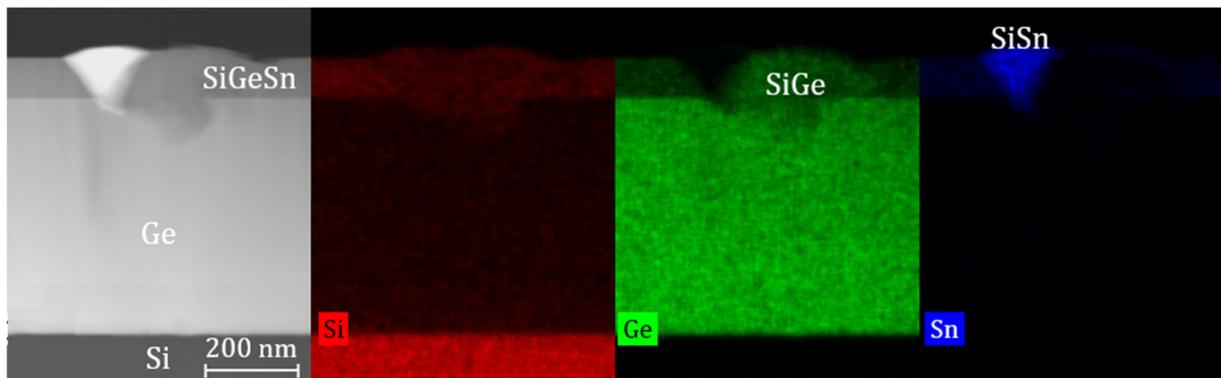


Abb. 5-27: TEM-EDXS Aufnahme der Probe *2-15.0Sn-200C*. V.l.n.r.: TEM-Aufnahme, Si-EDXS-Spektrums, Ge-EDXS-Spektrum, Sn-EDXS-Spektrum.

Zur besseren Verdeutlichung sind in Abb. 5-28 a), b) und c) die EDXS-Spektren der Legierungsphase *SiGeSn* und der zwei zu beobachtenden separierten Phasen dargestellt.

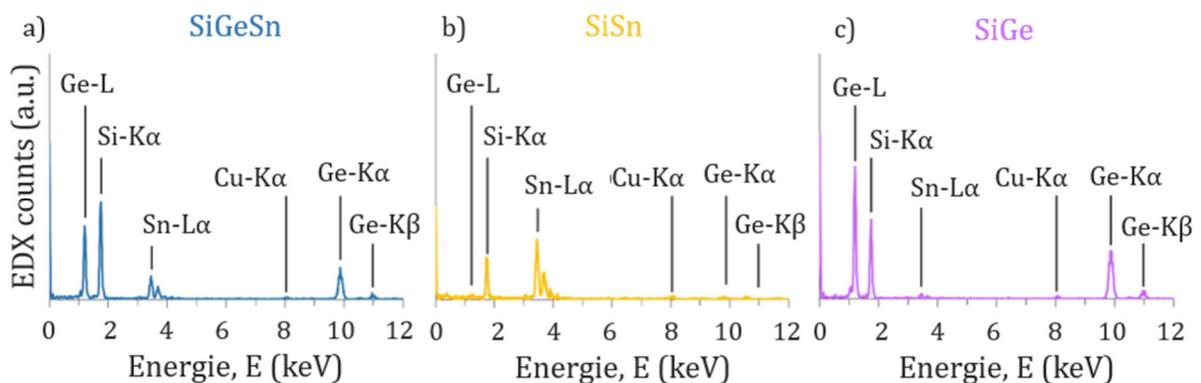


Abb. 5-28: EDXS-Spektren der Legierungsphase *SiGeSn* und der separierten Phasen *SiSn* und *SiGe*.

Es zeigt sich, dass die  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht sich in eine Sn-reiche Phase  $\text{SiSn}$  und eine Sn-arme Phase  $\text{SiGe}$  zerlegt. Bei der Phase  $\text{SiSn}$  ist zu beachten, dass die durch die Probenpräparation hervorgerufene Si-Kontamination die Ursache für das messbare Si-Signal sein kann. Darüber hinaus zeigt die Phase  $\text{SiSn}$  keine erkennbare Ge-Konzentration, da sich das Sn vollständig von der Legierungsphase  $\text{SiGeSn}$  separiert hat. Die Sn-arme Phase  $\text{SiGe}$  zeigt durch die Phasenseparation hingegen keine erkennbare Sn-Konzentration. Zum Vergleich zeigt das EDXS-Spektrum der intakten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht die Superposition der einzelnen Phasen  $\text{SiSn}$  und  $\text{SiGe}$ .

Unter Verwendung der zuvor erwähnten Methode wurden die, mit konventioneller Probenpräparation gewonnenen, Ergebnisse um den Einfluss der Si-Kontamination korrigiert. Anschließend wurde die tatsächliche Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht der Proben *2-XXSn-200C* bestimmt. Da die Probe *2-7.5Sn-200C* während der Probenpräparation zerstört wurde stehen keine EDXS-Ergebnisse für diese zur Verfügung. Die Ergebnisse sind im Vergleich zur nominellen Zusammensetzung in Tab. 5-10 zusammenfassend dargestellt. Die Ergebnisse zeigen für alle Proben, ausgenommen *2-12.5Sn-200C*, eine sehr gute Übereinstimmung der tatsächlichen und nominellen Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht mit einer maximalen Abweichung von  $\Delta c = \pm 2 \%$ . Lediglich die Si-Konzentration  $c_{\text{Si}}$  der Probe *2-12.5Sn-200C* ist um  $\Delta c_{\text{Si}} \approx 4 \%$  höher als angestrebt. Dies lässt sich allerdings auf die negative Abweichung von Ge und Sn bei dieser Probe zurückführen.

Probe	Nominell			TEM-EDXS-Analyse		
	$c_{\text{Si}}$ (%)	$c_{\text{Ge}}$ (%)	$c_{\text{Sn}}$ (%)	$c_{\text{Si}}$ (%)	$c_{\text{Ge}}$ (%)	$c_{\text{Sn}}$ (%)
<i>2-2.5Sn-170C</i>	9,2	88,3	2,5	8	90	2
<i>2-5.0Sn-200C</i>	18,4	76,6	5,0	20	76	4
<i>2-7.5Sn-200C</i>	27,5	65,0	7,5	-	-	-
<i>2-10.0Sn-200C</i>	36,7	53,3	10,0	35	55	9
<i>2-12.5Sn-200C</i>	45,9	41,6	12,5	50	39	11
<i>2-15.0Sn-200C</i>	55,1	29,9	15,0	54	31	14

Tab. 5-10: Übersicht der angestrebten und mittels TEM-EDXS ermittelten tatsächlichen Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht der Probenserie *2-XX-200C*.

## 5.6. Fazit der Substrattemperaturvariation

Die Ergebnisse der Variation der Substrattemperatur führte zur Eingrenzung des Epitaxiefensters von auf Ge gitterangepasstem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ . Im Vergleich zur Epitaxie von  $\text{Ge}_{1-z}\text{Sn}_z$  ist eine deutlich höhere Substrattemperatur möglich. Bis zu einer Sn-Konzentration von  $c_{\text{Sn}} = 5\%$  ist der Epitaxieprozess bis einschließlich  $T_S = 300\text{ °C}$  stabil. Die Ergebnisse der XRD-Analyse, insbesondere das Auftreten von Dickenoszillationen beweist die außerordentliche Verbesserung der Kristallqualität im Vergleich zur  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Probenserie 1.

Ab einer Sn-Konzentration von  $c_{\text{Sn}} = 7,5\%$  sind ab einer Substrattemperatur von  $T_S = 250\text{ °C}$  jedoch erste Anzeichen von erhöhter Sn-Segregation zu beobachten. Dies führt zu einer Verschiebung des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes hin zu geringeren Sn-Konzentrationen. Außerdem verbreitert sich der Reflex bei gleichzeitiger Intensitätsabnahme. Diese Ergebnisse sind dennoch bemerkenswert, da die Voruntersuchungen zur Temperaturproblematik der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Epitaxie anhand von  $\text{Ge}_{1-z}\text{Sn}_z$ -Experimenten zeigte, dass die Sn-Segregation hier spätestens ab  $T_S = 200\text{ °C}$  zu einer maßgeblichen Störung der Epitaxie kommt. Eine mögliche Erklärung hierfür ist, dass die Sn-Segregation bei der  $\text{Ge}_{1-z}\text{Sn}_z$ -Epitaxie durch die hohe Verspannung der Schicht verstärkt wird. Aufgrund der Verspannungsreduktion durch die Gitteranpassung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Schicht auf Ge wird die Sn-Segregation hierbei deutlich verringert.

Es ist dennoch anzumerken, dass es im Gegensatz zur Untersuchung der Temperaturstabilität nicht zu einer Phasenseparation kommt. Während die  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Schichten eine deutlich höhere post-epitaktische Temperaturstabilität aufweisen, wird die Epitaxie bereits ab  $T_S = 250\text{ °C}$  deutlich durch die Sn-Segregation gestört. Die Stabilität des Epitaxieprozesses und die post-epitaktische Temperaturstabilität werden demnach von zwei völlig unterschiedlichen Effekten beeinflusst.

Entgegen der Erwartung zeigen die Ergebnisse der Poly-Analyse, ausgenommen bei Probe 2-15.0Sn-160C, keine Anzeichen von Poly-Kristallinität bei der geringsten Substrattemperatur von  $T_S = 160\text{ °C}$ . Es ist dennoch anzumerken, dass eine höhere Substrattemperatur stets vorzuziehen ist, um die Anzahl an Punktdefekten so gering wie möglich zu halten.

## Fazit der Substrattemperaturvariation

Die in Tab. 5-11 dargestellte Bewertungsmatrix fasst die Ergebnisse der Variation der Substrattemperatur zusammen. Um für die nachfolgenden Epitaxieprozesse unabhängig der Zusammensetzung vergleichbare Epitaxiebedingungen zu gewährleisten, wird eine Substrattemperatur von  $T_S = 200\text{ °C}$  als Optimum gewählt.

$T_S$ (°C)	160	200	250	300
$c_{\text{Sn}}$ (%)				
2,5	✓	✓	✓	✓
5,0	✓	✓	✓	✓
7,5	✓	✓	✗	✗
10,0	✓	✓	✗	✗
12,5	✓	✓	✗	✗
15,0	✗	✓	✗	✗

Tab. 5-11: Bewertungsmatrix zur qualitativen Bewertung der Substrattemperatur zur Epitaxie von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$

## 6. Epitaxie und Herstellung von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Dioden

*In diesem Kapitel wird die Epitaxie von auf Ge gitterangepassten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Diodenstrukturen unter Verwendung der in Kapitel 5 optimierten Epitaxieparameter beschrieben. Die hergestellten Diodenstrukturen wurden anschließend ebenfalls hinsichtlich Zusammensetzung und Materialqualität mittels XRD, RBS und TEM-EDXS analysiert. Die zur Herstellung von diskreten Bauelementen verwendete Prozesssequenz wird abschließend detailliert beschrieben. Die Bauelemente werden in Kapitel 7 einer ausführlichen elektrischen Charakterisierung unterzogen.*

### 6.1. Epitaxie von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Homodioden

#### 6.1.1. Schichtaufbau und Epitaxie

Die hier vorgestellte Probenserie 3 beschreibt die ersten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Homodioden mit variabler Sn-Konzentration zwischen  $5\% \leq c_{\text{Sn}} \leq 15\%$ , welche am IHT und mit dem in Kapitel 5 optimierten Epitaxieprozess hergestellt wurden. Alle zuvor hergestellten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Bauelemente sind lediglich Heterodioden mit einem Heteroübergang aus Ge und  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ . Der Schichtstapel inklusive Schichtdicken und Dotierstoffkonzentrationen ist in Abb. 6-1 dargestellt. Eine komplette Probenübersicht zeigt Tab. 6-1.

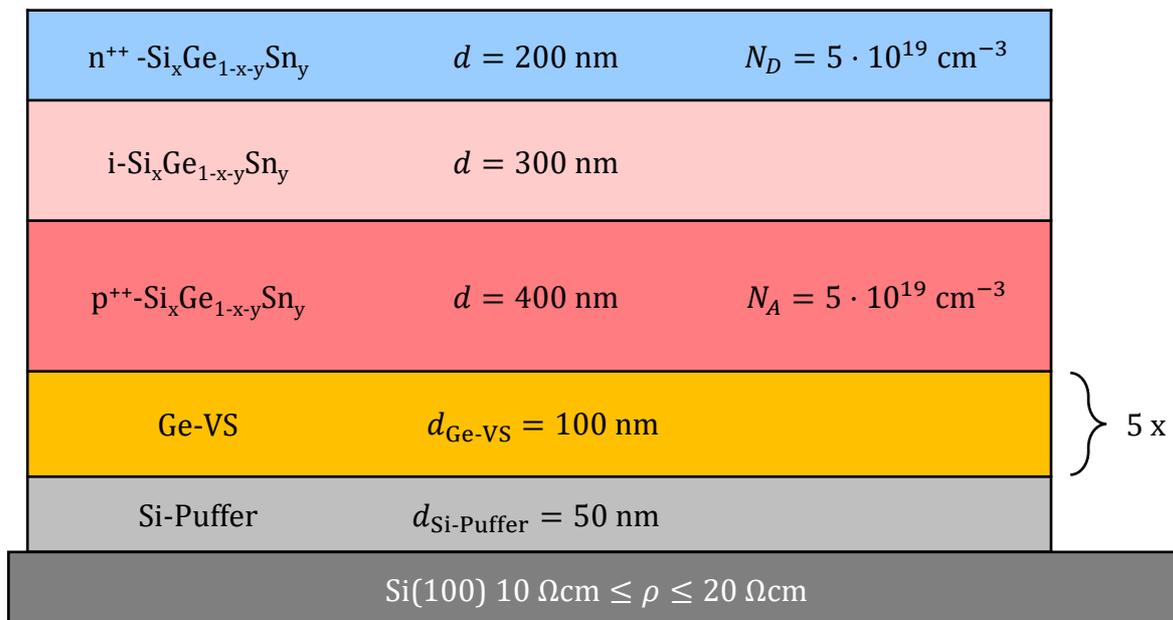


Abb. 6-1: Schichtstapel der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserie 3.

Probe	$c_{\text{Si}}$ (%)	$c_{\text{Ge}}$ (%)	$c_{\text{Sn}}$ (%)	$T_S$ (°C)
<b>3-0.0Sn-GeRef</b>	0,0	100,0	0,0	
<b>3-5.0Sn-200C</b>	18,4	76,7	5,0	200
<b>3-7.5Sn-200C</b>	27,5	65,0	7,5	200
<b>3-10.0Sn-200C</b>	36,7	53,3	10,0	200
<b>3-12.5Sn-200C</b>				200
<b>3-12.5Sn-180C</b>	45,9	41,6	12,5	180
<b>3-12.5Sn-160C</b>				160
<b>3-15.0Sn-160C</b>	55,1	30,0	15,0	160

Tab. 6-1: Übersicht der hergestellten Proben und der Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserie 3.

Der Epitaxieprozess beginnt dabei standardgemäß mit der in Abschnitt 2.2 beschriebenen thermischen Desorption mit anschließender Epitaxie des Si-Puffers und des Ge-VS. Anschließend wurde die Prozesssequenz zur Abscheidung des Ge-VS mit anschließendem thermischen Ausheilschritt vier Mal wiederholt. Auf diese Weise entsteht, wie in Abb. 6-1 dargestellt, ein fünffach gestapeltes Ge-VS. Die Gesamtschichtdicke des Ge-Schichtstapels zwischen dem Si-Puffer und der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht beträgt daher  $d_{\text{Ge-VS,Ges}} = 500 \text{ nm}$  und ist somit identisch zur Dicke des Ge-Schichtstapels der Probenserie 2.

Die zusätzlichen Ausheilschritte haben dabei die Aufgabe die Durchstoßversetzungsdichte innerhalb der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht im Vergleich zu den Probenserien 1.1 und 1.2 noch weiter zu verringern. Durch die zusätzlich eingebrachten Grenzflächen zwischen den einzelnen Ge-VS-Schichten sollen die Durchstoßversetzungen unterbrochen werden.

Auf dem fünffach gestapelten Ge-VS aufbauend erfolgt die Epitaxie der Diodenstruktur. Zunächst wurde die Probe *3-0.0Sn-GeRef*, eine Ge-Diode mit einer Sn-Konzentration von  $c_{\text{Sn}} = 0 \%$ , als Referenzbauelement hergestellt. Gleichzeitig dient der dabei durchgeführte Epitaxieprozess dazu, die Abhängigkeit der für die MIR-Pyrometrie notwendigen Emissivität  $\epsilon$  von der Dotierstoffkonzentration der aufgewachsenen Schicht zu überprüfen. Die Notwendigkeit einer Nachführung der Emissivität  $\epsilon$  während der Epitaxie von dotierten Strukturen wurde bereits in Abschnitt 4.4.2 erläutert.

Bei der Epitaxie der Ge-Diodenstruktur wurde die Substrattemperatur allerdings wie üblich mithilfe des Thermoelements gemessen und geregelt. Gleichzeitig wurde die Substrattemperatur auf der Oberfläche mithilfe des MIR-Pyrometers gemessen. Die beiden Temperaturprofile sind im Vergleich in Abb. 6-2 dargestellt.

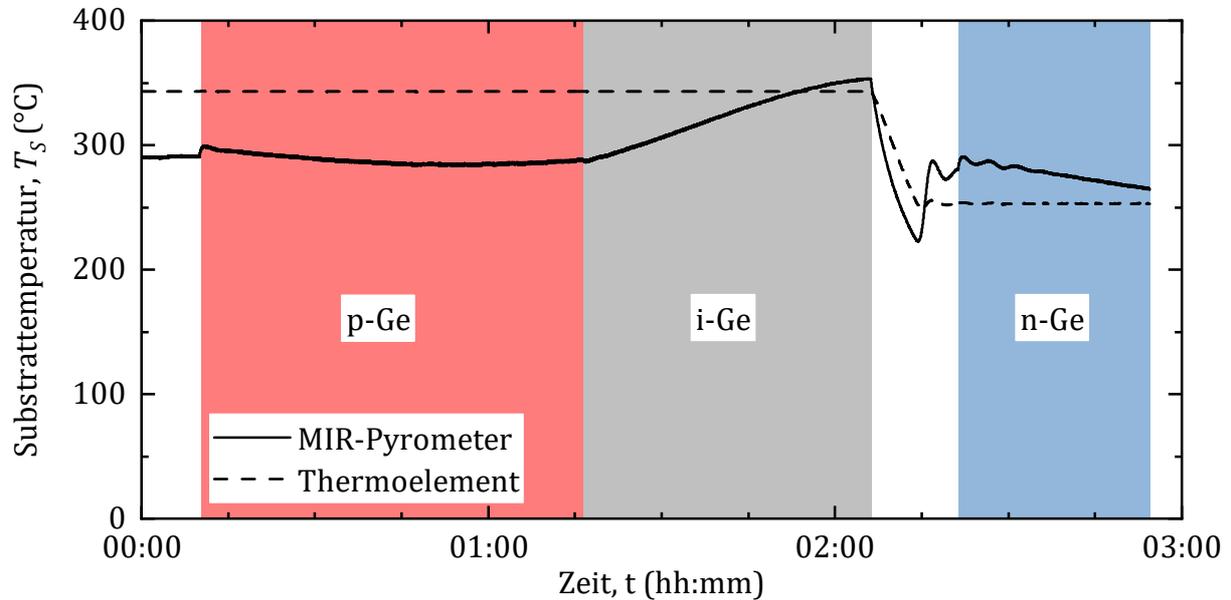


Abb. 6-2: Verlauf der Substrattemperatur während der Epitaxie des Ge-Diodenstruktur der Probe *3-0.0Sn-GeRef*, gemessen mit dem Thermoelement (Strichlinie) und dem MIR-Pyrometer (durchgezogene Linie).

Die angestrebte Substrattemperatur während der Epitaxie der p-Ge und i-Ge-Schichten beträgt  $T_s = 330 \text{ °C}$ . Die mit dem MIR-Pyrometer gemessene Substrattemperatur ist dabei bereits zu Beginn niedriger als erwartet. Dies ist auf eine gesunkene Emissivität des Substrats durch den bereits aufgewachsenen Ge-VS-Schichtstapel zurückzuführen. Bemerkenswert ist außerdem, dass, trotz konstanter Substrattemperatur zufolge des Thermoelements, das Signal des MIR-Pyrometers während der Epitaxie der p-Ge-Schicht zunächst stetig abnimmt. Am Übergang zwischen der p-Ge-Schicht und der i-Ge-Schicht ist jedoch eine Kehrtwende zu beobachten, was zu einer deutlichen Steigerung des MIR-Pyrometersignals führt. Eine mögliche Ursache hierfür ist erneut eine Änderung der Emissivität der Probenoberfläche aufgrund der unterschiedlichen Dotierungskonzentration der einzelnen Schichten und Interferenzeffekten zwischen diesen. Aus diesem Grund ist es mithilfe des MIR-Pyrometers nur bedingt möglich die Substrattemperatur für die Epitaxie von Bauteilstrukturen zu regeln.

Um dieses Problem zu umgehen, wurde vor der Epitaxie der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Homodioden eine Temperaturkalibrierschicht bei  $T_S = 200\text{ °C}$  und aktiver Regelung der Substrattemperatur durch das MIR-Pyrometer hergestellt. In diesem Kalibrierprozess wurden alle zum Zeitpunkt der Epitaxie der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht auftretenden Störeinflüsse erfasst und diesen entgegengeregelt. Anschließend wird die hierfür notwendige Heizleistung im eingeschwungenen Zustand aus dem Protokoll der Anlagensteuerung extrahiert. Die eigentlichen  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Homodioden werden anschließend mit dieser konstanten Heizleistung hergestellt.

Für die Epitaxie der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Diodenstrukturen wurde die Substrattemperatur mit einer konstanten Heizleistung gemäß der durchgeführten Kalibrierschicht gehalten. Zunächst wurde dazu die Messung der Substrattemperatur auf das MIR-Pyrometer umgestellt um eine definierte Abkühlphase auf  $T_S = 150\text{ °C}$  zu gewährleisten. Die angestrebte Substrattemperatur berücksichtigt dabei die zu erwartende Erwärmung des Substrats nach dem Öffnen der Molekularstrahlquellen. Anschließend wurde die konstante Heizleistung eingepreßt. Eine angefügte Wartephase von  $t = 300\text{ s}$  dient zur Stabilisierung der Substrattemperatur.

Für die Epitaxie der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Diodenstruktur wurde, den Erkenntnissen aus Abschnitt 4.3 folgend, eine konstante Leistung in den Si-ESV eingepreßt. Der resultierende Si-Fluss beträgt hierbei erneut  $F_{\text{Si}} = 2 \cdot 10^{14}\text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ . Unter Einhaltung der Bedingung zur Gitteranpassung in Gleichung (4-3) resultiert ein Sn-Fluss von  $F_{\text{Sn}} = 5,5 \cdot 10^{13}\text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ . Zur Variation der Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht gemäß Tab. 6-1 wurde der Ge-Fluss im Bereich  $8,5 \cdot 10^{14}\text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1} \geq F_{\text{Ge}} \geq 1,1 \cdot 10^{14}\text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$  variiert. Gleichzeitig variiert dabei die Gesamtwachstumsrate  $R_{\text{SiGeSn}}$  der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht.

Eine Übersicht der Prozessparameter ist exemplarisch für die Probe *3-7.5Sn-200C* in Abb. 6-3 dargestellt. Es ist dabei sehr deutlich zu erkennen, dass die Herstellung des fünffach gestapelten Ge-VS deutlich mehr Zeit beansprucht als die Epitaxie der eigentlichen Diodenstruktur.

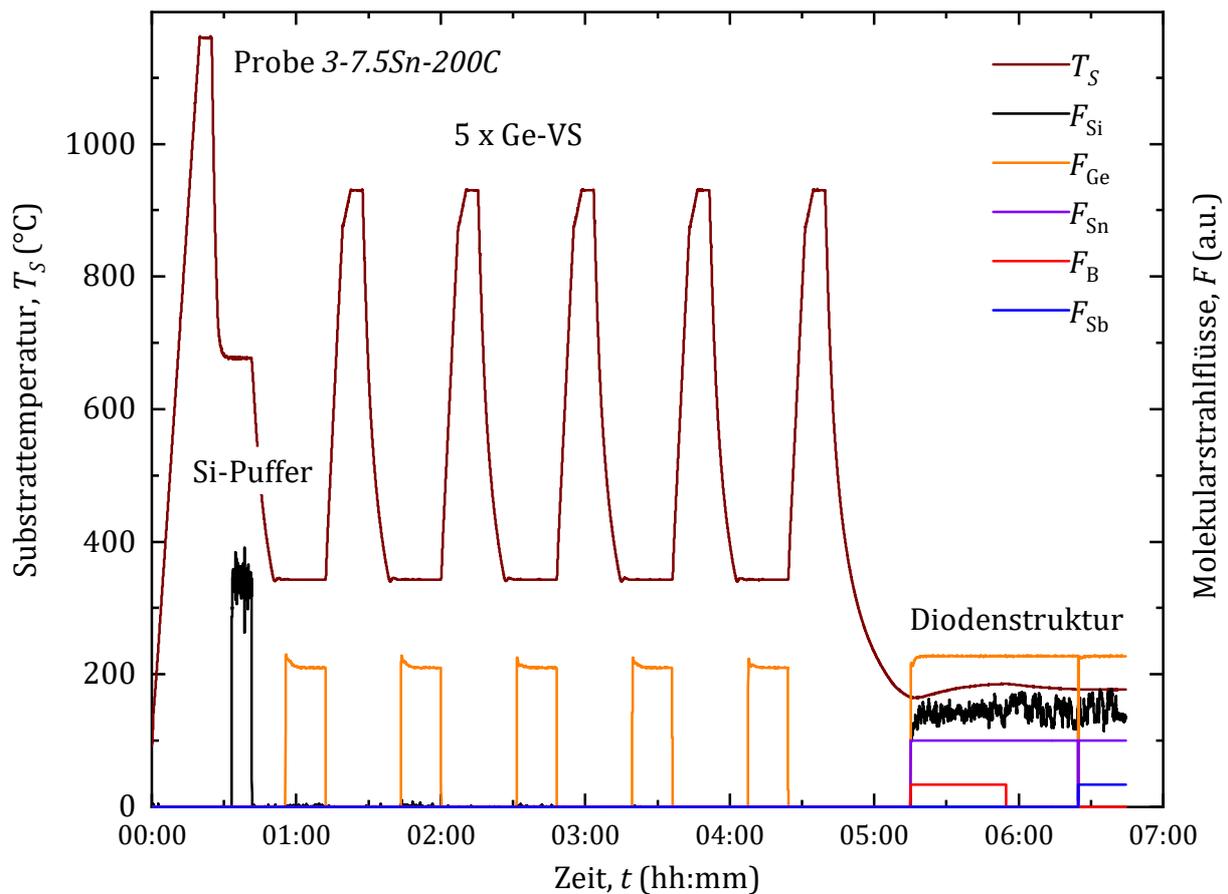


Abb. 6-3: Übersicht der Prozessparameter der Probe 3-7.5Sn-200C.

Die Epitaxie der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Diodenstruktur beginnt mit der Abscheidung der p-typ dotierten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht mit  $d = 400$  nm und  $N_A = 5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . Anschließend erfolgt die Abscheidung der intrinsischen  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht mit  $d = 300$  nm. Dabei ist von einer Hintergrunddotierung von  $N_{A,\text{Ge}} \approx 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  auszugehen (siehe Abschnitt 3.1). Danach erfolgt die Epitaxie der n-typ dotierten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht mit  $d = 200$  nm und  $N_D = 5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . Zur Gewährleistung eines guten ohmschen Kontakts ist eine hohe Dotierstoffkonzentration nahe der Entartung anzustreben [2, S. 187]. Eine zu hohe Dotierstoffkonzentration kann allerdings zu Punktdefekten und die auftretende Dotierstoffsegregation außerdem zu einer Minderung der Kristallqualität führen. Die Wahl der Dotierstoffkonzentration ist dabei stets ein Kompromiss zwischen diesen Grenzen. Während die Entartung bei Ge bereits bei  $N = 1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  einsetzt [2, S. 19], [2, S. 789] liegt die Grenze bei Si im Bereich  $N = 1 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  [2, S. 19], [2, S. 789]. Da es sich bei  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  um einen Legierungshalbleiter mit überwiegenden Anteilen von Si

und Ge handelt wurde eine Dotierstoffkonzentration von  $N = 5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  als erste Abschätzung gewählt.

### 6.1.2. Analyse der Kristallqualität mittels XRD

In Abb. 6-4 ist der Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Proben *3-5.0Sn-200C* bis *3-12.5Sn-200C* dargestellt.

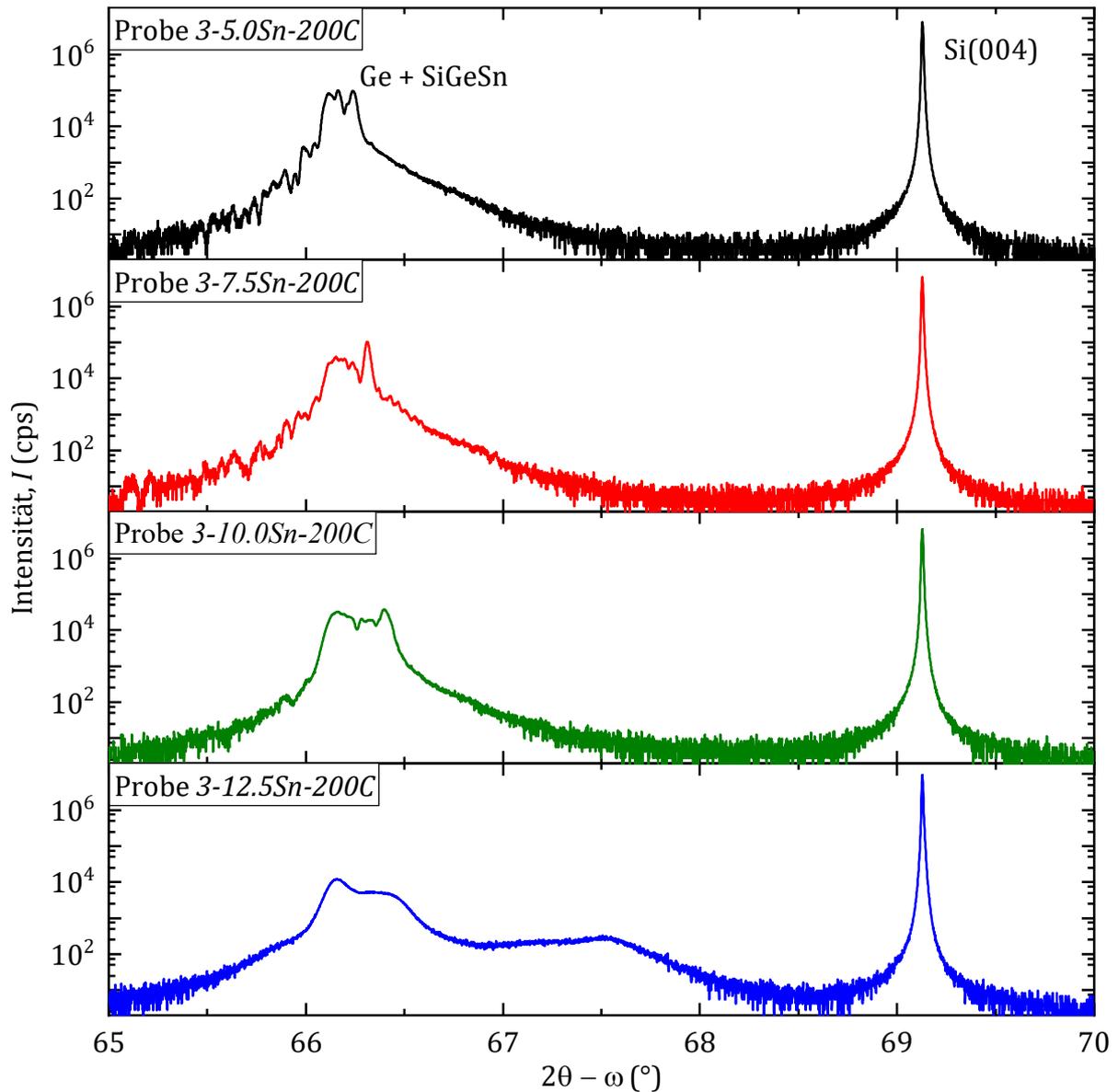


Abb. 6-4: Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Proben *3-5.0Sn-200C* bis *3-12.5Sn-200C*.

Die Proben mit einer Sn-Konzentration bis zu  $c_{\text{Sn}} = 10\%$  zeigen dabei scharfe einzelne Reflexe, welche sich dem fünffach gestapelten Ge-VS und dem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schichtstapel zuordnen lassen. Bemerkenswert sind dabei die drei einzelnen ausgeprägten Reflexe des

$\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schichtstapels. Bei besonders hohen Dotierstoffkonzentrationen wie in diesem Fall hat auch der Dotierstoff einen Einfluss auf die Gitterkonstante  $a_{0,\text{SiGeSn}}$ . Hierbei führt das im Vergleich zu den Matrixelementen kleinere Element B zu einer Verkleinerung und das größere Element Sb zu einer Vergrößerung der Gitterkonstante  $a_{0,\text{SiGeSn}}$ . Diese geringfügigen Änderungen sind bei hoher Kristallqualität bereits im hochaufgelösten  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum erkennbar.

Im  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum der Probe *3-12.5Sn-200C* zeigt sich jedoch eine deutliche Verschiebung des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes hin zu größeren Winkeln. Die Ursache hierfür ist eine erhöhte Sn-Segregation. Dies ist besonders bemerkenswert, da die in Kapitel 5 bestimmte, optimale Substrattemperatur von  $T_S = 200\text{ °C}$  eingehalten wurde. Während die Segregation von Sb ab einer bestimmten Oberflächenkonzentration in einen Gleichgewichtszustand fällt [43], [67], scheint die Sn-Segregation stetig weiter zuzunehmen. Überschreitet die Oberflächenkonzentration von Sn die Menge einer Monolage kommt dabei, wie in Abschnitt 2.2 beschrieben, zum Verlust der Kristallinformation und zum Zusammenbruch der Epitaxie. Ein weiteres Anzeichen für die erhöhte Sn-Segregation ist die Bildung von  $\beta$ -Sn-Tropfen auf der Substratoberfläche. Diese sind in der Mikroskop-Aufnahme in Abb. 6-5 deutlich erkennbar.

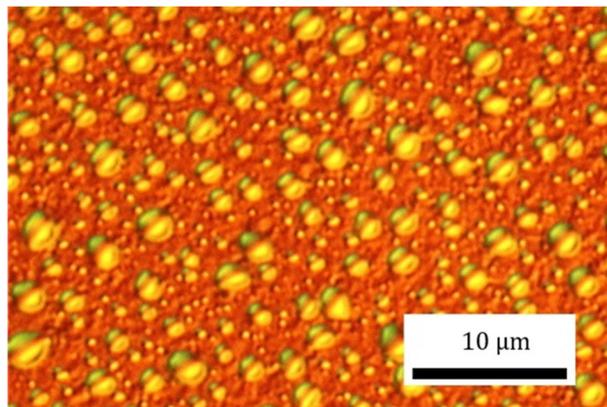


Abb. 6-5: Mikroskopaufnahme der Oberfläche der Probe *3-12.5Sn-200C*.

Im nächsten Schritt wurde für die Epitaxie der Diodenstruktur mit  $c_{\text{Sn}} = 12,5\%$  daher die Substrattemperatur in zwei Schritten zunächst auf  $T_S = 180\text{ °C}$  und weiter auf  $T_S = 160\text{ °C}$  verringert. Die Verringerung der Substrattemperatur hat dabei die Verringerung der Sn-Segregation zum Ziel. Der Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Proben *3-12.5Sn-200C*, *3-12.5Sn-180C* und *3-12.5Sn-160C* ist in Abb. 6-6 dargestellt.

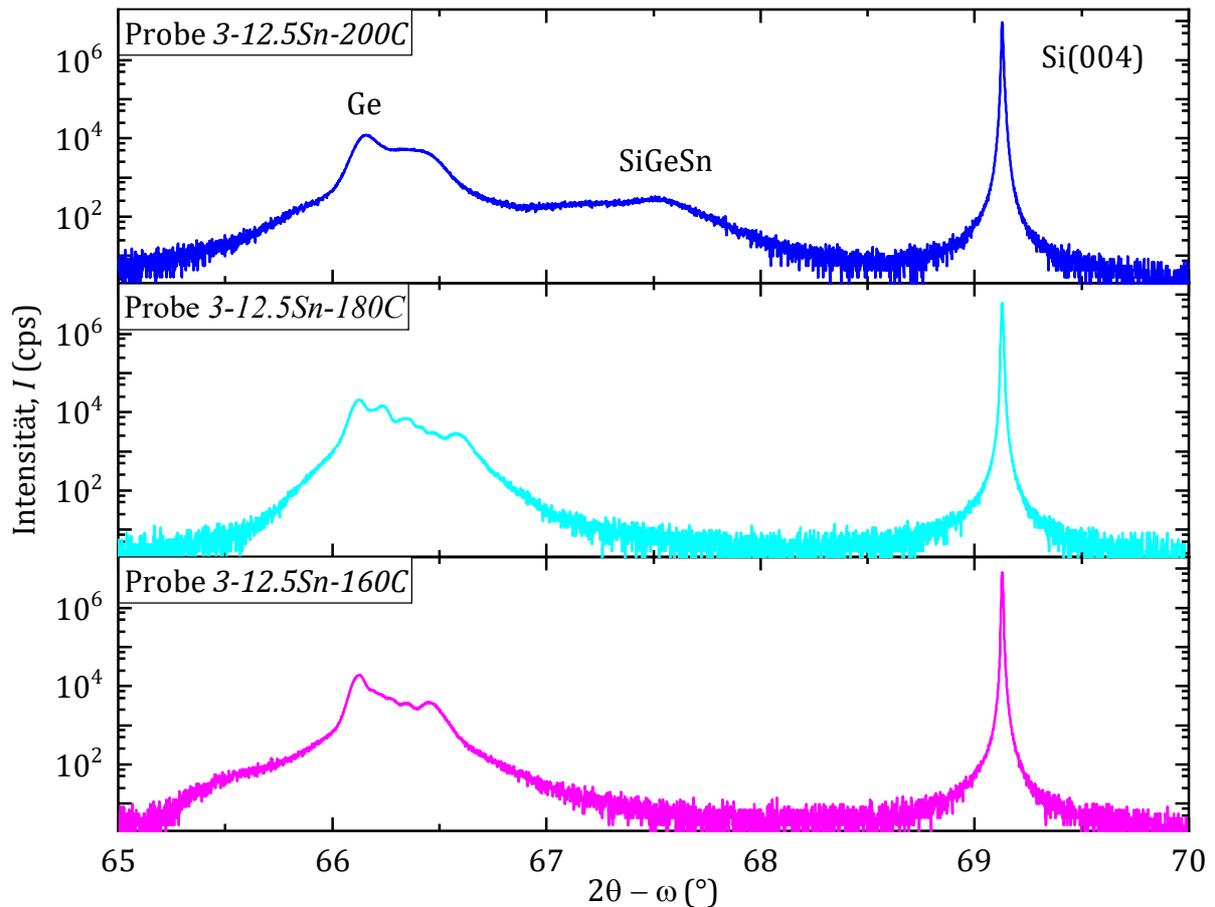


Abb. 6-6: Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der Proben 3-12.5Sn-200C, 3-12.5Sn-180C und 3-12.5Sn-160C.

Es zeigt sich, dass der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörige Reflex mit sinkender Substrattemperatur hin zum Ge zugehörigen Reflex verschoben wird. Dennoch ist auch bei Probe 3-12.5Sn-160C eine Verbreiterung der Reflex-Basis zu erkennen, was auf eine Inhomogenität der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht hinweist. Darüber hinaus wurde an allen drei Proben 3-12.5Sn eine Poly-Analyse durchgeführt, deren Ergebnis im Vergleich der  $2\theta$ -Spektren in Abb. 6-7 zusammengefasst ist.

Hierbei zeigt sich besonders die Degradation der Schichtqualität mit sinkender Substrattemperatur durch die Ausbildung von Polykristallinität. Diese ist gekennzeichnet durch die zusätzlichen Reflexe im  $2\theta$ -Spektrum der Proben 3-12.5Sn-180C und 3-12.5Sn-160C. Diese Reflexe sind im  $2\theta$ -Spektrum der Probe 3-12.5Sn-200C nicht erkennbar. Im  $2\theta$ -Spektrum der Probe 3-12.5Sn-200C sind jedoch die scharfen Reflexe mit geringer Intensität bei  $2\theta \approx 31^\circ$  und im Bereich  $40^\circ \leq 2\theta \leq 45^\circ$  besonders bemerkenswert. Eine Simulation des  $2\theta$ -Spektrums von metallischem  $\beta$ -Sn zeigt eine deutliche Übereinstimmung mit den betreffenden Reflexen. Dadurch sind die tropfenartigen

Strukturen auf der Oberfläche der Probe *3-12.5Sn-200C* eindeutig als metallische  $\beta$ -Sn-Tropfen identifizierbar.

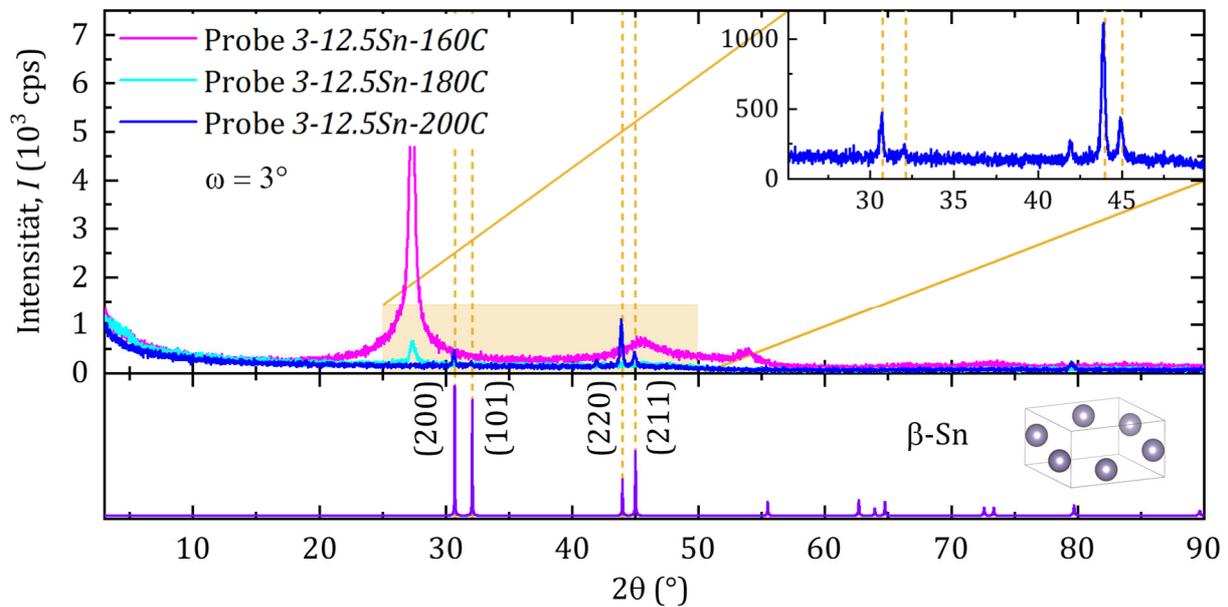


Abb. 6-7: Vergleich der  $2\theta$ -Spektren der Proben *3-12.5Sn-160C*, *3-12.5Sn-180C* und *3-12.5Sn-200C* (oben) mit dem simulierten  $2\theta$ -Spektrum von metallischem  $\beta$ -Sn

Der Vollständigkeit halber wurde zusätzlich eine Probe *3-15.0Sn-160C* mit  $c_{\text{Sn}} = 15\%$  bei  $T_s = 160^\circ\text{C}$  hergestellt. Das  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum in Abb. 6-8 zeigt auch hier eine deutliche Verbreiterung des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes hin zu größeren Winkeln, hervorgerufen durch die Sn-Segregation. Daneben ist ein sehr breiter Reflex niedriger Intensität bei  $2\theta = 65,4^\circ$  zu erkennen. Eine mögliche Erklärung ist die Zerlegung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht in Teilschichten mit unterschiedlicher Si- bzw. Sn-Konzentration.

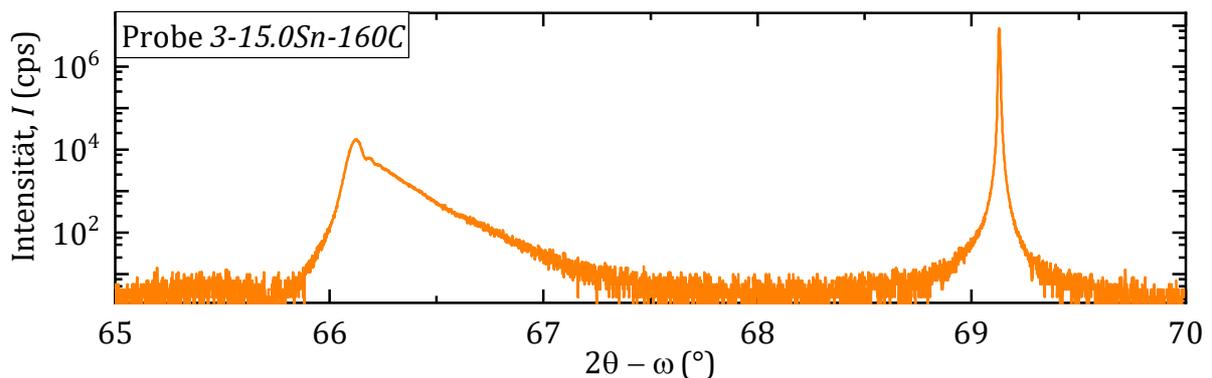


Abb. 6-8:  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum der Probe *3-15.0Sn-160C*.

Das Ergebnis der Poly-Analyse im  $2\theta$ -Spektrum in Abb. 6-9 zeigt auch hier deutliche Anzeichen von Polykristallinität. Es gibt daher offensichtlich keine Substrattemperatur,

die die Herstellung des in Abb. 6-1 dargestellten Schichtstapels mit den Sn-Konzentrationen  $c_{\text{Sn}} = 12,5\%$  und  $c_{\text{Sn}} = 15,0\%$  in ausreichender Kristallqualität erlaubt. Es gibt folglich eine kombinierte Limitierung der Gesamtschichtdicke  $d_{\text{SiGeSn}}$  und der Sn-Konzentration  $c_{\text{Sn}}$  für die Epitaxie von auf Ge gitterangepasstem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ .

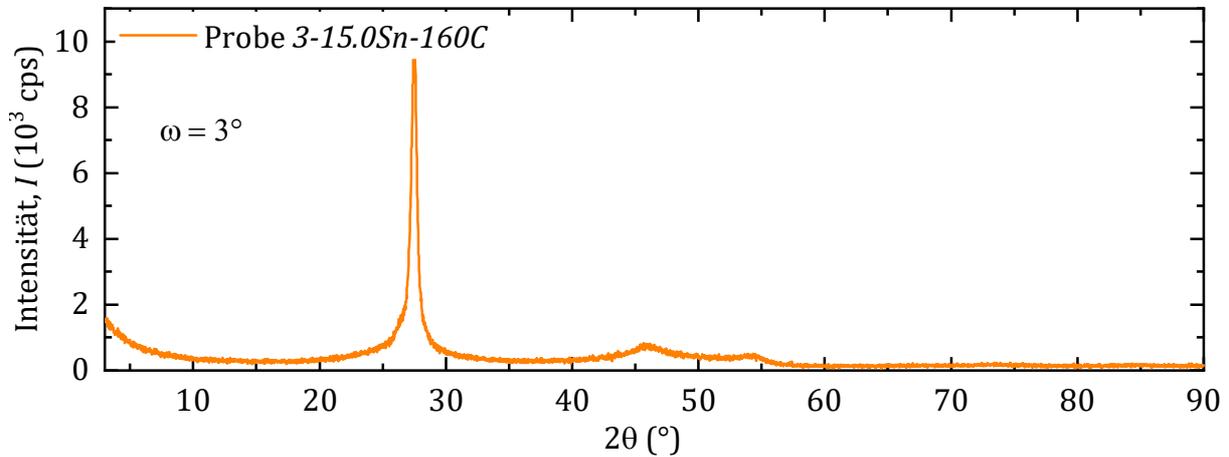


Abb. 6-9:  $2\theta$ -Spektrum der Probe 3-15.0Sn-160C

Die zuvor in Kapitel 5 gezeigte Bewertungsmatrix in Tab. 5-11 der optimalen Substrattemperatur wurde daher wie in Tab. 5-11 dahingehend erweitert.

Eine möglicher Lösungsansatz, um dennoch  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Bauteilstrukturen in diesem Konzentrationsbereich herstellen zu können, ist zunächst die aggressive Reduktion der Schichtdicken.

$T_s$ (°C)	160	200	250	300
$c_{\text{Sn}}$ (%)				
2,5	✓	✓	✓	✓
5,0	✓	✓	✓	✓
7,5	✓	✓	✗	✗
10,0	✓	✓	✗	✗
12,5	✗	✓	✗	✗
15,0	✗	✓	✗	✗

Tab. 6-2: Bewertungsmatrix zur qualitativen Bewertung der Substrattemperatur zur Epitaxie von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ .

Da die Sn-Segregation außerdem von der Wachstumsrate  $R_{\text{SiGeSn}}$  abhängt, ist ein weiterer möglicher Lösungsansatz deren Steigerung, wodurch die Sn-Segregation verringert wird.

Allerdings ergibt sich dadurch ein weiteres Problem: Da für dieselbe Zusammensetzung bei höherer Wachstumsrate entsprechend hohe Si und Sn-Flüsse notwendig sind kommen in diesem Bereich die Molekularstrahlquellen in ihren Grenzbereich. Besonders beim Si-ESV sinkt in diesem Bereich die Langzeitstabilität und Reproduzierbarkeit des Flusses. An dieser Stelle ergibt sich wieder die Notwendigkeit der aktiven und vor allem präzisen Regelung des Si-Flusses. Im Ausblick dieser Arbeit wird dieser Punkt noch eingehend diskutiert.

### 6.1.3. Analyse der Zusammensetzung mittels RBS

Zur weiteren Charakterisierung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Homodioden wurden diese einer RBS-Analyse unterzogen. Die RBS-Analyse und die nachfolgende Auswertung wurde von Oliver Steuer am Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR) durchgeführt. In Abb. 6-10 sind zunächst die RBS-Spektren des zufälligen und des Channeling-Signals der Probenserie 3 im Vergleich dargestellt.

Bei den Proben mit einer Sn-Konzentration von  $c_{\text{Sn}} = 12,5 \%$  und  $c_{\text{Sn}} = 15 \%$  wurden jeweils nur die Proben *3-12.5Sn-180C* und *3-15.0Sn-160C* analysiert. Die anschließende Simulation und Anpassung der Messergebnisse erlaubt die Bestimmung der tatsächlichen Schichtzusammensetzung und Schichtdicken. Da die Probenstücke der Wafermitte der Bauteilprozessierung vorbehalten sind erfolgten diese Analysen an Randstücken. Der Messfleck mit einem Durchmesser von  $D_{\text{RBS}} = 1 \text{ mm}$  befand sich 45 mm von der Wafermitte entfernt. Dies ist für die weitere Auswertung von Bedeutung, da alle Messergebnisse unter Verwendung der in Kapitel 4 charakterisierten Verteilung der Molekularstrahlflüsse auf die Wafermitte als Bezugspunkt zurückgerechnet wurden.

Im Gegensatz zu den Ergebnissen der RBS-Analyse der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserie 1 lassen sich die Peaks hier allerdings optisch nur schwer direkt den einzelnen Bestandteilen des Schichtstapels zuordnen. An der Höhe des Channeling-Signals zeigt sich jedoch, dass alle Proben eine sehr hohe Zahl an Punktdefekten ausweisen. Andererseits beträgt hier die Schichtdicke des gesamten Schichtstapels  $d_{\text{SiGeSn}} = 900 \text{ nm}$  und somit deutlich mehr als bei den zuvor diskutierten Probenserien 1.1, 1.2 und 2.

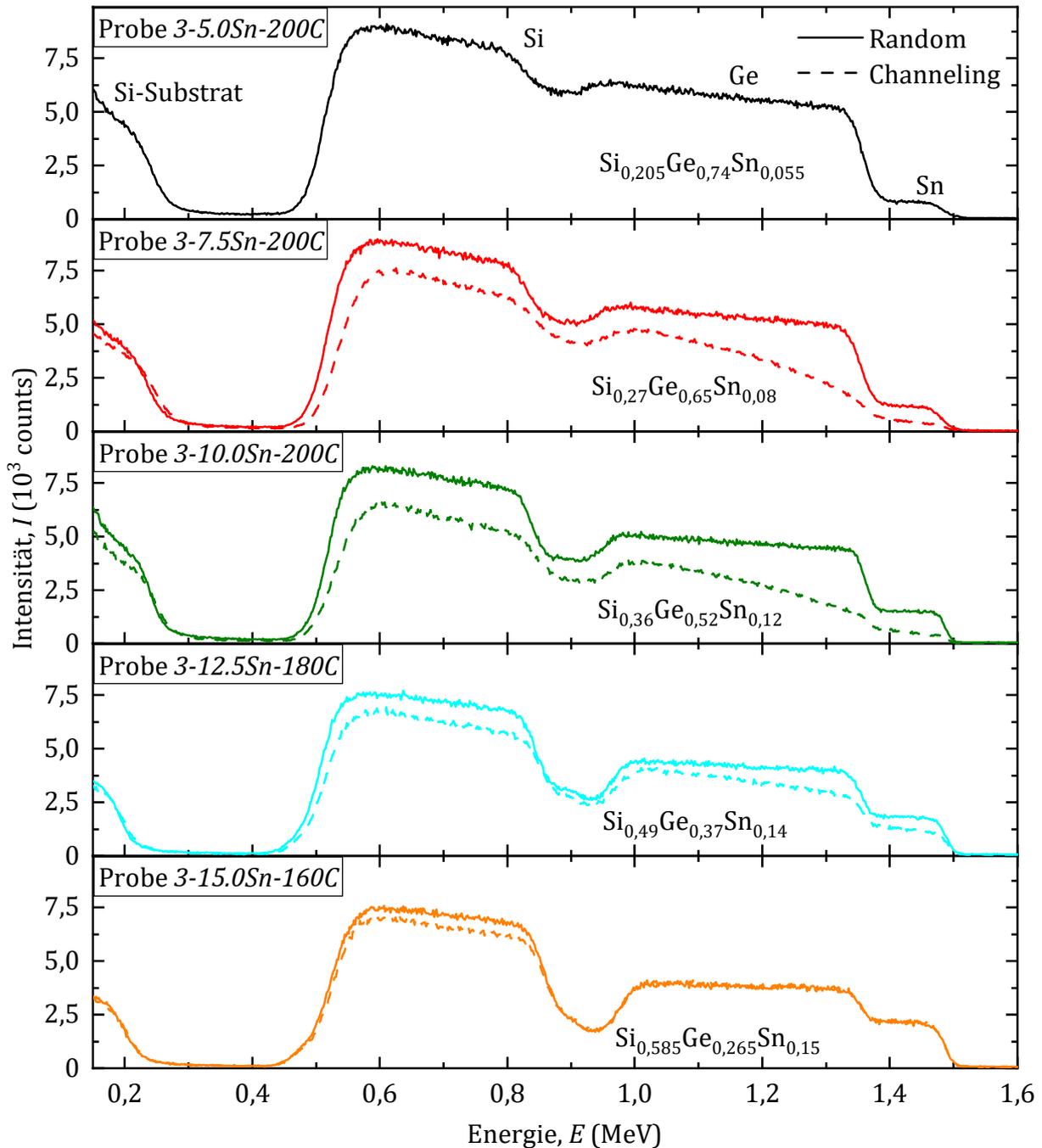


Abb. 6-10: Zusammenfassung der RBS-Spektren der Probenserie 3.

Neben der Bestimmung der exakten Schichtzusammensetzung erlauben die Ergebnisse der RBS-Analyse eine qualitative Bewertung der Kristallqualität. Als Basis hierzu dient die Höhe des „Channeling“-Signals. Es ist direkt proportional mit der Zahl der Atome auf Zwischengitterplätzen, welche die Kristallqualität und außerdem die elektrischen Eigenschaften negativ beeinflussen.

Bei der Definition des Simulationsmodells wurde der Schichtstapel gemäß Abb. 6-1 in seine vier Hauptbestandteile zerlegt: Ge-VS, p- $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ , i- $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  und n- $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ . Daher konnten mithilfe der Simulation auch die Dicken der einzelnen Schichten bestimmt werden. Die Ergebnisse der RBS-Analyse wurden hierbei bereits auf die Wafermitte zurückgerechnet. Zusätzlich wurde mithilfe von Gleichung (4-2) und der tatsächlichen Zusammensetzung die relaxierte Gitterkonstante  $a_{0,\text{RBS}}$  berechnet. Diese wurden mit der relaxierten Gitterkonstante der XRD-Analyse  $a_{0,\text{XRD}}$ , welche aus der RSM-Analyse extrahiert wurde, verglichen. Eine vollständige Zusammenfassung der Ergebnisse der Auswertung der RBS-Analyse ist in Tab. 6-3 dargestellt.

Probe		$d$ (nm)	$c_{\text{Si}}$ (%)	$c_{\text{Ge}}$ (%)	$c_{\text{Sn}}$ (%)	$a_{0,\text{RBS}}$ (Å)	$a_{0,\text{XRD}}$ (Å)
<b>3-5.0Sn-200C</b>	n	212,6	20,5	74,0	5,5	5,6568	5,6546
	i	255,2	20,5	74,0	5,5	5,6568	5,6546
	p	425,3	20,5	74,0	5,5	5,6568	5,6546
<b>3-7.5Sn-200C</b>	n	221,1	27,0	65,0	8,0	5,6629	5,6526
	i	331,7	27,0	65,0	8,0	5,6629	5,6526
	p	431,8	27,0	65,0	8,0	5,6629	5,6526
<b>3-10.0Sn-200C</b>	n	207,8	34,0	54,0	12,0	5,6803	5,6536
	i	283,3	36,0	52,0	12,0	5,6758	5,6477
	p	440,6	38,0	50,0	12,0	5,6712	5,6438
<b>3-12.5Sn-180C</b>	n	205,1	48,0	38,0	14,0	5,6652	5,6525
	i	323,9	49,0	37,0	14,0	5,6630	5,6462
	p	335,1	51,0	35,0	14,0	5,6584	5,6358
<b>3-15.0Sn-160C</b>	n	226,6	55,0	29,0	16,0	5,6660	5,6538
	i	274,4	58,5	26,5	15,0	5,6498	5,6538
	p	346,5	58,5	26,5	15,0	5,6498	5,6538

Tab. 6-3: Zusammenfassung der aus der RBS-Messung extrahierten tatsächlichen Schichtzusammensetzungen, Schichtdicken und Kristallparameter der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserie 3.

Zunächst fällt auf, dass die Sn-Konzentrationen bei den Proben *3-5.0Sn-200C* und *3-7.5Sn-200C* mit einer maximalen Abweichung von  $\Delta c_{\text{Sn}} = 0,5 \%$  sehr gut den nominellen Werten entsprechen. Ab einer nominellen Sn-Konzentration von  $c_{\text{Sn}} = 10 \%$  kommt es jedoch zu Abweichungen von bis zu  $\Delta c_{\text{Sn}} = 2 \%$ . Außerdem schwankt die Si-Konzentration  $c_{\text{Si}}$  sowohl über die Probenserie hinweg als auch innerhalb des Schichtstapels. Hierdurch schwankt auch das Verhältnis des Si- und Sn-Flusses und somit die Bedingung der Gitteranpassung. Die Abweichungen sind auch bei dieser Serie auf die schlechte Reproduzierbarkeit des Si-Flusses zurückzuführen. Durch die zuvor beschriebene Methode zur Änderung der Zusammensetzung hat außerdem die Höhe des Ge-Flusses maßgeblichen Einfluss auf die tatsächliche Zusammensetzung. Im Ausblick der Dissertation werden daher noch weitere Möglichkeiten diskutiert, um die angestrebten Zusammensetzungen noch exakter zu reproduzieren.

## 6.2. Epitaxie von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Heterodioden

### 6.2.1. Schichtaufbau und Epitaxie

Die nächste Probenserie 4 beschreibt die Epitaxie von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Ge Heterodioden. Die elektrische Charakterisierung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Heterodioden in Kapitel 7 erlaubt die Bestimmung der Leitungs- und Valenzbandversätze  $\Delta E_L$  und  $\Delta E_V$  von auf Ge gitterangepasstem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ . Der Schichtstapel inklusive Schichtdicken und Dotierstoffkonzentrationen ist in Abb. 6-11 dargestellt. Eine komplette Probenübersicht zeigt Tab. 3-2

$n^{++}\text{-Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$	$d = 100 \text{ nm}$	$N_D = 5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$
p-Ge	$d = 100 \text{ nm}$	$N_A = 1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
$p^{++}\text{-Ge}$	$d = 300 \text{ nm}$	$N_A = 1 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$
$p^{++}\text{-Ge-VS}$	$d_{\text{Ge-VS}} = 100 \text{ nm}$	$N_A = 1 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$
Si-Puffer	$d_{\text{Si-Puffer}} = 50 \text{ nm}$	
$\text{Si}(100) \rho > 1000 \text{ } \Omega\text{cm}$		

Abb. 6-11: Schichtstapel der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserie 4

Der Schichtstapel basiert dabei, im Gegensatz zu den zuvor diskutierten Probenserien 1.1, 1.2, 2, und 3 auf hochohmigen p-typ dotierten Substraten mit einem spezifischen Schichtwiderstand von  $\rho > 1000 \text{ } \Omega\text{cm}$ . Die Ursache hierfür ist, dass die Proben außerhalb des Rahmens dieser Arbeit für Hochfrequenzmessungen verwenden zu können. Durch den hohen Schichtwiderstand des Substrats und einen erweiterten Herstellungsprozess können die Dioden auf diese Weise voneinander isoliert betrachtet werden.

Der Epitaxieprozess beginnt zunächst wieder mit der thermischen Desorption und der Abscheidung des Si-Puffers. Auf den Si-Puffer wurde anschließend das Ge-VS, welches bei der Probenserie 4 hoch p-typ dotiert ist, abgeschieden. Die Dotierstoffkonzentration beträgt hierbei  $N_A = 1 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ . Die Motivation hierfür ist die Integration des Ge-VS in die untere p-typ dotierte Kontaktschicht der Diodenstruktur. Dies erlaubt wiederum eine

Reduktion der Gesamtschichtdicke. Die Abscheidung des p-typ dotierten Ge-VS erfolgt dabei wie bei intrinsischem Ge bei  $T_S = 330\text{ °C}$ . Im Anschluss an den thermischen Ausheilschritt zur Formierung des Ge-VS wird die Substrattemperatur erneut auf  $T_S = 330\text{ °C}$  reduziert und eine weitere hoch p-typ dotierte Ge-Schicht mit  $d = 300\text{ nm}$  und  $N_A = 1 \cdot 10^{20}\text{ cm}^{-3}$  abgeschieden.

Den eigentlichen Heteroübergang bilden eine p-typ dotierte Ge-Schicht mit  $d = 100\text{ nm}$  und  $N_A = 1 \cdot 10^{18}\text{ cm}^{-3}$  und eine n-typ dotierte  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht mit  $d_{\text{SiGeSn}} = 100\text{ nm}$  und  $N_D = 5 \cdot 10^{19}\text{ cm}^{-3}$ . Nach einer Wachstumsunterbrechung zur Absenkung der Temperatur der B-Zelle erfolgt die Abscheidung der Ge-Schicht ebenfalls bei  $T_S = 330\text{ °C}$ . Die Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht variiert gemäß der in Tab. 3-2 dargestellten Probenübersicht.

Probe	$c_{\text{Si}}$ (%)	$c_{\text{Ge}}$ (%)	$c_{\text{Sn}}$ (%)
<b>4-5.0Sn</b>	18,4	76,7	5,0
<b>4-7.5Sn</b>	27,5	65,0	7,5
<b>4-10.0Sn</b>	36,7	53,3	10,0
<b>4-12.5Sn</b>	45,9	41,6	12,5
<b>4-15.0Sn</b>	55,1	30,0	15,0

Tab. 6-4: Übersicht der Proben und deren  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht-Zusammensetzungen der SiGeSn-Probenserie 4.

Ebenso wie bei Probenserie 3 wurde die Substrattemperatur  $T_S$  während der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxie hier mit einer konstanten Heizleistung auf einen Wert von  $T_S = 200\text{ °C}$  eingestellt.

Eine Übersicht der Prozessparameter ist exemplarisch für die Probe 4-7.5Sn in Abb. 6-12 dargestellt. Der Verlauf der Substrattemperatur entspricht dabei den mit dem Thermoelement gemessenen Werten.

Ein bedeutender Unterschied zum zuvor diskutierten Epitaxieprozess der Probenserie 3 ist die Regelung des Si-Flusses. Während bei der Probenserie 3 eine konstante Verdampferleistung in den Si-ESV eingepreßt wurde, erfolgt hier eine Regelung des Si-Flusses mithilfe des QMS. Die negativen Auswirkungen der Si-Flussregelung mithilfe des

QMS wurden bereits in Abschnitt 4.3.2 beschrieben. Sie resultieren in einer leichten Änderung der Si-Konzentration und somit der Gitteranpassung der Proben untereinander.

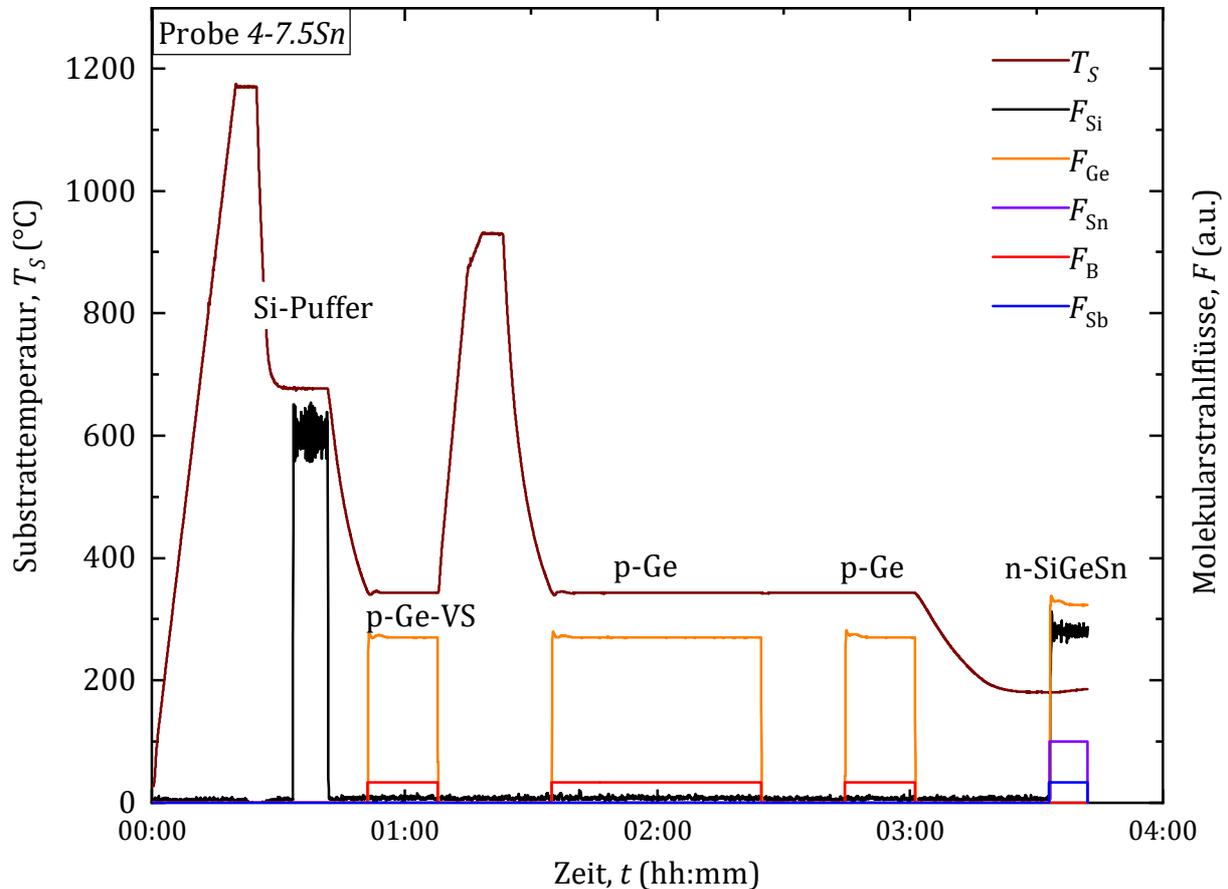


Abb. 6-12: Verlauf Epitaxie-Parameter der Probe 4-7.5Sn: Substrattemperatur  $T_s$ , gemessen mit dem Thermoelement. Zusätzlich ist der Verlauf der Molekularstrahlflüsse dargestellt, um die Wachstumsphasen der einzelnen Schichten hervorzuheben.

Da der Schwerpunkt dieser Probenserie 4 auf dem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Ge Heteroübergang liegt, konnte die  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schichtdicke hier deutlich auf  $d_{\text{SiGeSn}} = 100 \text{ nm}$  reduziert werden. Dies ist besonders mit Blick auf die Erkenntnisse der Epitaxie der Probenserie 3 von Vorteil. Aufgrund der reduzierten Schichtdicke weist hier die Probe mit einer Sn-Konzentration von  $c_{\text{Sn}} = 12,5 \%$  auch eine ausreichende Kristallqualität auf.

## 6.2.2. Analyse der Kristallqualität mittels XRD

Die Kristallqualität wurde auch hier mithilfe von XRD analysiert. Die Übersicht der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren der einzelnen Proben ist in Abb. 6-13 dargestellt. Die Änderung der Gitteranpassung zeigt sich hier deutlich in der Verschiebung des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes. Im Vergleich zu den Probenserien 2 und 3 sind hier allerdings keine Dickenoszillationen in den  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren zu beobachten. Dies ist ein Hinweis auf die Ausbildung erster Versetzungslinien an der Grenzfläche zwischen der Ge und der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht.

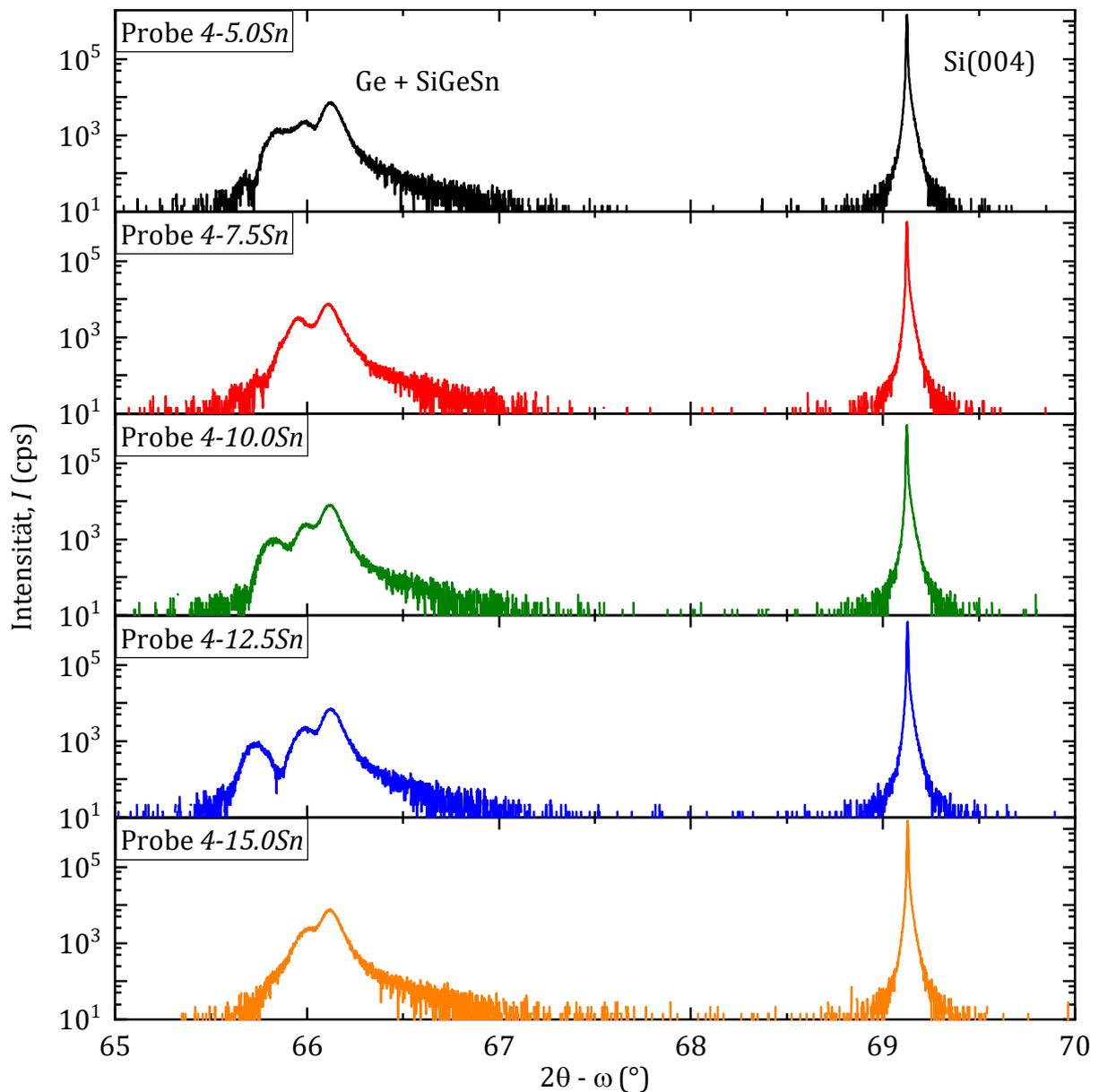


Abb. 6-13: Vergleich der  $2\theta$ - $\omega$ -Spektren des symmetrischen (004)-Reflexes der Probenserie 4.

Bemerkenswert ist, dass die Proben *4-12.5Sn* und *4-15.0Sn* ebenfalls einen klar zu unterscheidenden Reflex bei  $2\theta \approx 66^\circ$  aufweisen. Im Gegensatz zur Probenserie 3 ist bei dieser Probenserie keine Sn-Segregation bei  $T_S = 200^\circ\text{C}$  und  $c_{\text{Sn}} \geq 12,5\%$  zu beobachten. Dies steht im Einklang mit den Ergebnissen der Variation der Substrattemperatur in Kapitel 5. Es unterstreicht zudem die Vermutung, dass es bei dieser Sn-Konzentration und Substrattemperatur erst ab einer gewissen Dicke der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht  $d_{\text{SiGeSn}}$  zur erhöhten Sn-Segregation und zum Zusammenbruch der Epitaxie kommt.

Zur quantitativen Bestimmung des Verspannungszustandes der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht wurde von jeder Probe ein RSM-Spektrum aufgezeichnet. Die Spektren sind in Abb. 6-14 dargestellt. Die Reflexe der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht haben dabei durchgehend eine vergleichbare Intensität bis zu einer Sn-Konzentration von  $c_{\text{Sn}} = 15\%$ . Trotz der Nicht-Erfüllung der Bedingung zur Gitteranpassung auf Ge beweist die vertikale Ausrichtung des Ge und des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes die Pseudomorphie der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht.

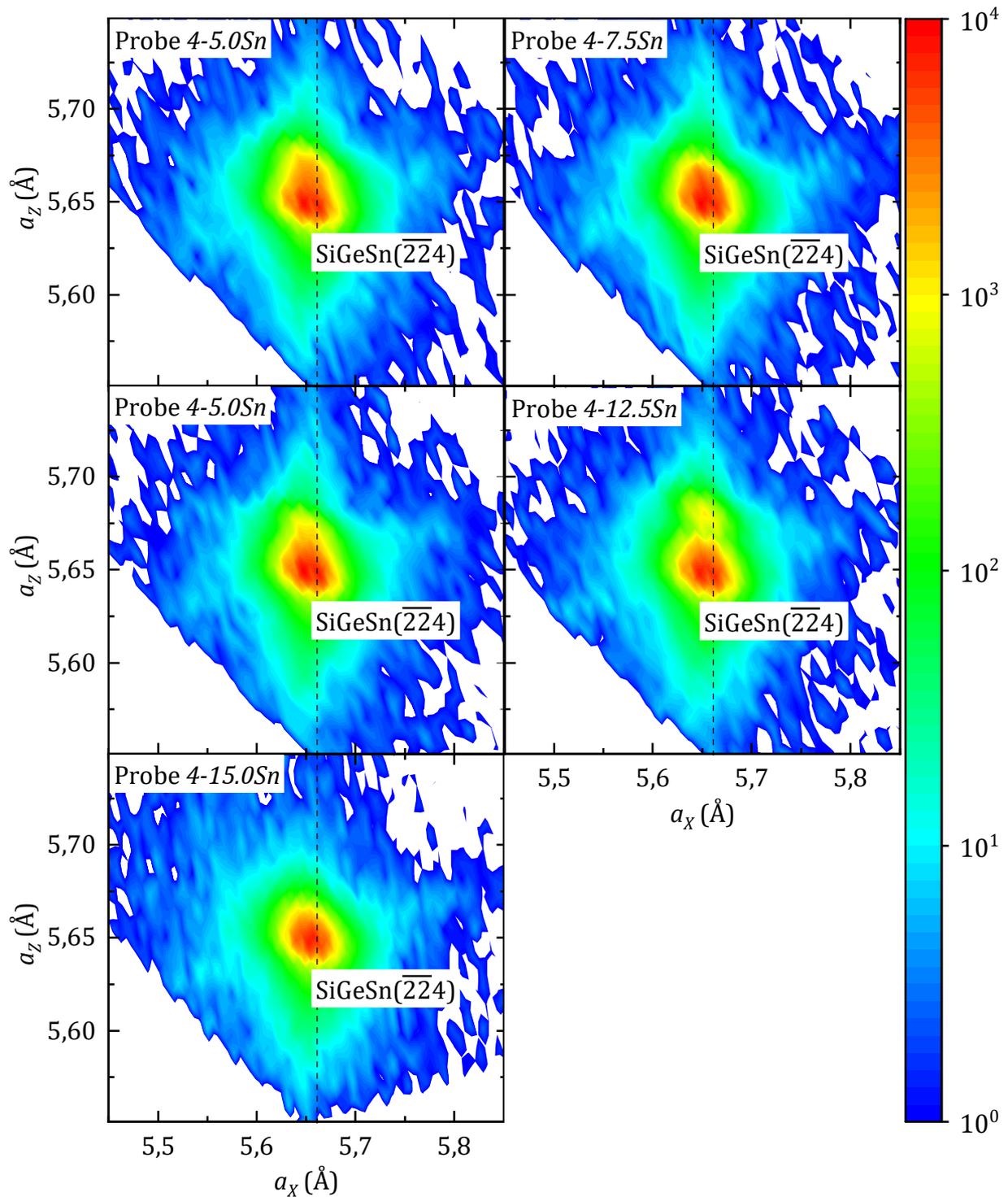


Abb. 6-14: Komplettübersicht der XRD-RSM-Spektren des asymmetrischen  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y(\overline{224})$ -Reflexes der Probenserie 4.

Anschließend wurden, wie schon bei den vorigen Probenserien, die Kristallparameter der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht extrahiert. Die Ergebnisse sind in Tab. 6-5 zusammengefasst.

Probe	Reflex	$a_{\perp}$ (Å)	$a_{\parallel}$ (Å)	$a_0$ (Å)	$\varepsilon_{\parallel}$ (%)
<b>4-5.0Sn</b>	Ge	5,6480	5,6536	5,6504	0,057
	SiGeSn	5,6610	5,6572	5,6594	-0,038
<b>4-7.5Sn</b>	Ge	5,6489	5,6541	5,6512	0,052
	SiGeSn	5,6600	5,6542	5,6575	-0,058
<b>4-10.0Sn</b>	Ge	5,6490	5,6540	5,6512	0,050
	SiGeSn	5,6682	5,6528	5,6615	-0,154
<b>4-12.5Sn</b>	Ge	5,6487	5,6548	5,6513	0,061
	SiGeSn	5,6777	5,6541	5,6674	-0,236
<b>4-15.0Sn</b>	Ge/SiGeSn	5,6487	5,6547	5,6513	0,060

Tab. 6-5: Zusammenfassung der aus der XRD-RSM-Analyse extrahierten Kristallparameter  $a_{\perp}$ ,  $a_{\parallel}$ ,  $a_0$  und  $\varepsilon_{\parallel}$  der Probenserie 4.

Aus der direkt extrahierten lateralen Gitterkonstante  $a_{\parallel}$  und der vertikalen Gitterkonstante  $a_{\perp}$  wurde unter Verwendung von Gleichung 2-22 und 2-23 die relaxierte Gitterkonstante  $a_0$  und die resultierende laterale Verspannung  $\varepsilon_{\parallel}$  berechnet. Aufgrund der beobachteten Schwankung des Si-Flusses ergibt sich für die Proben eine unterschiedliche residuale Druckverspannung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht zwischen  $-0,236 \% \leq \varepsilon_{\parallel} \leq -0,038 \%$ . Die Verspannung ist in der Größenordnung der üblichen Verspannung des Ge-VS, weshalb dennoch von verspannungsarmen  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schichten gesprochen werden kann.

### 6.2.3. TEM-Analysen

Zur weiteren Analyse der Kristallqualität wurde die Probenserie einer TEM-Analyse unterzogen. Die Analysen erlauben auch hier eine Bestimmung der Durchstoßversetzungsdichte  $N_{\text{TDD}}$ . Da die Probleme der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxie erfahrungsgemäß ab einer Sn-Konzentration von  $c_{\text{Sn}} = 10 \%$  verstärkt auftreten werden nur die Ergebnisse der Proben *4-10.0Sn*, *4-12.5Sn* und *4-15.0Sn* betrachtet.

In Abb. 6-15 a) ist exemplarisch eine TEM-Aufnahme der Probe *4-10.0Sn* dargestellt. Am Farbkontrast sind die einzelnen Materialien des Schichtstapels, Si, Ge und  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ ,

deutlich zu unterscheiden. Außerdem erkennt man die Ausbreitung der Durchstoßversetzungen, ausgehend von der Substrat Grenzfläche. Eine vergrößerte Detailaufnahme der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht in Abb. 6-15 b) eignet sich zur qualitativen Bewertung der Legierungshomogenität. Aufgrund der gleichmäßigen Färbung gibt es keine Hinweise auf lokale Häufungen von Sn-Atomen, hervorgerufen durch Sn-Segregation.

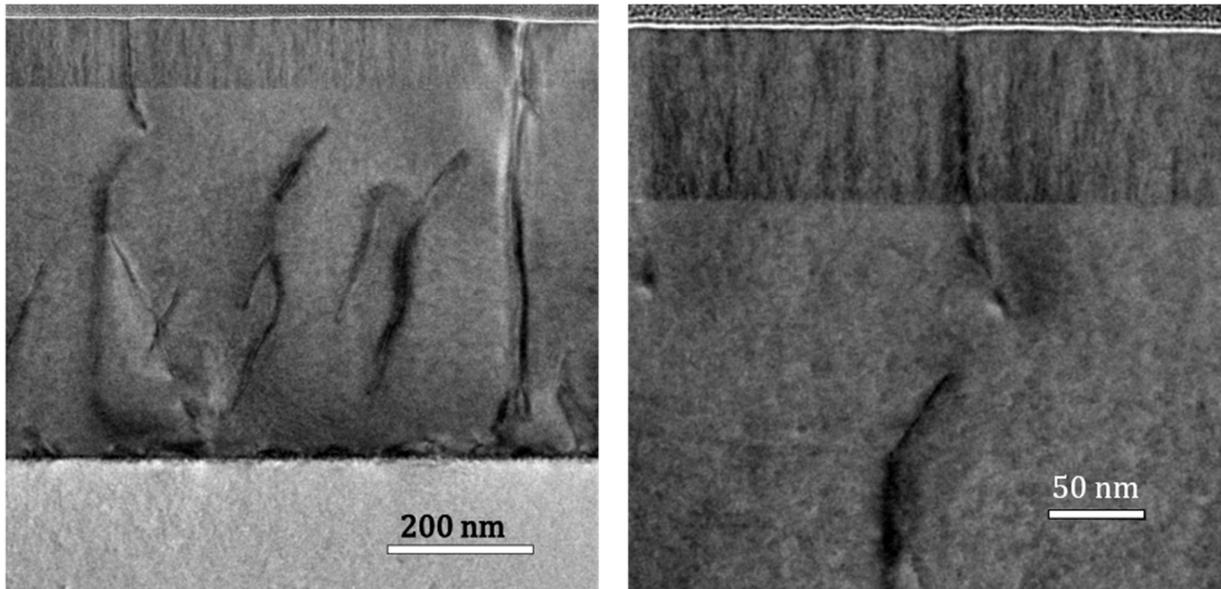


Abb. 6-15: Ergebnisse der TEM-Analyse der Probe 4-10.0Sn. a) Übersichtsaufnahme. b) Vergrößerte Detailaufnahme

Die Betrachtung vergleichbarer TEM-Aufnahmen der Probe 4-12.5Sn in Abb. 6-16 zeigen auch hier eine ähnliche Kristallqualität.

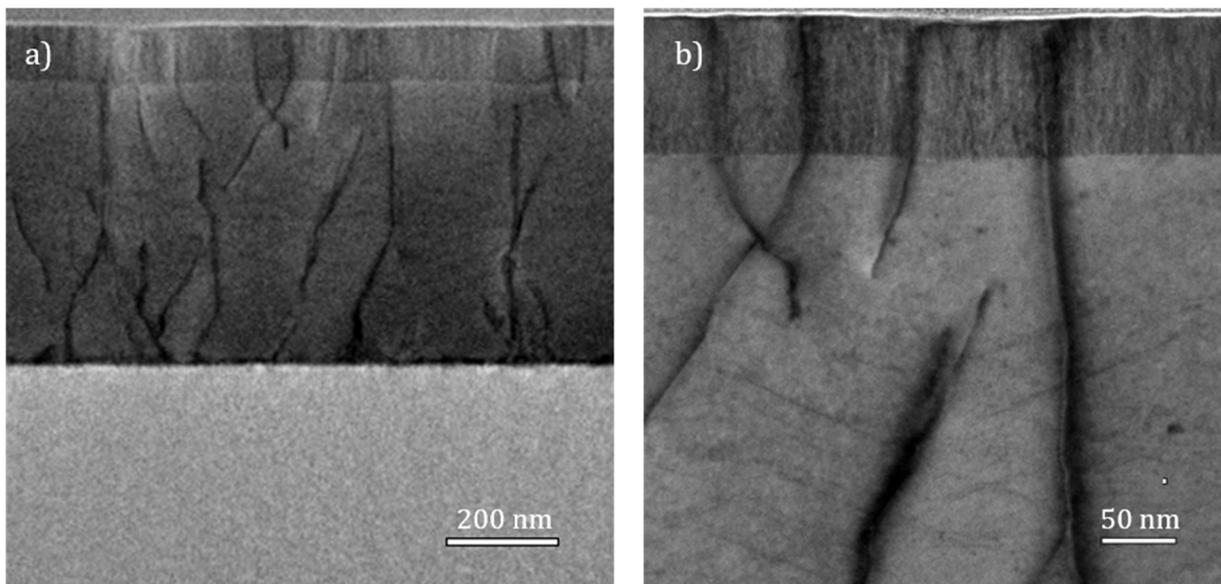


Abb. 6-16: Ergebnisse der TEM-Analyse der Probe 4-12.5Sn. a) Übersichtsaufnahme. b) Vergrößerte Detailaufnahme

Besonders auffallend ist hierbei jedoch die hohe Zahl an sichtbaren Durchstoßversetzungen, welche teilweise bis in die  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht hineinreichen. Da sich an dieser Grenzfläche der eigentliche pn-Übergang des Bauelements befindet, sind es vor allem diese Durchstoßversetzungen, die das elektrische Verhalten des Bauelements nachteilig beeinflussen. Die Detailaufnahme der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht in Abb. 6-16 b) lässt bei dieser Zusammensetzung dennoch keine Legierungsinhomogenitäten oder lokale Sn-Cluster erkennen.

In völligem Gegensatz dazu steht die TEM-Aufnahme der Probe *4-15.0Sn*, welche in Abb. 6-17 dargestellt ist. Es sind ausgedehnte Defektstrukturen innerhalb der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht zu erkennen. Die erkennbaren Strukturen sind sehr wahrscheinlich lokale Anzeichen von Phasenseparation, wie auch schon bei der Probe *2-15.0Sn-200C* beobachtet. Erkennbar ist außerdem die erhöhte Rauigkeit der Oberfläche der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht an der sichtbaren Defektstruktur. Die Zahl der Durchstoßversetzungen ist bei dieser Probe ähnlich hoch wie bei den zuvor betrachteten Proben *4-10.0Sn* und *4-12.5Sn*.

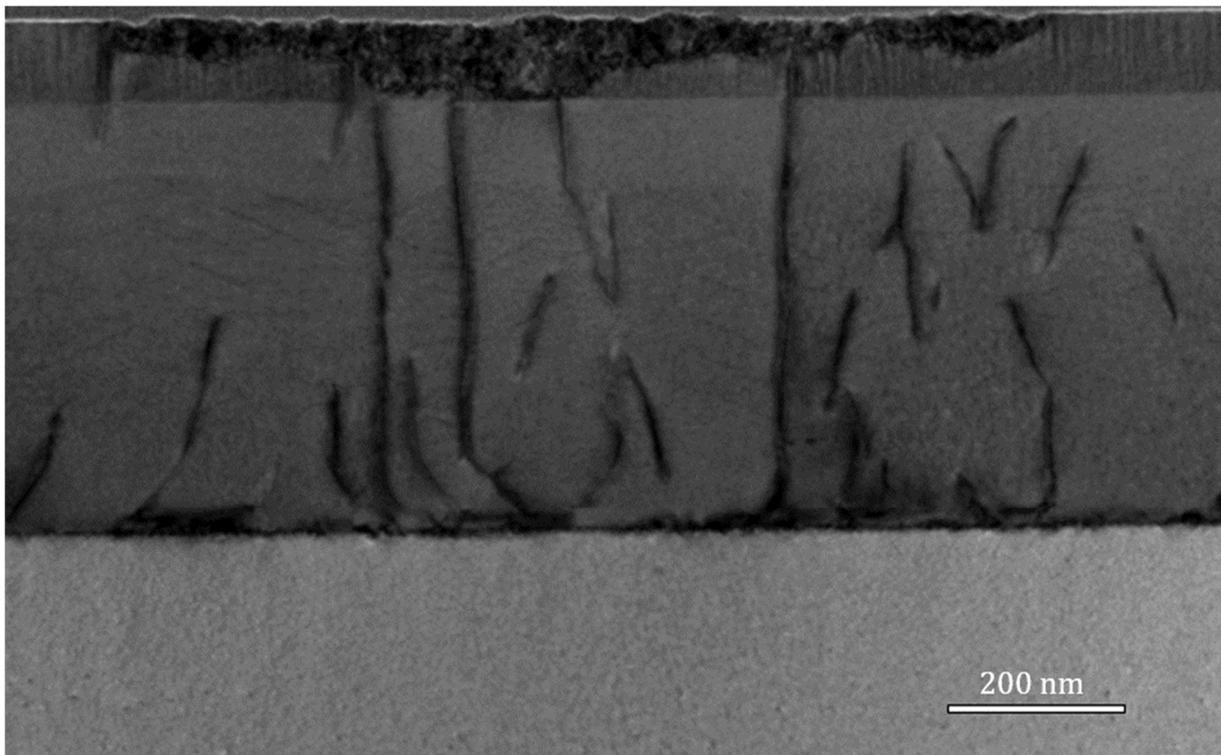


Abb. 6-17: Übersichts-TEM-Aufnahme der Probe *4-15.0Sn*.

Aufgrund des signifikanten Einflusses der Durchstoßversetzungsdichte  $N_{\text{TDD}}$  auf das elektrische Verhalten der Bauelemente wurde die Durchstoßversetzungsdichte  $N_{\text{TDD}}$

quantifiziert. Hierzu wurde ein größerer Ausschnitt der TEM-Aufnahme der Probe 4-15.0Sn betrachtet. Die Anzahl an erkennbaren Durchstoßversetzungen wurde mit der Größe des Ausschnitts in eine Dichte von  $N_{\text{TDD}} = 1 \cdot 10^{10} \pm 0,1 \text{ cm}^{-2}$  umgerechnet. Im Vergleich zur Probenserie 2 ist die Durchstoßversetzungsdichte bei dieser Probenserie also um eine Größenordnung höher. Zur Veranschaulichung ist in Abb. 6-18 eine TEM-Aufnahme eines größeren Ausschnitts der Probe 4-15.0Sn dargestellt.

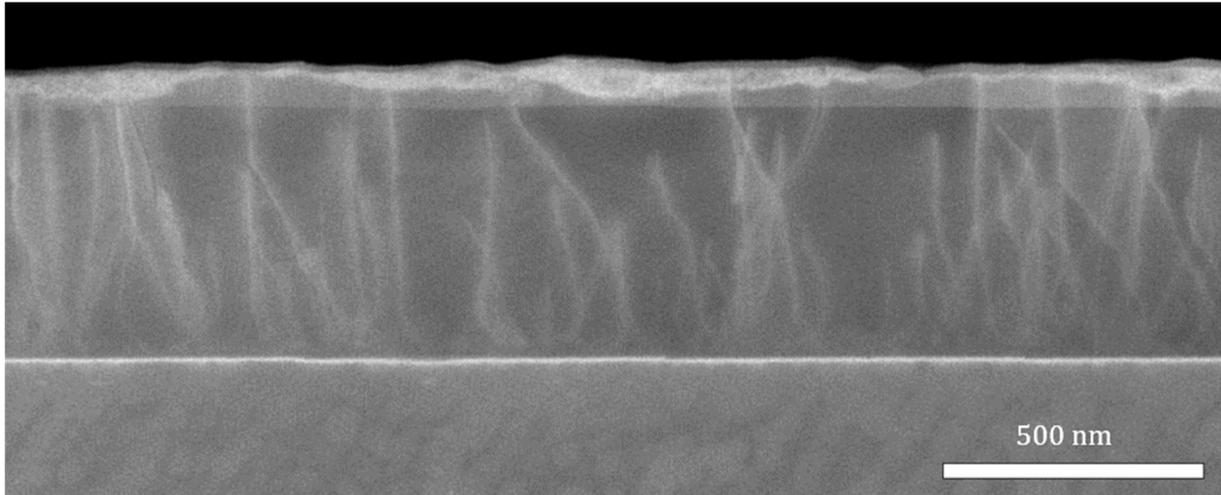


Abb. 6-18: TEM-Aufnahme eines größeren Ausschnitts der Probe 4-15.0Sn zur Veranschaulichung der hohen Durchstoßversetzungsdichte.

Bei den beiden Probenserien 2 und 4 sind jedoch der grundsätzliche Schichtaufbau, die Schichtdicken und die Wachstumsparameter zur Herstellung des Ge-VS identisch. Der einzige signifikante Unterschied zwischen den Probenserien ist, dass das Ge-VS und die zusätzliche Ge-Schicht bei Probenserie 2 undotiert sind. Eine zusätzliche Dotierung innerhalb des Ge-VS, wie bei der hier betrachteten Probenserie 4, hat demzufolge einen erheblichen negativen Einfluss auf die Reduzierung der Durchstoßversetzungsdichte und somit auf die Qualität der auf dem Ge-VS aufgewachsenen Bauteilstrukturen.

### 6.2.4. Analyse der Zusammensetzung mittels RBS

Zur exakten Bestimmung der Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schichten wurde auch die Probenserie 4 einer RBS-Analyse unterzogen. Die RBS-Analyse wurde dabei im Rahmen einer Kooperation von Viktoria Schlykow am Forschungszentrum Jülich durchgeführt. Der Vergleich der RBS-Spektren der einzelnen Proben ist in Abb. 6-19 dargestellt.

Ausgenommen der Probe *4-15.0Sn* weisen alle Proben ein sehr niedriges Channeling-Verhältnis von  $4\% \leq X_{\min} \leq 8\%$  und somit eine geringe Zahl von Zwischengitteratomen auf. Das Channeling-Signal ist hier zwar deutlich niedriger als bei der Probenserie 3. Es ist allerdings zu berücksichtigen, dass die Dicke der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht bei dieser Probenserie nahezu eine Größenordnung geringer ist als bei Probenserie 3. Ein direkter Vergleich ist also nur bedingt möglich. Eine Gegenüberstellung der Probenserien 1 und 4, bei denen eine identische nominelle  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schichtdicke vorliegt, ist daher sinnvoller. Im Vergleich zur Probenserie 1 konnte das Channeling-Signal und somit die Anzahl an Punktdefekten nochmals reduziert werden. Außerdem wurde die Erfüllung der angestrebten Zusammensetzungen über die Probenserien hinweg verbessert.

Die durch Anpassung der Simulation des Schichtstapels an die gemessenen Spektren wurden die exakten Konzentrationen der Legierungsbestandteile und die Dicke der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht bestimmt. Da auch diese Messungen auf Randstücken durchgeführt wurden erfolgte hier ebenfalls eine Umrechnung der Ergebnisse auf die Wafermitte auf Basis der Flussverteilung. Die Werte sind in Tab. 6-6 zusammengefasst.

Probe	$d$ (nm)	$c_{\text{Si}}$ (%)	$c_{\text{Ge}}$ (%)	$c_{\text{Sn}}$ (%)	$a_{0,\text{RBS}}$ (Å)	$a_{0,\text{XRD}}$ (Å)
<b><i>4-5.0Sn</i></b>	89	14,6	80,0	5,4	5,6691	5,6594
<b><i>4-7.5Sn</i></b>	93	26,5	65,8	7,7	5,6612	5,6575
<b><i>4-10.0Sn</i></b>	90	36,6	53,4	10,0	5,6578	5,6536
<b><i>4-12.5Sn</i></b>	92	46,3	40,9	12,8	5,6592	5,6525
<b><i>4-15.0Sn</i></b>	90	59,2	26,1	14,8	5,6461	5,6538

Tab. 6-6: Zusammenfassung der Ergebnisse der RBS-Analyse. Es wurde die tatsächliche Dicke und Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht bestimmt. Die aus der tatsächlichen Zusammensetzung resultierende Gitterkonstante  $a_{0,\text{RBS}}$  steht der mittels XRD bestimmten Gitterkonstante  $a_{0,\text{XRD}}$  gegenüber.

Im Vergleich der Proben untereinander zeigt sich die Schwankung der Si-Konzentration bei dieser Serie am deutlichsten. Dies ist auch die Ursache für die zuvor beobachtete Verschiebung des  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  zugehörigen Reflexes im  $2\theta$ - $\omega$ -Spektrum. Dennoch weisen die Proben *4-10.0Sn* und *4-12.5Sn* eine nahezu perfekte Gitteranpassung auf.

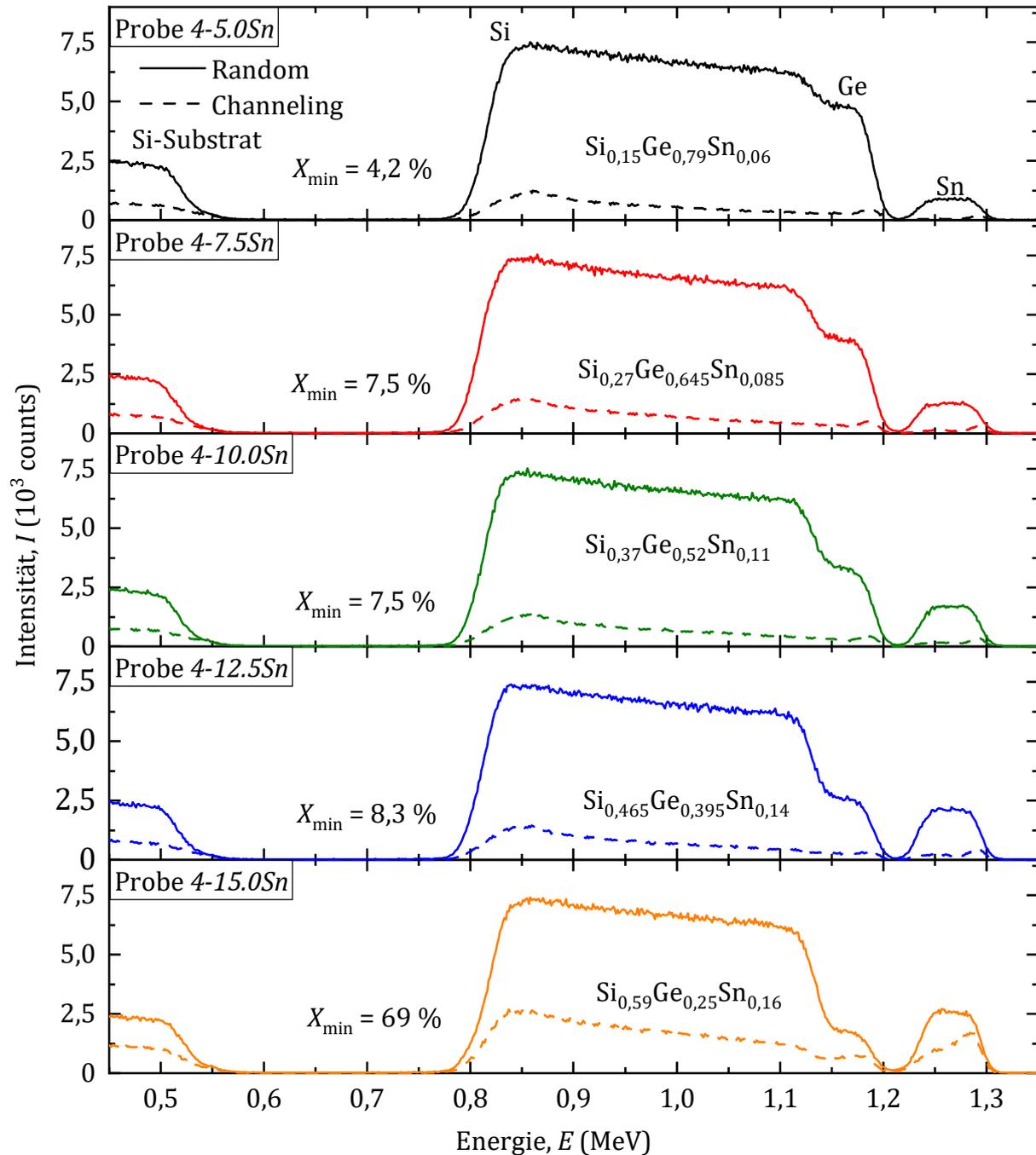


Abb. 6-19: Vergleich der RBS-Spektren der Probenserie 4. Das Random-Signal ist dabei mit einer durchgezogenen Linie und das Channeling-Signal mit einer Strichlinie dargestellt.

### 6.3. Prozesssequenz zur Herstellung von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Dioden

In diesem Abschnitt wird die zur Herstellung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Dioden aus den zuvor vorgestellten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Diodenstrukturen verwendete Prozesssequenz vorgestellt. Es wurden im Rahmen dieser Arbeit zwei Prozessläufe durchgeführt: *P1-SiGeSn-Homopin*, *P2-SiGeSn-Heteropin*. Die allgemeine Prozesssequenz ist bei beiden Prozessdurchläufen identisch, jedoch werden beim Prozessdurchlauf *P2-SiGeSn-Heteropin* einige Vereinfachungen durchgeführt.

Die nachfolgend beschriebene Prozesssequenz beschreibt den Prozessdurchlauf *P1-SiGeSn-Homopin*. Anschließend wird nur noch auf die Unterschiede des Prozessdurchlaufs *P2-SiGeSn-Heteropin* hingewiesen. Eine Übersicht der Prozessdurchläufe und der dabei prozessierten Epitaxie-Schichtstapel ist in Tab. 6-7 aufgelistet. Eine Zuordnung der Prozesssequenzen zu den am IHT verwendeten Prozessidentifikationsnummern ist in Anhang B zu finden.

	<i>P1-SiGeSn-Homopin</i>	<i>P2-SiGeSn-Heteropin</i>
<b>Proben</b>	<i>3-5.0Sn-200C</i>	<i>4-5.0Sn</i>
	<i>3-7.5Sn-200C</i>	<i>4-7.5Sn</i>
	<i>3-10.0Sn-200C</i>	<i>4-10.0Sn</i>
	<i>3-12.5Sn-180C</i>	<i>4-12.5Sn</i>
	<i>3-15.0Sn-160C</i>	<i>4-15.0Sn</i>

Tab. 6-7: Übersicht der durchgeführten Prozessläufe und der dabei prozessierten Proben der Probenserie 3, 4

Für beide durchgeführten Prozesssequenzen wurde der am IHT verfügbare Maskensatz *SiGePIN2009* verwendet. Der Maskensatz ist dabei in „Chipfelder“ untergliedert. Die in der Arbeit verwendeten Chipfelder umfassen dabei Reihen, durchnummeriert von 1 bis 4, und Spalten, durchnummeriert von A bis D. Deshalb ist im Rahmen der elektrischen Charakterisierung beispielsweise die Rede von Chipfeld A1. Die enthaltenen Bauteilgeometrien sind kreisförmig mit einem Mesaradius von  $r_M = \{2, 3, 4, 5, 10, 20, 40, 80\} \mu\text{m}$ . Eine detaillierte Beschreibung der Struktur des Maskensatzes und der darauf vorgesehenen Bauteilgeometrien ist in Anhang A zu finden.

### 6.3.1. Prozessesequenz P1-SiGeSn-Homopin

Bei der Prozessesequenz handelt es sich um einen Ein-Mesa-Prozess mit der in Abb. 6-20 dargestellten finalen Bauteilstruktur. Der Herstellungsprozess lässt sich dabei in die in Abb. 6-20 b) aufgeführten Hauptschritte Mesa-Strukturierung, Oberflächenpassivierung, Öffnen der Kontaktlöcher und Metallisierung unterteilen.

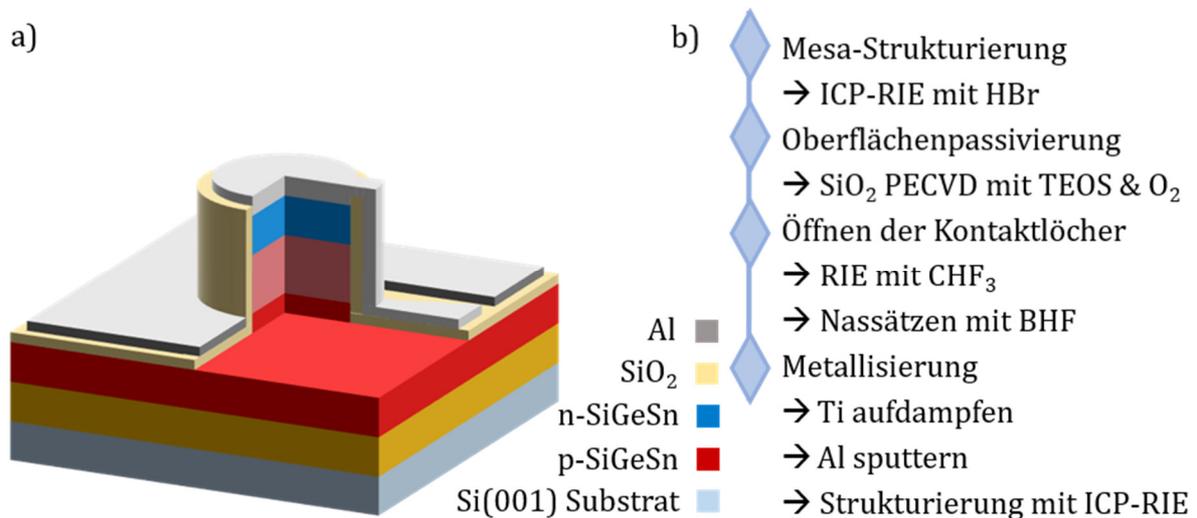


Abb. 6-20: a) Schematische Darstellung der finalen Bauteilstruktur, b) Allgemeine Prozessesequenz.

Im Folgenden wird die Prozessesequenz schrittweise detailliert beschrieben. Hierbei sei angemerkt, dass auf eine Auflistung von anlagenspezifischen Parametern, wie beispielsweise Präkursorenströme und Plasmaleistungen verzichtet wird. Da es sich bei den verwendeten Prozessschritten um Standardprozesse der Halbleitertechnologie handelt sind die betreffenden Parameter für eine spezifische Anlage entweder bereits bekannt oder eigens zu bestimmen.

Die für die Vorstellung der Prozessschritte verwendeten schematischen Darstellungen zeigen stets einen Querschnitt (links) und eine Draufsicht (rechts) und wurden der Bachelorarbeit von Johannes Ziegler [47] entnommen. Eine Legende der verwendeten Farben ist im Anschluss in Abb. 6-28 dargestellt.

### ❖ *Reinigung der Probenoberfläche*

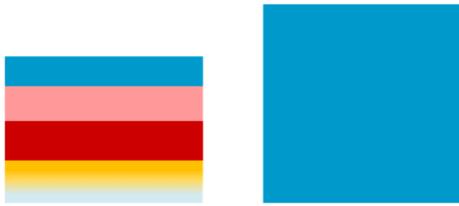


Abb. 6-21: Schematische Darstellung des Prozessschritts "Reinigung der Probenoberfläche"

Vor Beginn der Prozesssequenz wurden die Substrate in vier  $35 \cdot 35 \text{ mm}^2$  große Stücke zersägt. Dieser Schritt erlaubt es bei Misslingen einer Prozesssequenz dieselbe Epitaxie-Schicht mehrfach prozessieren zu können. Hierdurch wird allerdings die Probenoberfläche auch verschmutzt.

Bei der verwendeten Reinigung handelt es sich daher um eine Kombination aus einer nasschemischen Reinigung mit Lösemitteln und einer trockenchemischen Oxidation der Oberfläche und darauf verbliebener organischer Rückstände. Sie wird im Folgenden nur noch als *Ge-Reinigung* referenziert. Dabei erfolgt ein 8-minütiges Ultraschallbad in Aceton mit direkt anschließendem, 3-minütigem Ultraschallbad in Isopropanol. Diese beiden Schritte dienen der Entfernung etwaiger Verschmutzungen (Fette, Partikel, Sägerückstände) der Oberfläche. Anschließend wird die Probe in deionisiertem Wasser (DI-Wasser) gespült. Der Spülschritt endet dabei, sofern nicht anders erwähnt, immer wenn eine Leitfähigkeit des Wassers von  $> 18 \text{ M}\Omega$  erreicht wurde.

- 8 min Aceton Ultraschallbad
- 3 min Isopropanol Ultraschallbad
- Spülen in DI-Wasser bis  $18 \text{ M}\Omega$  (DI)
- $\text{O}_2$ -Plasmaveraschung

### ❖ *Strukturierung der Mesa mittels Fotolithografie*

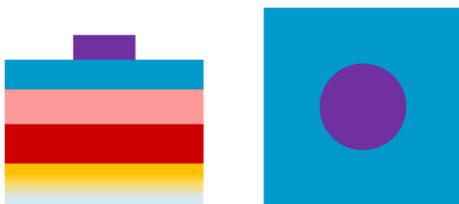


Abb. 6-22: Schematische Darstellung des Prozessschritts "Strukturierung der Mesa mittels Fotolithografie"

Der genaue Ablauf eines Fotolithografieschritts erfolgt exemplarisch am Beispiel der Mesa-Strukturierung. Anhand von am IHT gemeinschaftlich durchgeführter Untersuchungen zur Lackhaftung auf Ge-Oberflächen wurde festgestellt, dass sich das unter dem Lack befindliche wasserlösliche native Oxid, während

dem Spülschritt nach der Lackentwicklung ablöst. Hierdurch kommt es wiederrum zu Lackablösungen einzelner, meist kleiner Strukturen. Um die Lackhaftung zu verbessern ist es daher wichtig das native Oxid vor dem Aufschleudern des Lacks zu entfernen. Da es

sich bei einer  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Oberfläche um ein Mischoxid der einzelnen Bestandteile Si, Ge und Sn handelt erfolgt die Entfernung des nativen Oxids in zwei Schritten: Ein Bad in 2,5-prozentiger Fluorwasserstoffsäure (HF) mit anschließendem Spülschritt dient zur Entfernung von  $\text{SiO}_2$ . Ein anschließendes Bad in 9-prozentiger Chlorwasserstoffsäure (HCl – Salzsäure) dient Bad zur Entfernung von  $\text{GeO}_2$  und  $\text{SnO}_2$ . Nach dem HCl-Bad erfolgt kein vollständiger Spülschritt, sondern lediglich ein zweimaliges kurzes Eintauchen (Dip). Der vollständige Schritt zur Entfernung des Misch-Oxids wird künftig mit *Oxid-Entfernung* referenziert.

- 10 s HF (2,5 %)
- Spülen in DI-Wasser
- 30 s HCl (9 %)
- DI-Wasser, 2-mal Dip

Die Lackhaftung wird zusätzlich durch eine Schicht Hexamethyldisilazan (HMDS) verbessert. Vor dem Auftrag der HMDS-Schicht wird die Probe für  $t = 2$  min im HMDS-Applikator auf  $T = 100$  °C ausgeheizt. Dies dient zur Entfernung etwaiger Wasserrückstände. Anschließend wird der Fotolack vom Typ *AZMIR701* des Herstellers *Microchemicals* aufgeschleudert und bei einem Ausheizschritt bei  $T = 90$  °C (Softbake) zum Ausgasen der Lösemittel verfestigt. Die Lackdicke beträgt in dieser Arbeit stets  $d_{\text{Lack}} = 700$  nm. Zur Belichtung wird die i-Linie einer Quecksilber-Dampfampe mit  $\lambda = 365$  nm verwendet. Ein nach der Belichtung erfolgter Ausheizschritt bei  $T = 110$  °C (engl. Post-Exposure Bake) dient zum Glätten von Lackunebenheiten durch stehende Wellen. Der Entwicklungsschritt erfolgt mit dem Entwickler *AZMIF726* des Herstellers *Microchemicals* für eine Dauer von  $t = 60$  s und löst die belichteten Lackstrukturen. Um Lackablösungen, hervorgerufen durch zu lange Wassereexposition und die dadurch beschriebene Ablösung eventueller  $\text{GeO}_2$ -Reste unter dem Lack, zu vermeiden, erfolgt statt eines ausgedehnten Spülschrittes nur ein zweimaliger Dip in DI-Wasser.

- Ausheizen,  $t = 2$  min,  $T = 100$  °C
- HMDS aufbringen, bei  $T = 100$  °C
- *AZMIR701* aufschleudern
- Softbake,  $t = 1$  min,  $T = 90$  °C
- Belichten,  $t = 5,2$  s, i-Linie  $\lambda = 365$  nm

- Post-Exposure Bake,  $t = 1 \text{ min}$ ,  $T = 110 \text{ }^\circ\text{C}$
- Lack-Entwicklung,  $t = 1 \text{ min}$
- DI-Wasser, 2-mal Dip

### ❖ Ätzung der Mesa-Struktur

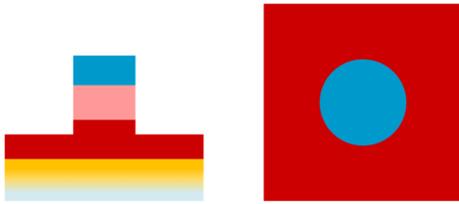


Abb. 6-23: Schematische Darstellung des Prozessschritts "Ätzung der Mesa-Struktur"

Die Ätzung der Mesa erfolgt trockenchemisch mittels induktiv gekoppeltem plasmareaktivem Ionenätzen (engl. Inductive coupled plasma reactive ion etching – ICP-RIE). Beim Ätzen von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  ist die Wahl der Ätzgase von entscheidender Bedeutung. Bei der Verwendung von Fluor-Chemie (z.B.  $\text{CF}_4$  oder  $\text{CHF}_3$ )

entsteht nicht-flüchtiges  $\text{SnF}_2$ , welches sich auf der Probenoberfläche anlagert und den weiteren Ätzangriff blockiert [68]. Der Effekt kann zum selektiven Ätzen von  $\text{Ge}_{1-z}\text{Sn}_z$  und  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  ausgenutzt werden, ist allerdings bei der hier durchgeführten Mesa-Ätzung von Nachteil. Aus diesem Grund wurde hier Bromwasserstoff ( $\text{HBr}$ ) zur Ätzung der Mesa verwendet. Die angestrebte Ätztiefe beträgt  $d_{\text{Ätz}} = 550 \text{ nm}$ . Bei dieser Ätztiefe wird geringfügig in die untere Kontaktschicht geätzt um diese anschließend zu kontaktieren. Eine leichte Überätzung von  $\Delta d = + 50 \text{ nm}$  stellt die sichere Kontaktierung im Rahmen der Prozesstoleranzen sicher.

### ❖ Ablacken und Oberflächenreinigung

Im Anschluss an jeden Strukturierungsschritt wird der Fotolack mittels  $\text{O}_2$ -Plasma-Veraschung entfernt. Anschließend erfolgt eine *Ge-Reinigung* der Mesa-Oberfläche. Im Folgenden wird dieser Schritt nicht mehr erwähnt.

### ❖ Passivierung der Mesa-Oberfläche mittels Siliziumdioxid

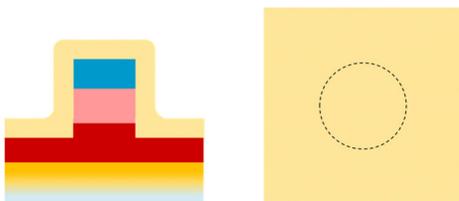


Abb. 6-24: Schematische Darstellung des Prozessschritts "Passivierung der Mesa-Oberfläche mittels Siliziumdioxid"

Die Passivierung der Mesa-Oberfläche erfolgt mit  $\text{SiO}_2$  mit einer Dicke von  $d_{\text{SiO}_2} = 300 \text{ nm}$ . Zur Abscheidung kommt plasmaunterstützte Gasphasenabscheidung (engl. Plasma-enhanced chemical vapor deposition – PECVD) zum Einsatz. Direkt vor dem Einschleusen der Proben in die PECVD erfolgt eine Oxid-Entfernung des

nativen Mischoxids, um wiederholbare Bedingungen für die nachfolgende Oxidabscheidung zu schaffen.

Als Präkursoren für die  $\text{SiO}_2$ -Abscheidung werden Tetraäthylorthosilikat (TEOS) und  $\text{O}_2$  verwendet. Um das thermische Budget der Proben zu minimieren, erfolgt die Abscheidung bei einer Temperatur von  $T = 250^\circ\text{C}$ . Die Untersuchungen zur Temperaturstabilität von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  in Kapitel 3 zeigten, dass diese Temperaturen auch über eine längere Dauer nicht zur Beschädigung des Kristalls führen.

### ❖ Öffnen der Kontaktlöcher

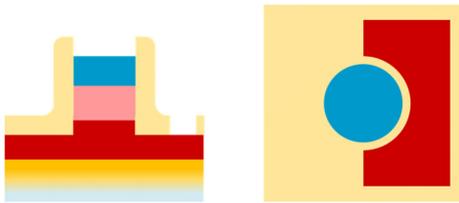


Abb. 6-25: Schematische Darstellung des Prozessschritts "Öffnen der Kontaktlöcher"

Um die Kontaktierung der unter dem  $\text{SiO}_2$  liegenden Halbleiterschichten zu ermöglichen, wird an definierten Stellen das  $\text{SiO}_2$  wieder entfernt. Die Strukturierung erfolgt wieder mittels Fotolithografie.

Um die Haftung des Fotolacks auf  $\text{SiO}_2$  zu verbessern, wird die Probe üblicherweise für  $t = 30$  min unter  $\text{N}_2$ -Atmosphäre ausgeheizt. Dieser Schritt dient zur Desorption des der Oberfläche befindlichen Wassers, welches aufgrund seiner Dipol-Eigenschaft die Lackhaftung verschlechtert. Da dieser Schritt allerdings auch das thermische Budget der Proben beansprucht wurde er ersetzt. Das Spülen in Isopropanol für  $t = 2$  min mit anschließender Trocknung kann alternativ und bei Raumtemperatur durchgeführt werden.

Die Ätzung des  $\text{SiO}_2$  erfolgt in zwei Schritten. Zunächst wird das  $\text{SiO}_2$  trockenchemisch mittels RIE bis auf eine Restdicke von  $d_{\text{Rest-SiO}_2} \approx 60$  nm geätzt. Als Ätzreaktant kommt hier  $\text{CHF}_3$  zum Einsatz. Anschließend wird der verbliebende Rest des  $\text{SiO}_2$  nasschemisch mittels gepufferter Flußsäure (BHF) entfernt. Die hohe Ätzselektivität von BHF zwischen  $\text{SiO}_2$  und dem Halbleiter stellt dabei sicher, dass eine Kontaktfläche mit möglichst geringer Rauigkeit entsteht.

### ❖ Abscheidung der Metallisierung aus Titan und Aluminium

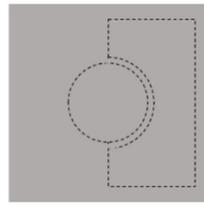
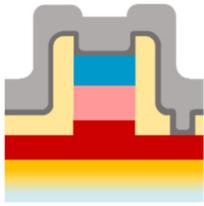


Abb. 6-26: Schematische Darstellung des Prozessschritts "Abscheidung der Metallisierung aus Titan und Aluminium"

Als Metallisierung kommt ein Schichtstapel aus aufgedampftem Ti mit  $d_{\text{Ti}} = 50 \text{ nm}$  und gesputtertem Al mit  $d_{\text{Al}} = 1,8 \mu\text{m}$  zum Einsatz. Das Ti dient dabei einerseits als Kontaktschicht und darüber hinaus als Diffusionsbarriere um der Interdiffusion zwischen Halbleiter und Al (Al-Spiking) vorzubeugen. Anhand

gemeinschaftlichen IHT-internen Untersuchungen wurde festgestellt, dass diese bereits zwischen  $150 \text{ }^\circ\text{C} < T < 200 \text{ }^\circ\text{C}$  einsetzt. Dies kann sowohl während der nachfolgenden Prozessierung als auch im elektrischen Betrieb des Bauteils vorkommen.

Um einen möglichst geringen Kontaktwiderstand zu gewährleisten ist es auch hier notwendig das native Oxid mittels *Oxid-Entfernung* zu entfernen. Die Proben wurden danach direkt in die Aufdampfanlage zur Abscheidung des Ti eingeladen. Das Ti wird dabei mit einem ESV bei einer Rate von  $R = 1,5 \text{ nm} \cdot \text{s}^{-1}$  verdampft. Im Anschluss wurden die Proben direkt in die Sputteranlage transferiert. Eine Bildung von  $\text{TiO}_2$  kann dennoch nicht ausgeschlossen werden. Deshalb wurde die Probenoberfläche in-situ mittels Ar-Sputterätzen für  $t = 1 \text{ min}$  angeätzt, um eventuell vorhandenes  $\text{TiO}_2$  zu entfernen.

### ❖ Strukturierung der Metallisierung

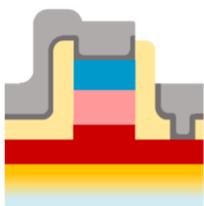


Abb. 6-27: Schematische Darstellung des Prozessschritts "Strukturierung der Metallisierung"

Als erster Schritt der Strukturierung der Metallisierung erfolgt wieder eine Fotolithografie. Hierbei ist ebenfalls die Entfernung des auf der Oberfläche befindlichen Wassers mittels Isopropanol wichtig.

Die Ätzung des Ti-Al-Schichtstapels erfolgt anschließend mittels ICP-RIE in zwei Schritten. Als Ätzreaktant wird, wie bei der Ätzung des Halbleiters, HBr verwendet. Der erste Ätzschritt hat dabei eine Dauer von  $t_{\text{Ätz}} \approx 1 \text{ min}$ . Danach folgt ein Abkühlschritt von  $t = 2 \text{ min}$ . Er dient zur Reduzierung des thermischen Budgets der Probe. Der letzte Schritt hat eine Ätzdauer von  $t_{\text{Ätz}} \approx 1 \text{ bis } 2 \text{ min}$ . Das Ende der Ätzung wird dabei optisch über den Abfall des Plasmaspektroskopiesignals ermittelt und der Ätzvorgang daraufhin manuell beendet.

Die ungefähre gesamte Ätzdauer zur Ermittlung der Dauer des ersten Ätzschritts wurde dabei anhand einer Testprobe ermittelt



Abb. 6-28: Legende der schematischen Grafiken zur Darstellung der Prozessschritte

### 6.3.2. Vereinfachungen der Prozessesequenz *P2-SiGeSn-Heteropin*

Die grundsätzliche Prozessstruktur des Prozessdurchlaufs *P2-SiGeSn-Heteropin* ist identisch mit der zuvor beschriebenen Prozessesequenz. Allerdings wurden hier einige Vereinfachungen durchgeführt. Sie sind im Folgenden aufgelistet.

- Um die Lackhaftung bei der Mesa-Fotolithografie zu verbessern, wurde eine SiO<sub>2</sub>-Zwischenschicht mit  $d = 50$  nm verwendet. Sie wurde vor der Mesa-Ätzung mittels RIE und BHF vorstrukturiert (siehe Ätzung der Oxidlocher). Nachfolgende Untersuchungen zeigten jedoch, dass die SiO<sub>2</sub>-Ätzung mittels BHF direkt vor der Mesa-Ätzung mittels ICP-RIE zu einer deutlich erhöhten Rauigkeit der Probenoberfläche führt.
- Vor den Fotolithografie-Schritten wurde bei diesem Prozess das Wasser mit dem erwähnten Ausheizschritt entfernt. Da die Entfernung mittels Isopropanol das thermische Budget allerdings reduziert ist diese Alternative vorzuziehen. Sie wurde jedoch erst nach diesem Prozessdurchlauf am IHT etabliert.
- Als Metallisierung kommt bei diesem Prozessdurchlauf nur eine Al-Schicht mit  $d=800$ nm zum Einsatz. Die reduzierte Dicke der Al-Schicht erlaubt hierbei eine nasschemische Strukturierung mit deutlich reduziertem thermischem Budget. Allerdings wurden die Proben des Prozessdurchlaufs *P1-SiGeSn-Homopin* für EL-Messungen konzipiert. Dies erfordert deutlich höhere Stromstärken als die elektrische I(U)- und C(U)-Charakterisierung und somit eine höhere Dicke der Metallisierung.

## 7. Materialcharakterisierung von auf Ge gitterangepasstem $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$

*Die Konzeptionierung von Heterostrukturen erfordert, wie eingangs erläutert, die Kenntnis verschiedener Materialparameter, wie der Bandlücke  $E_{G,\text{SiGeSn}}$ , den effektiven Zustandsdichten im Leitungs- und Valenzband  $N_L$  und  $N_V$ , der Leitungs- und Valenzbandversatz  $\Delta E_L$  und  $\Delta E_V$  und der relativen Permittivität  $\epsilon_R$  der beteiligten Materialien. Dieses Kapitel liefert erste Ansätze zur Bestimmung dieser Parameter von auf Ge gitterangepasstem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  in Abhängigkeit der Zusammensetzung.*

*Die zuvor hergestellten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Heterobaulemente werden hierzu mithilfe verschiedener elektrischer Messverfahren analysiert und charakterisiert. Die Ergebnisse der elektrischen Charakterisierung der Probenserie 3 entstanden Großteils im Rahmen der Bachelorarbeit von Johannes Ziegler [47].*

### 7.1. I(U)-Charakterisierung von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Homodioden

Dieses Unterkapitel behandelt die I(U)-Charakterisierung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Homodioden der Probenserie 3. Die Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung erlauben dabei eine qualitative Beurteilung der Kristallqualität der hergestellten Epitaxie-Schichten im Vergleich zu Ge. Hierfür dient eine gleichzeitig prozessierte Ge-Referenzdiode. Zur besseren Vergleichbarkeit mit den Ergebnissen anderer Charakterisierungsmethoden werden hierbei nur die Ergebnisse des Chipfeldes A1 betrachtet, welches sich in kürzester Entfernung zum Waferzentrum befindet. Es werden dabei alle Dioden mit vollfächigem Al-Topkontakt (Typ *pi*b) als auch die mit einem optischen Fenster im Topkontakt (Typ *pin*) dargestellt.

Die Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung werden stets, wie in Abschnitt 2.4 beschrieben, auf die Mesa-Fläche  $A_{\text{Mesa}}$  und den Mesa-Umfang  $U_{\text{Mesa}}$  normiert dargestellt. Anschließend wurden die in 2.4 ebenfalls beschriebenen Bewertungsmerkmale extrahiert. Sie sind das On-Off-Stromverhältnis  $I_{\text{On}}/I_{\text{Off}}$ , die Sperrstromdichte  $J_{-1V}$  bei  $U = -1$  V und der Idealitätsfaktor  $\eta$ .

## 7.1.1. I(U)-Charakterisierung der Probe 3-5.0Sn-200C

Die Ergebnisse der Stromdichte- und der Umfangstromdichte-Charakteristiken der Dioden des Feldes A1 der Probe 3-5.0Sn-200C sind in Abb. 7-1 a) und b) zusammenfassend dargestellt. Die Deckung der Stromdichte-Charakteristiken zeigt dabei eine deutliche Volumenproportionalität des Diodenstromes sowohl in Vorwärts- als auch in Rückwärtsrichtung. Dies beweist die sehr gute Passivierung der Mesa-Oberfläche mit  $\text{SiO}_2$ . Die Höhe der Sperrstromdichte der Diode in Rückwärtsrichtung ist daher maßgeblich durch Defekte im Volumen des Halbleiters, zumeist Durchstoßversetzungen, bestimmt. Die mittlere Sperrstromdichte der Dioden beträgt hier  $J_{-1V} = 32 \pm 4 \text{ mA} \cdot \text{cm}^{-2}$ . Ein Vergleich mit der Ge-Referenzprobe 3-0.0Sn-GeRef und den anderen Proben erfolgt in der Zusammenfassung dieses Abschnitts und erlaubt eine qualitative Bewertung der Kristallqualität der hergestellten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schichten.

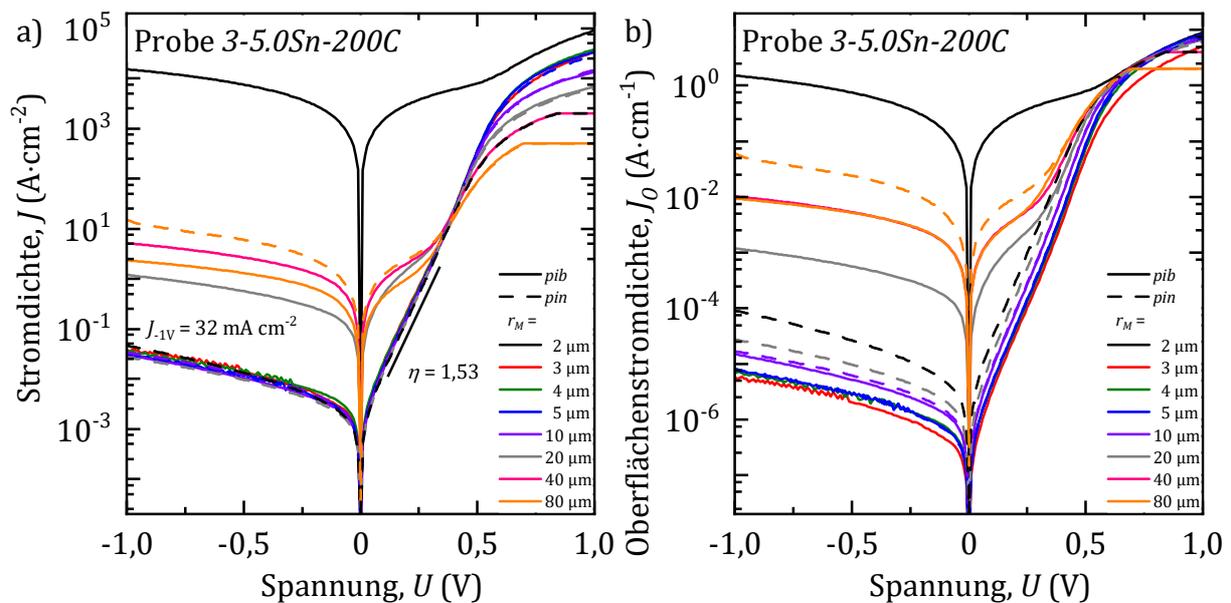


Abb. 7-1: Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung der Probe 3-5.0Sn-200C, a) J(U)-Charakteristik, b)  $J_0$ (U)-Charakteristik

Dennoch zeigen einige Bauelemente einen deutlich höheren Sperrstrom. Die Symmetrie des Sperrstromes um  $U = 0 \text{ V}$  weist dabei auf einen Paralleleitwert hin. Bemerkenswert dabei ist, dass nur die kleinsten Dioden mit  $r_M = 2 \mu\text{m}$  und teilweise die größten Dioden mit  $r_M \geq 20 \mu\text{m}$  einen Paralleleitwert aufweisen. Eine mögliche Ursache für einen Paralleleitwert ist das Vorhandensein von Metallresten zwischen dem Top-Kontakt und dem Bottom-Kontakt. Diese können ihre Ursache in einer zu kurzen Überätzung bei der Metallstrukturierung mittels ICP haben. Da das Hauptaugenmerk der Arbeit auf der

Analyse der Kristallqualität und nicht auf der Bewertung des Herstellungsprozesses liegt werden diese Bauelemente für die weiteren Betrachtungen nicht berücksichtigt und aus der Darstellung ausgeschlossen. Das On-Off-Stromverhältnis beträgt hier zwischen fünf und sechs Größenordnungen. Der Idealitätsfaktor liegt bei  $\eta = 1,53 \pm 0,03$ .

### 7.1.2. I(U)-Charakterisierung der Probe 3-7.5Sn-200C

Die Stromdichte- und Umfangstromdichte-Charakteristiken der Dioden des Feldes A1 der Probe 3-7.5Sn-200C sind in Abb. 7-2 a) und b) dargestellt. Hierbei wurden bereits die Charakteristiken der nicht funktionierenden Dioden entfernt.

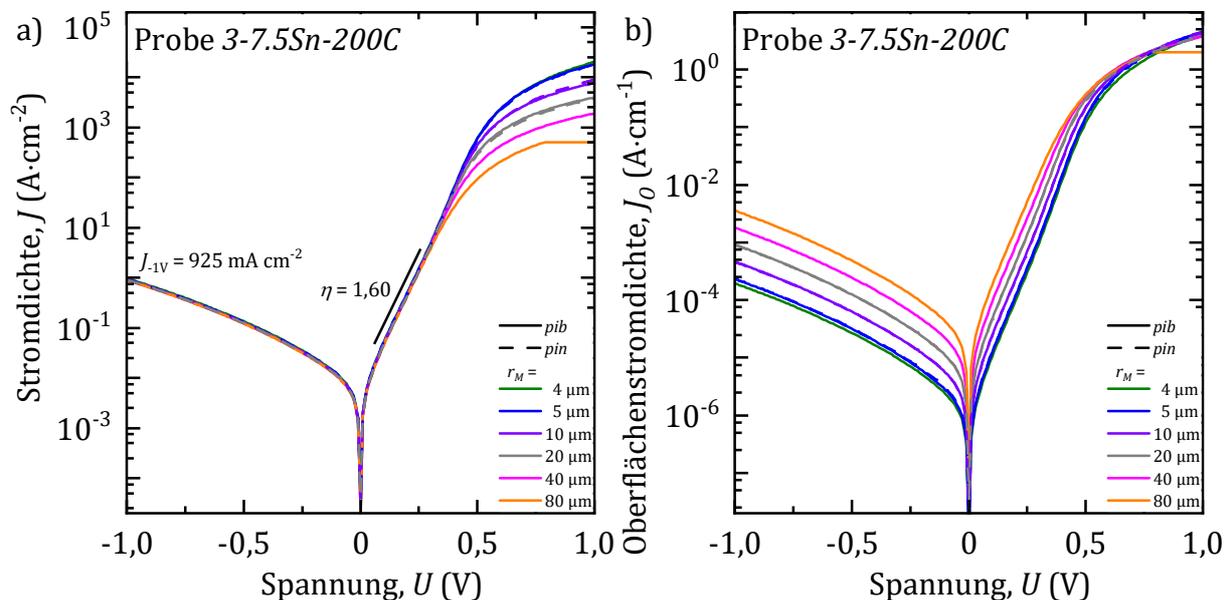


Abb. 7-2: Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung der Probe 3-7.5Sn-200C, a) J(U)-Charakteristik, b)  $J_0(U)$ -Charakteristik

Bei der Probe 3-7.5Sn-200C zeigt sich ebenfalls ein deutliches Diodenverhalten mit einer nahezu perfekten Volumen-proportionalität bis in den vom Serienwiderstand dominierten Bereich bei  $U \geq 0,3 \text{ V}$ . Das On-Off-Stromverhältnis beträgt hier jedoch nur drei bis vier Größenordnungen. Außerdem liegt die mittlere Sperrstromdichte mit  $J_{-1V} = 925 \pm 7 \text{ mA} \cdot \text{cm}^{-2}$  mehr als eine Größenordnung höher als bei Probe 3-5.0Sn-200C. Eine mögliche Erklärung hierfür ist eine schlechtere Kristallqualität der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht. Da sich allerdings auch die Bandlücke der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Legierung mit der Zusammensetzung ändert kann auch eine geringere Bandlücke ursächlich für die höhere Sperrstromdichte sein. Weiteren Aufschluss über die Kristallqualität liefert der Idealitätsfaktor, welcher hier  $\eta = 1,60 \pm 0,03$  beträgt.

## 7.1.3. I(U)-Charakterisierung der Probe 3-10.0Sn-200C

In Abb. 7-3 a) und b) sind die Stromdichte- und Umfangstromdichte-Charakteristiken der Bauelemente des Feldes A1 der Probe 3-10.0Sn-200C dargestellt.

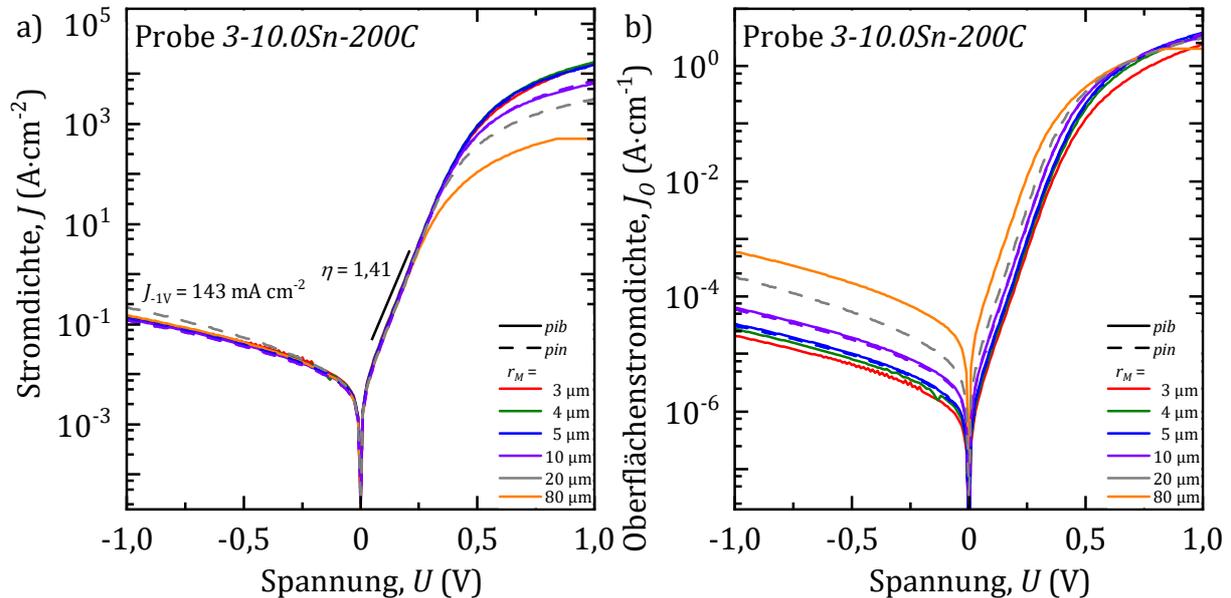


Abb. 7-3: Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung der Probe 3-10.0Sn-200C, a)  $J(U)$ -Charakteristik, b)  $J_0(U)$ -Charakteristik

Auch bei dieser Probe zeigt sich ein Diodenverhalten mit einer nahezu perfekten Volumenproportionalität. Das On-Off-Stromverhältnis ist hierbei wieder höher und liegt zwischen fünf bis sechs Größenordnungen. Außerdem ist die Sperrstromdichte mit  $J_{-1V} = 143 \pm 11 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}$  hier geringer als bei Probe 3-7.5Sn-200C, jedoch höher als bei Probe 3-5.0Sn-200C. Darüber hinaus ist auch der Idealitätsfaktor deutlich geringer und liegt bei  $\eta = 1,41 \pm 0,01$ .

## 7.1.4. I(U)-Charakterisierung der Probe 3-12.5Sn-160C

Obwohl die Probe 3-12.5Sn-160C deutliche Anzeichen von Polykristallinität in der XRD-Analyse in Kapitel 6 aufwiesen wurden diese im Prozessdurchlauf P1-SiGeSn-Homopin zu Dioden prozessiert. Bei der Mesa-Strukturierung mittels ICP-RIE fiel jedoch eine deutliche Rauigkeit der geätzten Oberfläche auf.

Eine mögliche Ursache hierfür ist eine höhere Ätzrate entlang der Korngrenzen der Polykristalle. Hierdurch werden die Polykristalle langsamer geätzt und bleiben als Resultat wie Nadeln stehen. Zur Quantifizierung der Oberflächenrauigkeit wurde die

Oberfläche mittels Rasterkraftmikroskopie (AFM) untersucht. Ein Vergleich der geätzten Oberfläche der Probe *3-12.5Sn-160C* in Abb. 7-4 a) mit der ungeätzten Oberfläche in Abb. 7-4 b) zeigt die deutlich höhere Rauigkeit. Die maximale Höhendifferenz ist bei der geätzten Oberfläche mit 400 nm deutlich höher als bei der ungeätzten Oberfläche. Darüber hinaus sind deutliche dreieck-förmige Strukturen, welche als die durch die Poly-Kristallinität entstandenen Kornstrukturen interpretiert werden können.

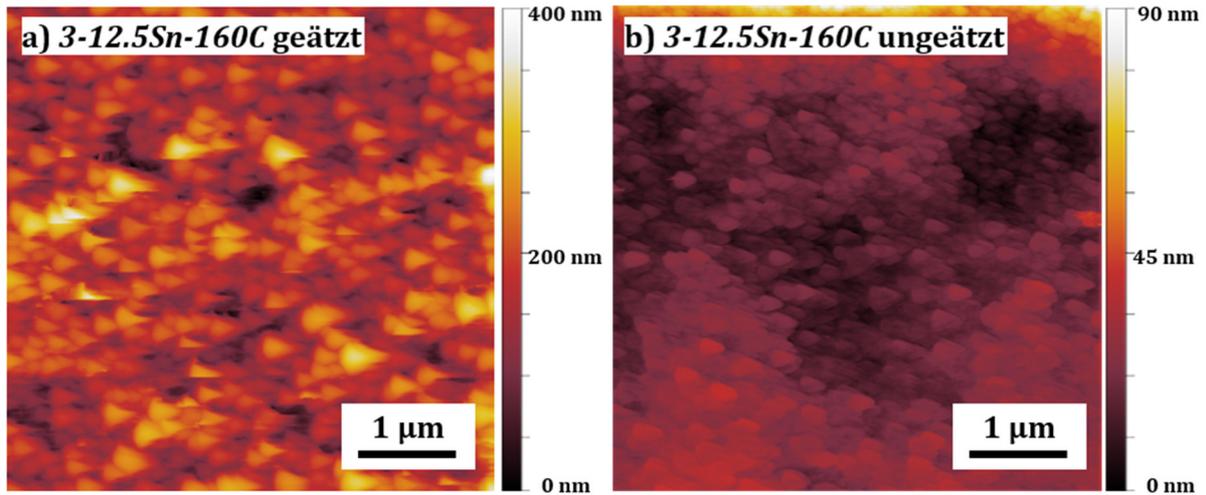


Abb. 7-4: Vergleich der AFM-Aufnahmen der Probe *3-12.5Sn-160C* a) Probenoberfläche der geätzten Probe b) Probenoberfläche der ungeätzten Probe.

Die Folge der hohen Oberflächenrauigkeit zeigt sich in den Ergebnissen der  $I(U)$ -Charakterisierung der Probe *3-12.5Sn-160C* in Abb. 7-5.

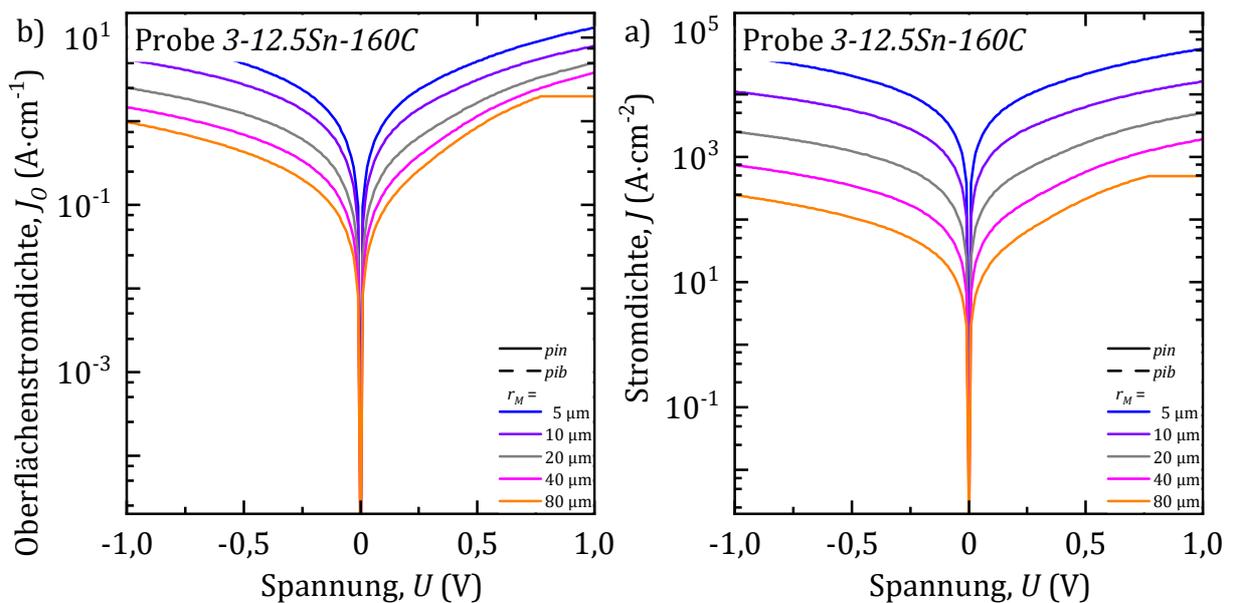


Abb. 7-5: Ergebnisse der  $I(U)$ -Charakterisierung der Probe *3-12.5Sn-160C*, a)  $J(U)$ -Charakteristik, b)  $J_0(U)$ -Charakteristik

## 7.1.5. I(U)-Charakterisierung der Probe 3-15.0Sn-160C

Die bei Probe 3-15.0Sn-160C ebenfalls beobachteten Anzeichen von Polykristallinität führten hierbei ebenfalls zu einer erhöhten Oberflächenrauigkeit. Die Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung in Abb. 7-6 zeigen deshalb auch hier ein Leitwertverhalten ohne erkennbares Diodenverhalten.

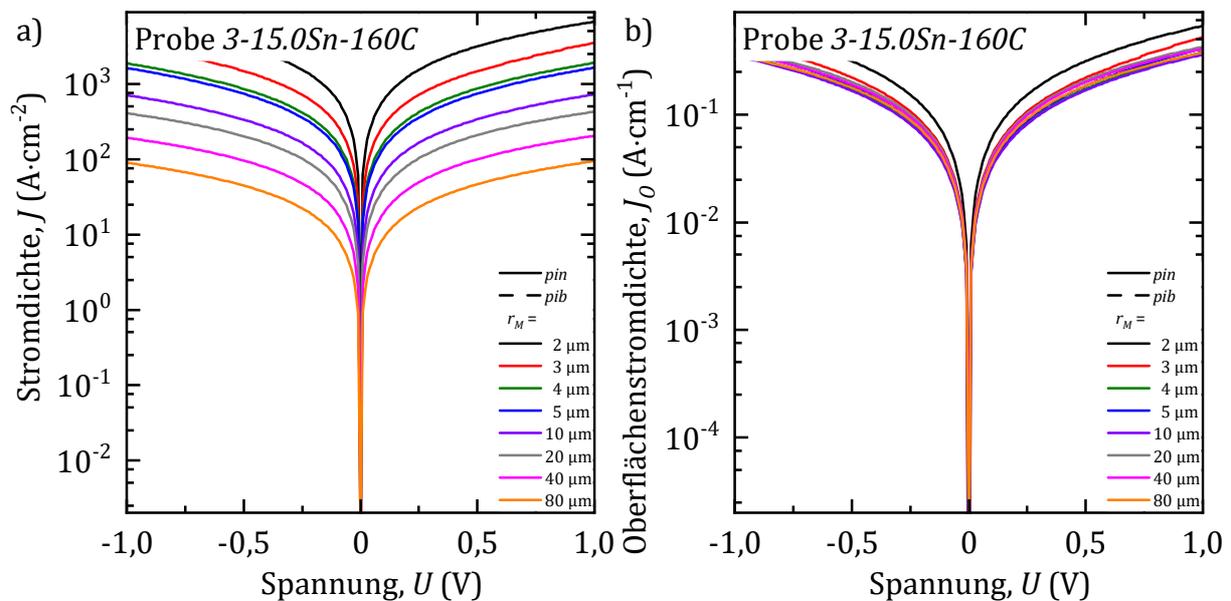


Abb. 7-6: Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung der Probe 3-15.0Sn-200C, a)  $J(U)$ -Charakteristik, b)  $J_0(U)$ -Charakteristik

## 7.1.6. Zusammenfassung und Vergleich

Zum besseren Vergleich und Diskussion der Eigenschaften der einzelnen Proben werden die Stromdichte-Charakteristiken gemeinsam in Abb. 7-7 dargestellt. Aufgrund der perfekten Volumenproportionalität der Charakteristiken der einzelnen Proben wird jeweils nur eine Stromdichte-Charakteristik einer Diode mit  $r_M = 5 \mu\text{m}$  pro Probe für den Vergleich herangezogen. In Anbetracht der Fehlfunktion der beiden Proben 3-12.5Sn-160C und 3-15.0Sn-160C werden sie bei dieser Betrachtung außen vorgelassen. Als Referenz dient die zusätzlich hergestellte Ge-Referenzdiode der Probe 3-0.0Sn-GeRef.

Der direkte qualitative Vergleich anhand der Charakteristiken zeigt, dass alle betrachteten Proben ähnliche Eigenschaften bezüglich Idealitätsfaktor  $\eta$  und die Sperrstromdichte  $J_{-1V}$  bei  $U = -1$  V Serienwiderstand im Vorwärtsbereich aufweisen. Unter der Berücksichtigung der Ergebnisse der Bandstrukturanalyse in Kapitel 2 ist auf Ge gitterangepasstes  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  im vollen Konzentrationsbereich ein indirekter

Halbleiter. Daher ist der Idealitätsfaktor ein Maß für die Rekombination über Kristalldefekte und somit die Kristallqualität. Im direkten Vergleich mit der Ge-Referenzdiode *3-0.0Sn-GeRef* ist das hergestellte  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  daher durchaus von vergleichbarer Kristallqualität. Rückblickend auf die Bauelemente der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Probenserie 1 konnte die Kristallqualität im Rahmen der Optimierung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxie in Kapitel 5 deutlich verbessert werden.

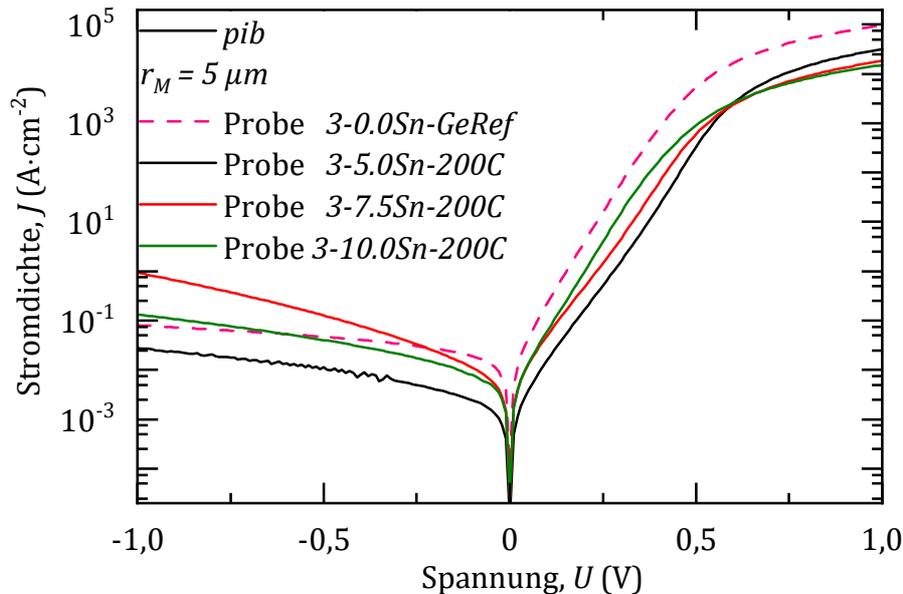


Abb. 7-7: Vergleich der Ergebnisse der  $J(U)$ -Charakteristiken der Probenserie 3.

Die bereits angesprochenen Bewertungsmerkmale wurden bei allen funktionierenden Bauelementen extrahiert. Die Daten sind in Tab. 7-1 zusammengefasst.

Probe	$J_{-1V} (\text{mA} \cdot \text{cm}^{-2})$	$\eta$
<b>3-0.0Sn-GeRef</b>	$86 \pm 4$	$1,41 \pm 0,01$
<b>3-5.0Sn-200C</b>	$32 \pm 4$	$1,52 \pm 0,03$
<b>3-7.5Sn-200C</b>	$925 \pm 7$	$1,60 \pm 0,03$
<b>3-10.0Sn-200C</b>	$143 \pm 11$	$1,41 \pm 0,01$

Tab. 7-1: Aus den Ergebnissen der  $I(U)$ -Charakterisierung der Probenserie 3 extrahierte Diodenparameter.

7.2. C(U)-Charakterisierung von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Homodioden

Zur quantitativen Bestimmung der indirekten Bandlücke  $E_{\text{SiGeSn}}^L$  von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  eignet sich die C(U)-Charakterisierung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Homodioden in Sperrrichtung und anschließende Auswertung gemäß Abschnitt 2.5 zur Bestimmung der Built-In-Spannung  $U_{bi}$ . In diesem Abschnitt werden zunächst die Ergebnisse der C(U)-Charakterisierung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Homodioden und die extrahierten Built-In-Spannungen als Funktion der Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schichten dargestellt. Hierbei werden nur noch die drei funktionierenden Proben 3-5.0Sn-200C, 3-7.5Sn-200C und 3-10.0Sn-200C betrachtet.

Die gemessene Kapazität  $C_{\text{Diode}}$  der Diode wird zunächst, wie in Abschnitt 2.5 beschrieben, um die Kapazität der Al-Kontaktflächen mithilfe der Kapazität der Open-Struktur  $C_{\text{Open}}$  zur erforderlichen Sperrschichtkapazität  $C_S$  korrigiert. Anschließend werden diese auf die Mesa-Fläche  $A_{\text{Mesa}}$  normiert. Abb. 7-8 zeigt exemplarisch eine Schar von korrigierten  $C_S(U)$ -Charakteristiken der Probe 3-5.0Sn-200C.

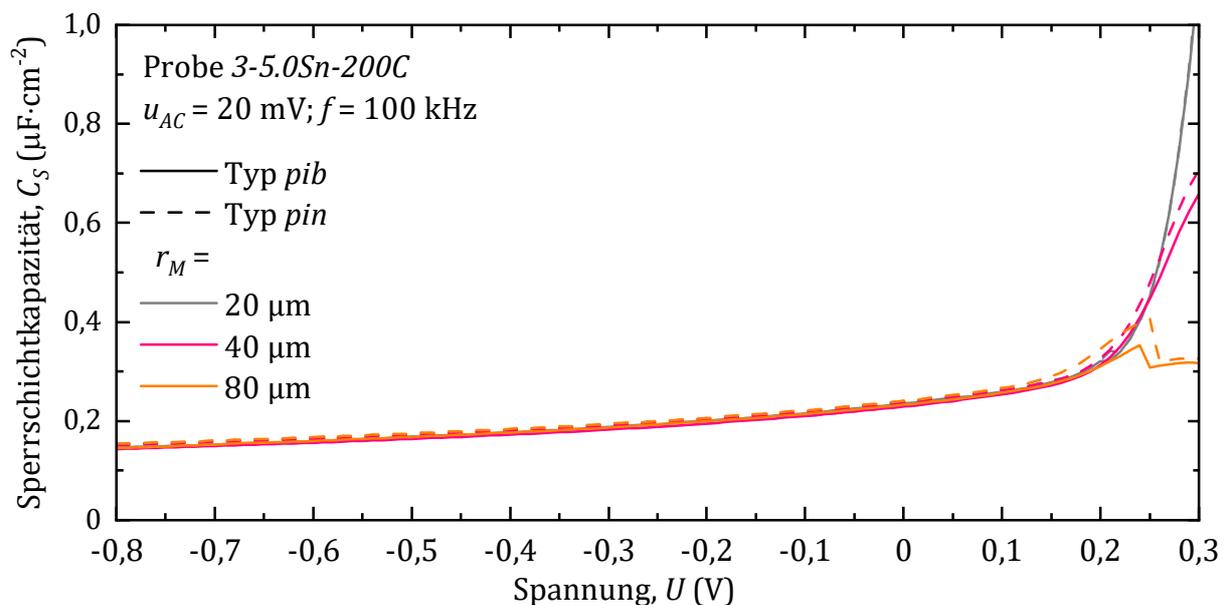


Abb. 7-8: Normierte  $C_S(U)$ -Charakteristiken von Dioden mit  $r_M = \{20, 40, 80\} \mu\text{m}$  der Probe 3-5.0Sn-200C.

Ebenfalls wie bei der zuvor diskutierten I(U)-Charakterisierung ist eine deutliche Volumenproportionalität erkennbar, weshalb bei den weiteren Auswertungen nur noch einzelne  $C_S(U)$ -Charakteristiken betrachtet werden. Im nächsten Schritt erfolgt der Vergleich der  $C_S(U)$ -Charakteristiken der Proben 3-5.0Sn-200C, 3-7.5Sn-200C und

3-10.0Sn-200C in Abb. 7-9. Hierfür dient exemplarisch jeweils eine Diode Felde A1 des Typs *pib* mit  $r_M = 80 \mu\text{m}$ .

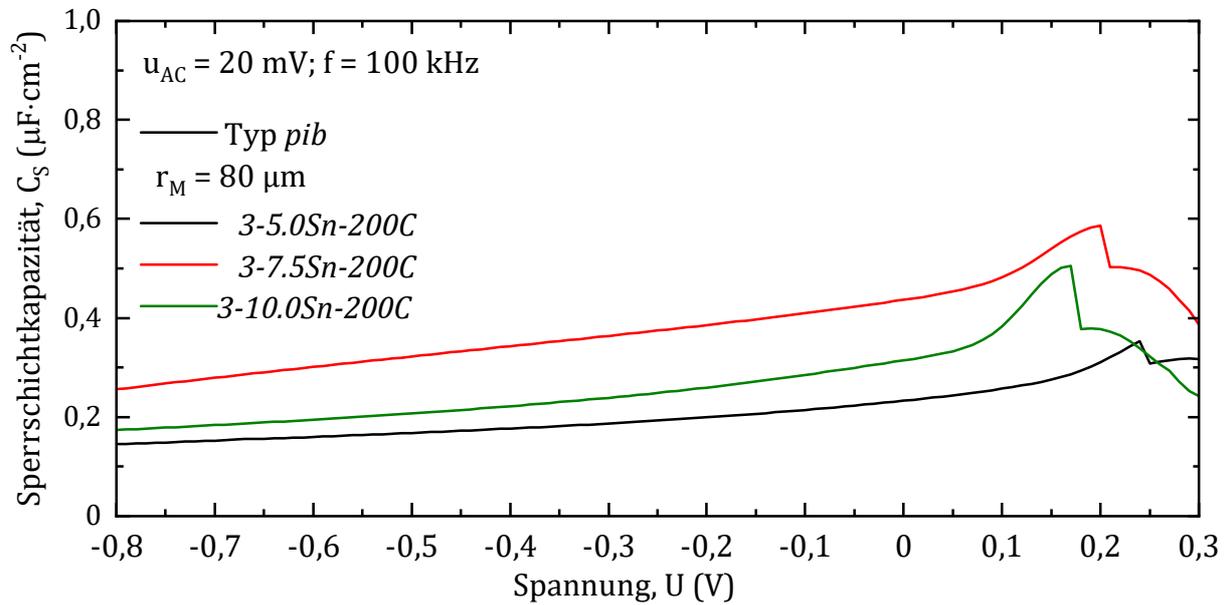


Abb. 7-9: Vergleich der normierten  $C_S(U)$ -Charakteristiken von Dioden mit  $r_M = 80 \mu\text{m}$  der Probenserie 3.

Dabei ist der Bereich, ab dem die Diode in Vorwärtsrichtung in den leitenden Zustand übergeht, für Spannungen  $U > 0,15 \text{ V}$  zu erkennen. Charakteristisch hierfür ist der Einbruch in der  $C_S(U)$ -Charakteristik. Zur Bestimmung der Built-In-Spannung  $U_{bi}$  ist erneut die  $C_S^{-2}$  in Abb. 7-10 aufschlussreicher.

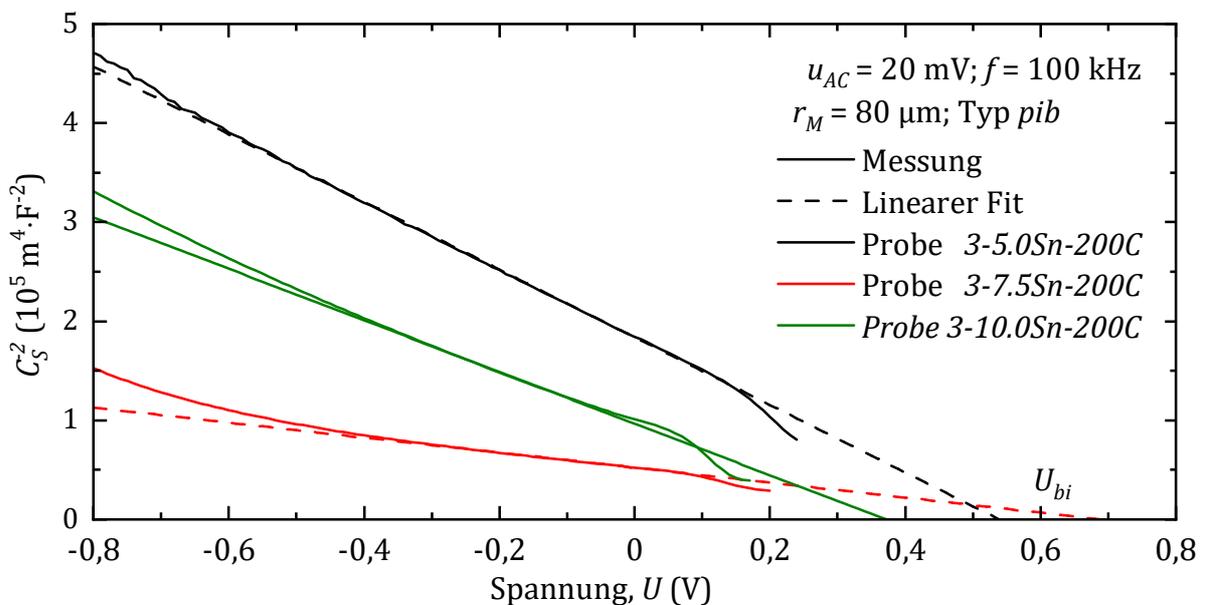


Abb. 7-10: Vergleich der normierten  $C_S^{-2}(U)$ -Charakteristiken von Dioden mit  $r_M = 80 \mu\text{m}$  der Probenserie 3

Hierbei lässt sich für die  $C_S^{-2}(U)$ -Charakteristiken der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Homodioden ein weitgehend linearer Verlauf erkennen. Dies entspricht den Erwartungen gemäß den theoretischen Betrachtungen in Abschnitt 2.5. Der erkennbare Schnittpunkt der linearen Extrapolation der  $C_S^{-2}$ -Charakteristik mit der positiven Spannungsachse kennzeichnet dabei, wie bereits in Kapitel 2 erläutert, die Built-In-Spannung  $U_{bi}$ . Die lineare Anpassung der Messdaten, als Basis für die lineare Extrapolation erfolgt dabei in einem Spannungsbereich  $-0,3 \text{ V} \leq U \leq -0,05 \text{ V}$ . Die auf diese Weise extrahierte Built-In-Spannung  $U_{bi}$  dient in Abschnitt zur Berechnung der indirekten Bandlücke des  $\text{SiGeSn}$ .

Die Built-In-Spannung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Homodioden wurde für  $n > 70$  Dioden der Proben *3-5.0Sn-200C*, *3-7.5Sn-200C* und *3-10.0Sn-200C* extrahiert. Die Ergebnisse der Analyse sind in der Box-Whisker-Darstellung in Abb. 7-11 zusammenfassend dargestellt.

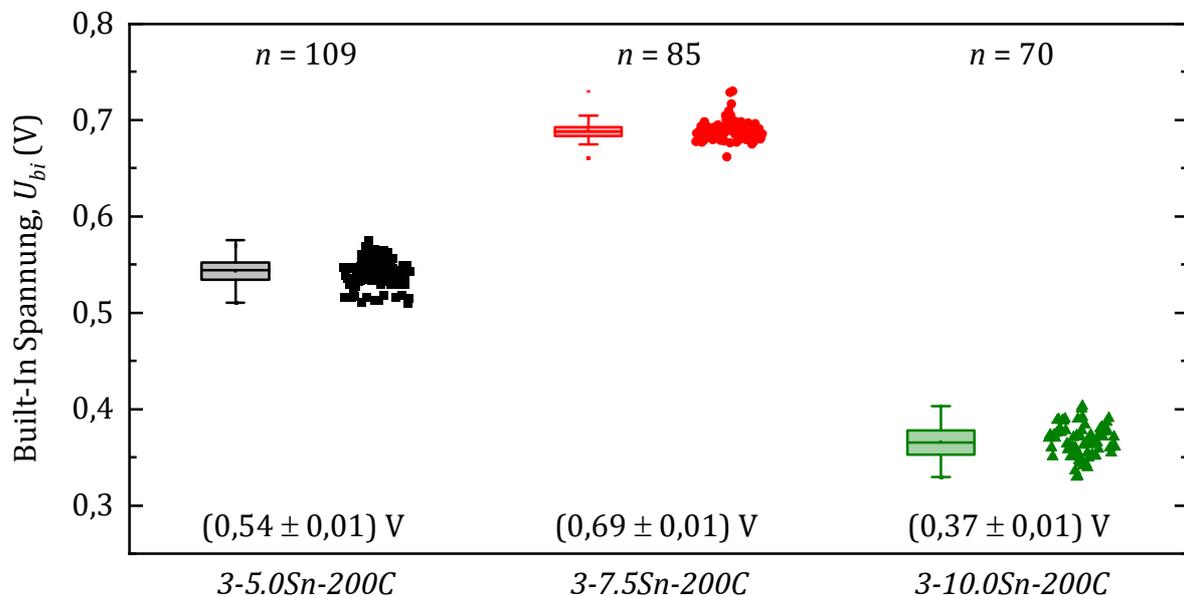


Abb. 7-11: Box-Whisker-Darstellung der extrahierten Built-In-Spannungen  $U_{bi}$  der Proben *3-5.0Sn-200C*, *3-7.5Sn-200C* und *3-10.0Sn-200C*.

Zusätzlich wurde unter Verwendung von Gleichung (2-16) die Akzeptorkonzentration  $N_{A,\text{SiGeSn}}$  der schwächer (hintergrund-)dotierten i- $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht ermittelt. Die hier notwendige relative Permittivität  $\epsilon_{r,\text{SiGeSn}}$  wurde in Abschnitt 2.6.2 ermittelt. Es ergibt sich dabei eine von der Spannung  $U$  abhängige Dotiercharakteristik. Abb. 7-12 zeigt exemplarisch die resultierende Dotiercharakteristik einer Diode des Feldes *A1* des Typs *pib* mit  $r_M = 80 \mu\text{m}$  der Probe *3-5.0Sn-200C*.

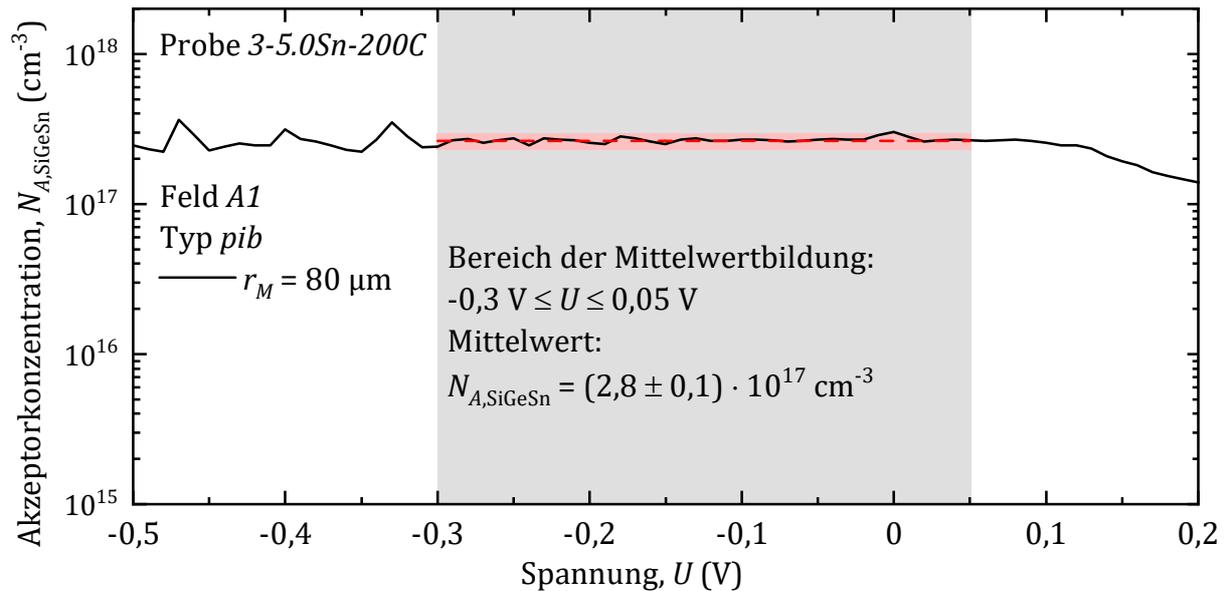


Abb. 7-12: Dotiercharakteristik einer Diode des Feldes A1 des Typs *pib* mit  $r_M = 80 \mu\text{m}$  der Probe *3-5.0Sn-200C*.

Aufgrund des deutlich erkennbaren, nahezu konstanten Verlaufs der Dotiercharakteristik erfolgt eine Mittelwertbildung im Spannungsbereich  $-0,3 \text{ V} \leq U \leq 0,05 \text{ V}$  zur Bestimmung der Akzeptorkonzentration  $N_{A,\text{SiGeSn}}$ . Die Akzeptorkonzentration  $N_{A,\text{SiGeSn}}$  wurde auf diese Weise für  $n > 70$  Dioden der Proben *3-5.0Sn-200C*, *3-7.5Sn-200C* und *3-10.0Sn-200C* berechnet. Die Ergebnisse sind in der Box-Whisker-Darstellung in Abb. 7-13 zusammenfassend dargestellt und werden für die weitere Auswertung in Abschnitt 7.3 benötigt.

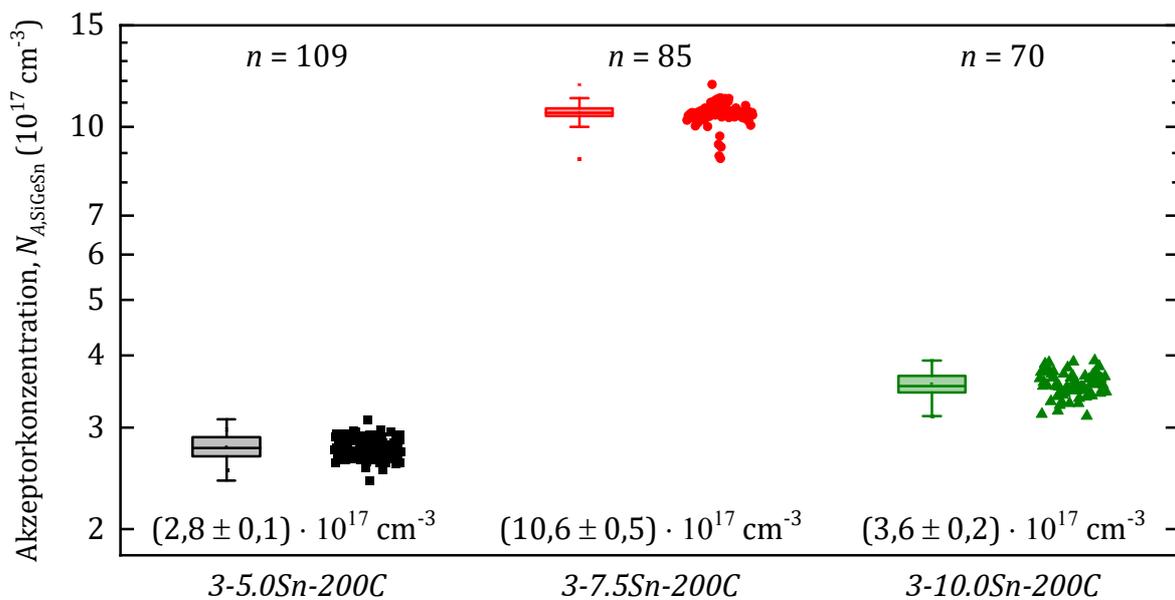


Abb. 7-13: Box-Whisker-Darstellung der extrahierten Akzeptorkonzentration  $N_{A,\text{SiGeSn}}$  der Probenserie 3.

Auffallend dabei ist die Höhe der Akzeptorkonzentration  $N_{A,\text{SiGeSn}}$ . Die Akzeptorkonzentration  $N_{A,\text{SiGeSn}}$  liegt dabei mit  $10^{17} \text{ cm}^{-3} \leq N_{A,\text{SiGeSn}} \leq 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  ein bis zwei Größenordnungen deutlich über der erwarteten Hintergrunddotierung von intrinsischem Ge  $N_{A,i\text{Ge}} \approx 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Die Ursache hierfür liegt wahrscheinlich an fehlerhaft in die Kristallmatrix eingebauten Sn-Atomen. Ähnliche Hintergrunddotierkonzentrationen wurden bereits in der Literatur für die Epitaxie von  $\text{Ge}_{1-z}\text{Sn}_z$  berichtet [69]. Die Akzeptorkonzentration  $N_{A,\text{SiGeSn}}$  der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht der Proben *3-5.0Sn-200C*, *3-7.5Sn-200C* und *3-10.0Sn-200C* wurde im Rahmen der Bachelorarbeit von Johannes Ziegler eingehender untersucht (Abschnitt 6.3 in [47]). Die im Schichtstapel der Probenserie 3 in Abb. 6-1 zu Grunde gelegte intrinsische  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht ist demnach eigentlich vielmehr eine p-typ dotierte  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht und wird daher als solche in der weiteren Auswertung betrachtet.

7.3. Berechnung der indirekten Bandlücke  $E_{g,\text{SiGeSn}}^L$ 

Aus den mittels C(U)-Charakterisierung bestimmten Built-In-Spannungen  $U_{bi}$  wird im nächsten Schritt die Bandlücke  $E_{g,\text{SiGeSn}}$  in Abhängigkeit der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Zusammensetzung berechnet. Für den hier betrachteten Konzentrationsbereich  $5,0\% \leq c_{\text{Sn}} \leq 10,0\%$  ergibt sich gemäß den Vorbetrachtungen in Abschnitt 2.6.1, basierend auf den Simulationen von Moontragoon, Soref und Ikonic [22] ein indirekter Halbleiter mit dem Leitungsbandminimum im L-Tal. Es gilt somit für die hier vorgestellten Ergebnisse  $E_{g,\text{SiGeSn}} = E_{g,\text{SiGeSn}}^L$ .

Für die Auswertung der C(U)-Charakterisierung wird zunächst der hier relevante Teil des zu erwartenden Banddiagramms, der Probenserie 3 in Abb. 7-14 betrachtet. Dabei wird die hoch p-typ dotierte, untere  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Kontaktschicht vernachlässigt.

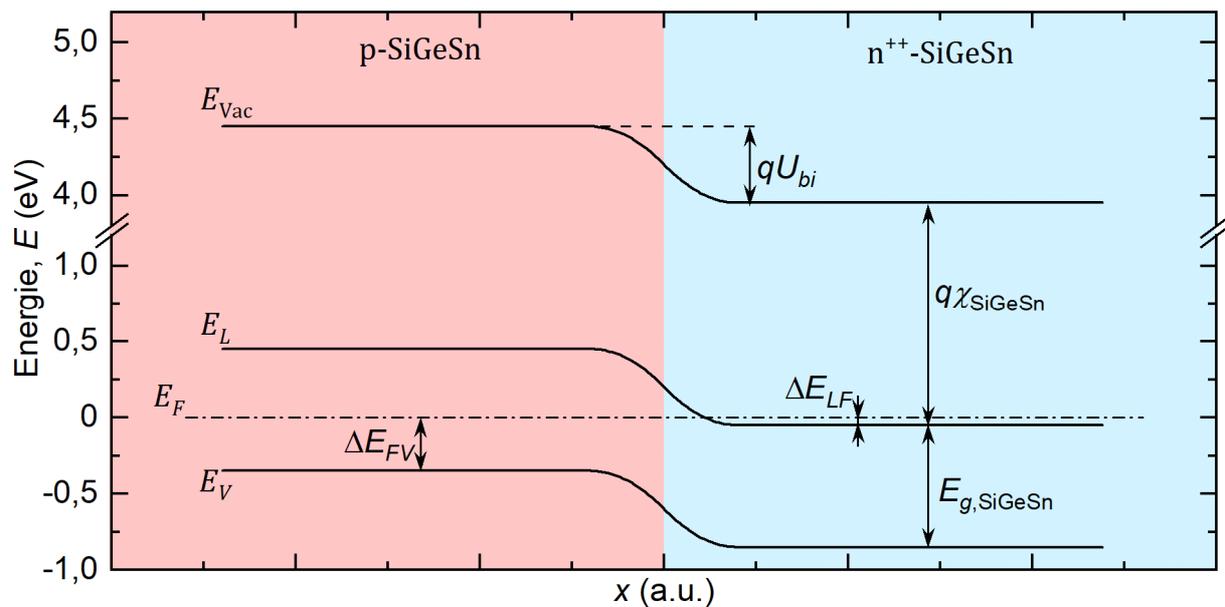


Abb. 7-14: Zu erwartendes Banddiagramm der Diodenstruktur der Probenserie 3.

Die Beziehung zur Berechnung der Bandlücke  $E_{g,\text{SiGeSn}}$  ist demzufolge wie in Gleichung (7-1) dargestellt.

$$E_{g,\text{SiGeSn}} = q \cdot U_{bi} + \Delta E_{FV} - \Delta E_{LF} \quad (7-1)$$

$$\text{mit } \Delta E_{LF} = E_L - E_{F,n} \text{ und } \Delta E_{FV} = E_{F,p} - E_V$$

Die für die Berechnungen notwendigen effektiven Zustandsdichten im Leitungs- und Valenzband  $N_L$  und  $N_V$  von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  sind ihrerseits kompositionsabhängig und wurden in Abschnitt 2.6.5 bestimmt.

Aufgrund der im Vergleich zu den effektiven Zustandsdichten im Leitungs- und Valenzband  $N_L$  und  $N_V$  hohen Dotierstoffkonzentrationen  $N_{A,\text{SiGeSn}}$  und  $N_{D,\text{SiGeSn}}$  ist bereits von Entartung auszugehen. Außerdem liegt demzufolge das Fermi-niveau in der n-typ dotierten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht  $E_{F,n}$  bereits oberhalb der Leitungsbandkante. Da hierbei die Boltzmann-Näherung ihre Gültigkeit verliert erfolgt die Berechnung der Lage des Fermi-niveaus im n-typ und p-typ dotierten Gebiet  $E_{F,n}$  und  $E_{F,p}$  mittels der in Gleichung (7-2) und (7-3) dargestellten Abschätzung des Fermi-Dirac-Integrals nach Sze (Gleichungen (26a) und (26b) in [2]).

$$\Delta E_{FV,\text{SiGeSn}} = E_F - E_V = -k_B T \left[ \ln \left( \frac{N_{A,\text{SiGeSn}}}{N_{V,\text{SiGeSn}}} \right) + 2^{-3/2} \left( \frac{N_{A,\text{SiGeSn}}}{N_{V,\text{SiGeSn}}} \right) \right] \quad (7-2)$$

$$\Delta E_{LF,\text{SiGeSn}} = E_L - E_F = -k_B T \left[ \ln \left( \frac{N_{D,\text{SiGeSn}}}{N_{L,\text{SiGeSn}}} \right) + 2^{-3/2} \left( \frac{N_{D,\text{SiGeSn}}}{N_{L,\text{SiGeSn}}} \right) \right] \quad (7-3)$$

Die auf diese Weise berechneten Werte für die Bandlücke  $E_{g,\text{SiGeSn}}^L$  in Abhängigkeit der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Zusammensetzung sind Abb. 7-15 zusammengefasst. Zum Vergleich dienen die Ergebnisse der theoretischen Berechnungen von Moontragoon, Soref und Ikonic [22] und Sun, Soref und Cheng [70]. Auffallend ist dabei die deutliche zunehmende Abweichung zwischen den Ergebnissen für steigende Sn-Konzentrationen  $c_{\text{Sn}}$ . Allerdings handelt es sich bei [22] und [70] um die Ergebnisse simulativer Berechnungen. Außerdem ist der große Einfluss der einzelnen quadratischen Korrekturfaktoren  $b_{\text{SiGe}}^L$ ,  $b_{\text{GeSn}}^L$  und  $b_{\text{SiSn}}^L$  in Gleichung (2-17) zu beachten. Insbesondere für den Si-Sn-Korrekturfaktor  $b_{\text{SiSn}}^L$  gibt es keine experimentellen Daten. Da einige mögliche Anwendungen von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  im Bereich der Si-basierten Photonik liegen konzentrieren sich die meisten experimentellen Untersuchungen auf die Bestimmung der direkten Bandlücke  $E_{g,\text{SiGeSn}}^\Gamma$  [30], [31], [33], [50], [71]–[73]. Zukünftige Experimente sollten daher darauf abzielen die indirekte Bandlücke mithilfe weiterer unterschiedlicher Analyseverfahren zu bestimmen,

um die ersten Ergebnisse der vorliegenden Arbeit zu untermauern. Der Ausblick in Kapitel 8 wird hierzu einige Möglichkeiten aufzeigen.

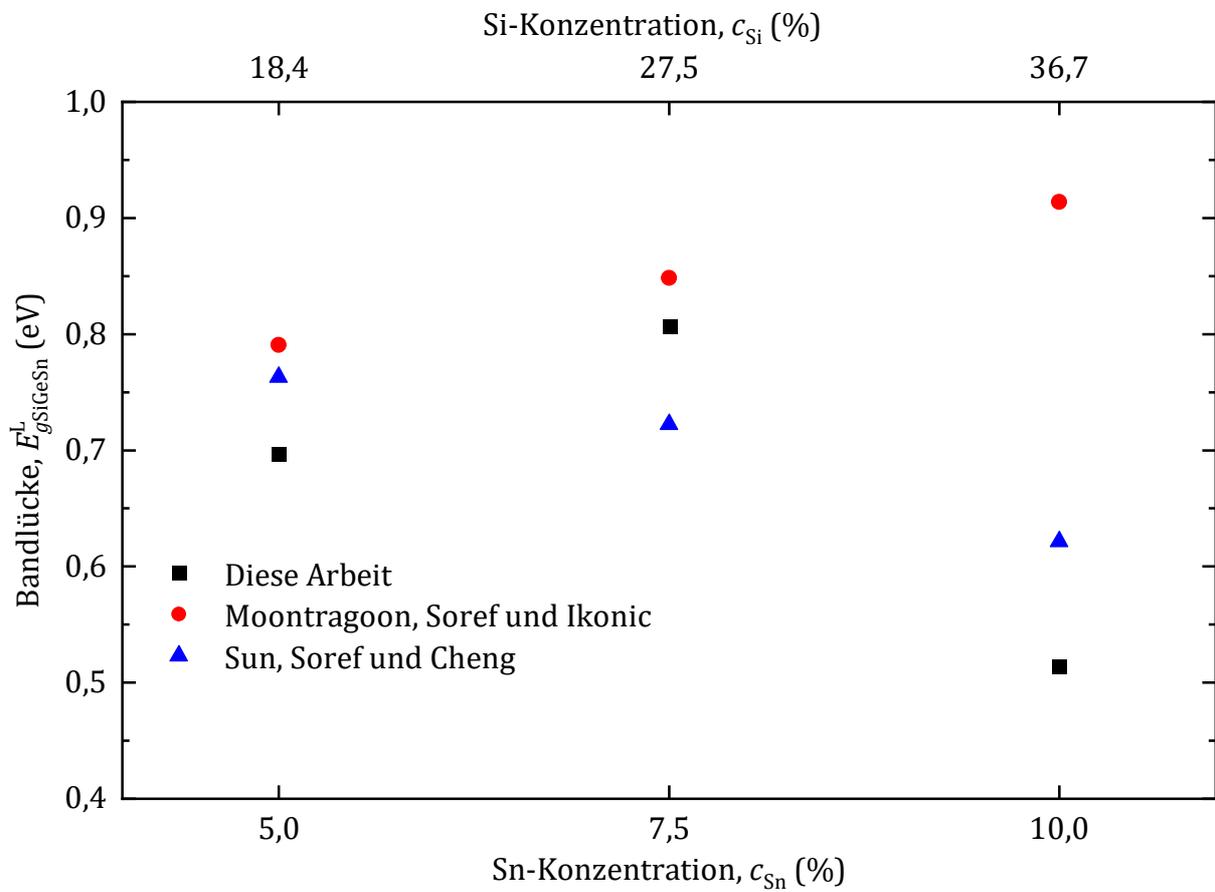


Abb. 7-15: Übersicht der indirekten Bandlücke  $E_{g,\text{SiGeSn}}^L$  von auf Ge gitterangepasstem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  in Abhängigkeit der Zusammensetzung im Vergleich mit den theoretischen Arbeiten von Moontragoon, Soref und Ikonic [22] und Sun, Soref und Cheng [70].

### 7.4. I(U)-Charakterisierung von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Heterodioden

Im nächsten Schritt werden die Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Heterodioden der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Probenserie 4 diskutiert. Die Ergebnisse dienen, wie bereits bei der Charakterisierung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Homodioden, als Grundlage für die Bewertung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Heterodioden und inwieweit diese für die anschließende C(U)-Charakterisierung geeignet sind. Wie bereits zuvor bei den  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Homodioden werden hierbei stets die Stromdichte- und die Umfangstromdichte-Charakteristiken betrachtet. Zur besseren Vergleichbarkeit werden dabei stets die Dioden des Feldes A3 analysiert. Eine Ausnahme stellt die Probe 4-12.5Sn dar, bei der eine reduzierte Ausbeute des Feldes A3 die statistische Aussagekraft der Ergebnisse beeinträchtigt. Hier wurde stattdessen das benachbarte Feld A4 analysiert.

Auf Basis der Ergebnisse erfolgt zunächst eine qualitative Bewertung der hergestellten Dioden. Zur quantitativen Bewertung werden auch hier der Idealitätsfaktor  $\eta$ , das On-Off-Stromverhältnis  $I_{\text{On}}/I_{\text{Off}}$  und die Sperrstromdichte  $J_{-1V}$  bei  $U = -1 \text{ V}$  berechnet und in Abschnitt 7.3.6 zusammenfassend dargestellt.

Anhand der Ergebnisse der C(U)-Charakterisierung erfolgt im darauffolgenden Abschnitt die Bestimmung des Leitungs- und Valenzbandversatzes  $\Delta E_L$  und  $\Delta E_V$ . Wie bereits erwähnt dienen die Leitungs- und Valenzbandversätze  $\Delta E_L$  und  $\Delta E_V$  als die wichtigsten Designparameter für  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Heterostrukturen.

#### 7.4.1. I(U)-Charakterisierung der Probe 4-5.0Sn

Die Stromdichte- und Umfangstromdichte-Charakteristiken der Bauelemente des Feldes A3 der Probe 4-5.0Sn sind in Abb. 7-16 a) und b) dargestellt. Es ist erneut eine sehr gute Volumenproportionalität des Stromes für  $-1 \text{ V} \leq U \leq 0,25 \text{ V}$  zu erkennen. Lediglich die Diode mit  $r_M = 40 \mu\text{m}$  zeigt einen leicht unterschiedlichen Verlauf im Sperrbereich  $-1 \text{ V} \leq U \leq 0 \text{ V}$ . Für eine Spannung  $U > 0,25 \text{ V}$  fächert die Kurvenschar der Stromdichte-Charakteristiken erwartungsgemäß auf. In diesem Bereich wird die Kennlinie durch den Serienwiderstand  $R_S$  dominiert.

Im Vergleich zur Probe 3-5.0Sn-200C mit der gleichen Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht fällt jedoch das deutlich geringere On-Off-Stromverhältnis von nur ein bis zwei

Größenordnungen auf. Die Ursache hierfür liegt hauptsächlich an der deutlich höheren mittleren Sperrstromdichte bei  $U = -1 \text{ V}$  von  $J_{-1V} = 29,62 \pm 4,07 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ . Dies ist auf die höhere Durchstoßversetzungsdichte von  $N_{TD} = 1 \cdot 10^{10} \pm 0,1 \text{ cm}^{-2}$  zurückzuführen, welche mittels TEM in Kapitel 6.2.3 ermittelt wurde. Der steilere Anstieg des Stromes im Sperrbereich  $U < 0 \text{ V}$  ist gleichzeitig auf die unterschiedlichen Eigenschaften der p-typ dotierten Schicht (Dicke  $d_{\text{Ge}}$ , Akzeptorkonzentration  $N_{A,\text{Ge}}$  und Material) zurückzuführen.

Mit Blick auf die nachfolgende  $C(U)$ -Charakterisierung ist der steilere Anstieg der Sperrstromdichte nachteilig. Durch die höhere Sperrstromdichte verkleinert sich der Spannungsbereich, der eine sinnvolle Messung der Sperrschichtkapazität  $C_S$  und somit auch die Auswertung der Built-In-Spannung  $U_{bi}$  erlaubt. Der für die Auswertung der  $C(U)$ -Charakterisierung sinnvolle Spannungsbereich wird in Abschnitt 7.5 genauer eingegrenzt.

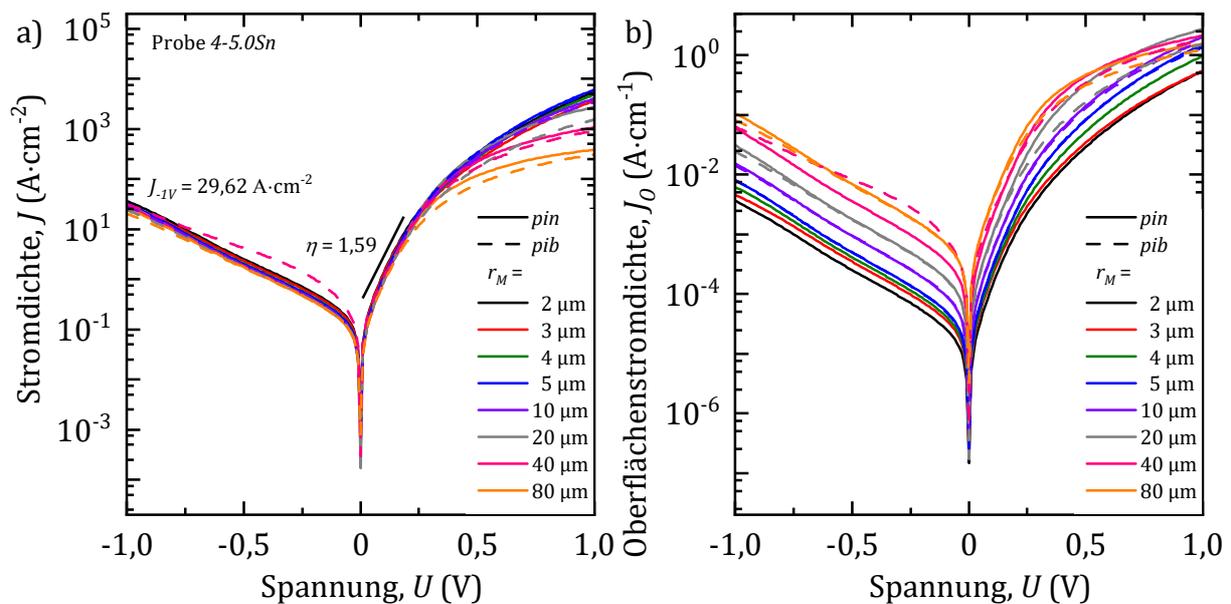


Abb. 7-16: Ergebnisse der  $I(U)$ -Charakterisierung der Probe 4-5.0Sn, a)  $J(U)$ -Charakteristik, b)  $J_0(U)$ -Charakteristik.

Der mittlere Idealitätsfaktor der Dioden beträgt hier  $\eta = 1,59 \pm 0,06$ . Im direkten Vergleich zu den in Kapitel 7.1 diskutierten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Homodioden liegt dieser Wert im Rahmen der üblichen Prozesstoleranzen der am IHT hergestellten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Dioden.

#### 7.4.2. $I(U)$ -Charakterisierung der Probe 4-7.5Sn

Die Ergebnisse der  $I(U)$ -Charakterisierung der Probe 4-7.5Sn sind in den Stromdichte- und Umfangstromdichte-Charakteristiken der Dioden des Feldes A3 in Abb. 7-17 a) und

b) zusammenfassend dargestellt. Nicht funktionierende Dioden, welche also ein durchgehend ohmsches Verhalten aufweisen, wurden in der Darstellung zu Gunsten der Übersichtlichkeit nicht berücksichtigt.

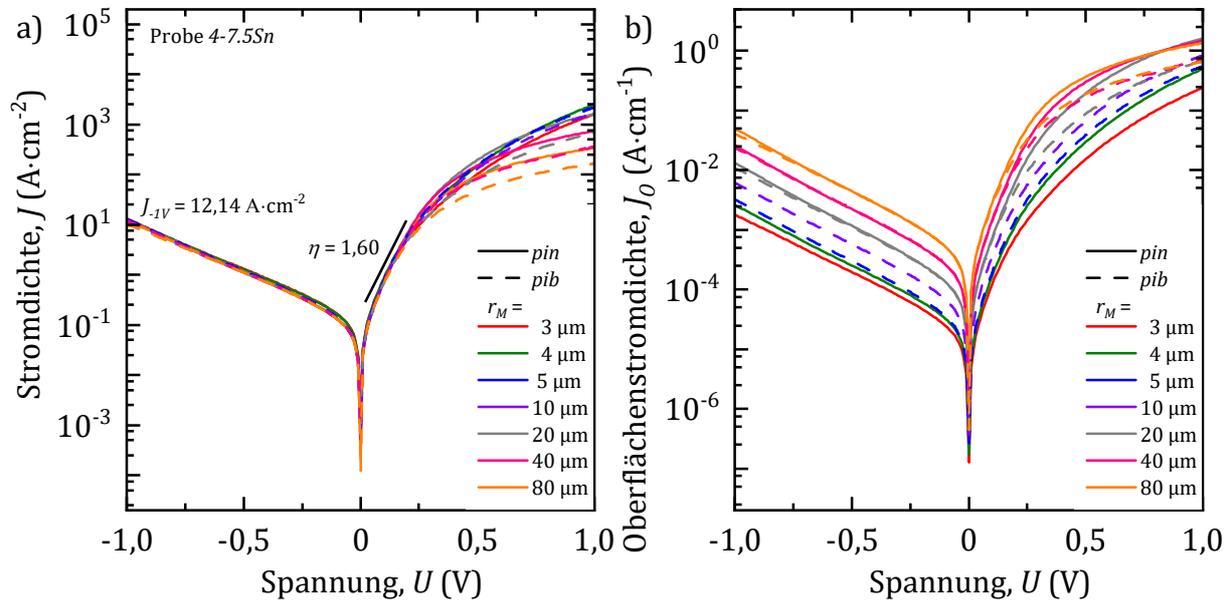


Abb. 7-17: Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung der Probe 4-7.5Sn, a) J(U)-Charakteristik, b)  $J_0$ (U)-Charakteristik.

Die funktionierenden Dioden zeigen hierbei eine nahezu perfekte Volumenproportionalität für  $-1 \text{ V} \leq U \leq 0,25 \text{ V}$ . Das On-Off-Stromverhältnis beträgt hier ebenfalls ein bis zwei Größenordnungen. Die mittlere Sperrstromdichte bei  $U = -1 \text{ V}$  ist mit einem Wert von  $\overline{J_{-1V}} = 12,14 \pm 1,01 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$  um einen Faktor 2,4 geringer als bei Probe 4-5.0Sn. Bei dieser Probe liegt der mittlere Idealitätsfaktor der Dioden bei  $\eta = 1,60 \pm 0,05$ .

#### 7.4.3. I(U)-Charakterisierung der Probe 4-10.0Sn

In Abb. 7-18 a) und b) sind die Stromdichte- und Umfangstromdichte-Charakteristiken der Dioden des Feldes A3 der Probe 4-10.0Sn zusammenfassend dargestellt. Bei den Dioden der Probe 4-10.0Sn zeigt sich ebenfalls eine nahezu perfekte Volumenproportionalität des Stromes für einen Spannungsbereich  $-1 \text{ V} \leq U \leq 0,25 \text{ V}$ . Das On-Off-Stromverhältnis beträgt hier ebenfalls ein bis zwei Größenordnungen.

Die mittlere Sperrstromdichte bei  $U = -1 \text{ V}$  ist mit einem Wert von  $J_{-1V} = 9,95 \pm 0,98 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$  hierbei in derselben Größenordnung wie bei den zuvor betrachteten Proben 4-5.0Sn und 4-7.5Sn. Der mittlere Idealitätsfaktor liegt wie bei Probe 4-7.5Sn bei  $\eta = 1,60 \pm 0,09$ .

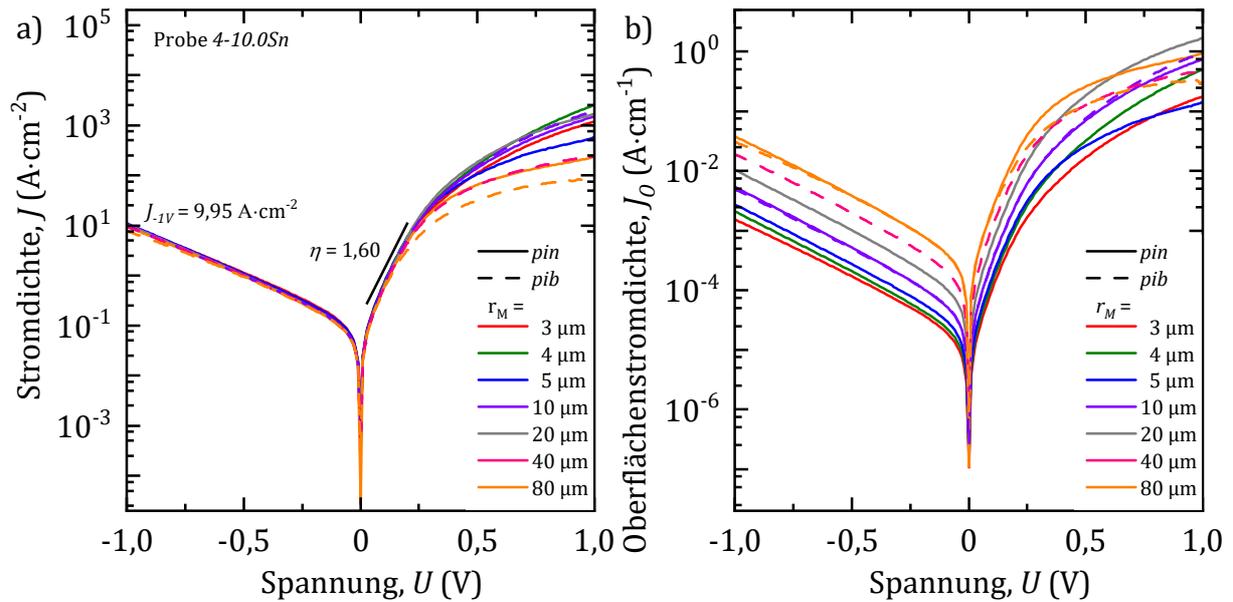


Abb. 7-18: Ergebnisse der  $I(U)$ -Charakterisierung der Probe 4-10.0Sn, a)  $J(U)$ -Charakteristik, b)  $J_0(U)$ -Charakteristik.

#### 7.4.4. $I(U)$ -Charakterisierung der Probe 4-12.5Sn

Die Stromdichte- und Umfangstromdichte-Charakteristiken der Dioden des Feldes A4 der Probe 4-12.5Sn sind in Abb. 7-19 a) und b) dargestellt.

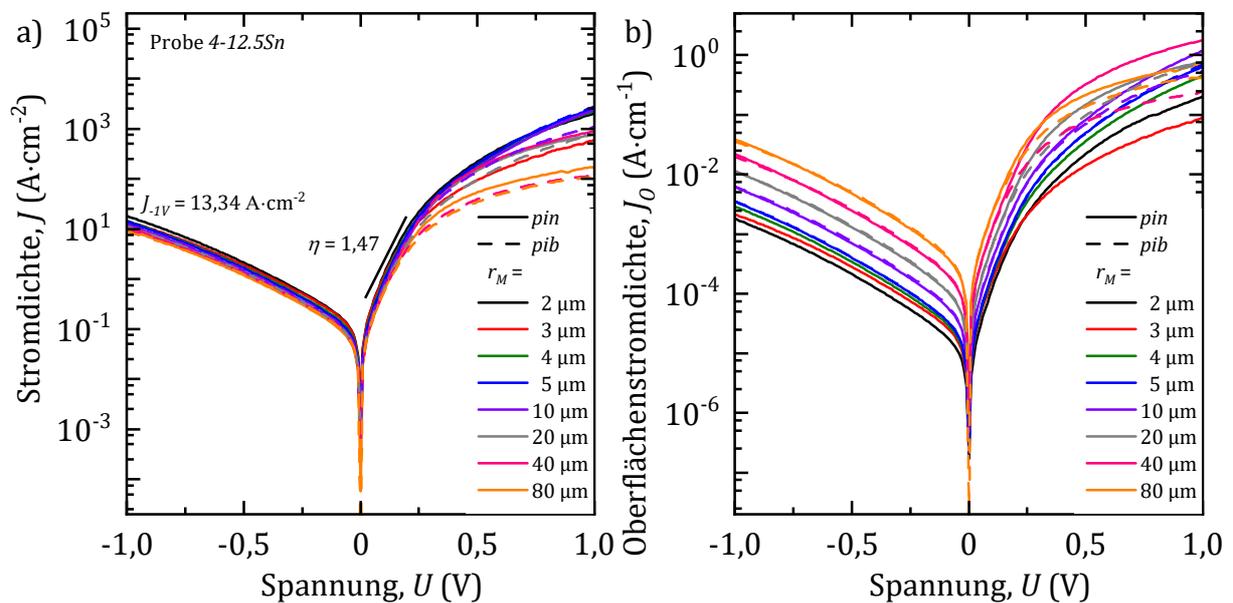


Abb. 7-19: Ergebnisse der  $I(U)$ -Charakterisierung der Probe 4-12.5Sn, a)  $J(U)$ -Charakteristik, b)  $J_0(U)$ -Charakteristik.

Dabei ist ebenfalls eine sehr gute Volumenproportionalität im Spannungsbereich  $-1 \text{ V} \leq U \leq 0,25 \text{ V}$  und ein On-Off-Stromverhältnis von ein bis zwei Größenordnungen erkennbar.

Die mittlere Sperrstromdichte bei  $U = -1\text{ V}$  liegt mit einem Wert von  $J_{-1V} = 13,34 \pm 4,01\text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$  in derselben Größenordnung wie bei den zuvor betrachteten Proben. In Anbetracht der hohen Sn-Konzentration von  $c_{\text{Sn}} = 12,5\%$  ist vor allem der deutlich niedrigere mittlere Idealitätsfaktor von  $\eta = 1,47 \pm 0,04$  bemerkenswert.

#### 7.4.5. I(U)-Charakterisierung der Probe 4-15.0Sn

Zuletzt werden die Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung in den Stromdichte- und Umfangsstromdichte-Charakteristiken der Dioden des Feldes A3 der Probe 4-15.0Sn in Abb. 7-20 a) und b) betrachtet. Diese stehen in völligem Kontrast zu den Ergebnissen der zuvor betrachteten Proben 4-5.0Sn, 4-7.5Sn, 4-10.0Sn und 4-12.5Sn. Die Stromdichte-Charakteristiken lassen keinerlei Diodenverhalten erkennen. Stattdessen zeigt sich ein deutlich ohmsches Verhalten, was auf einen Kurzschluss der gewünschten Diodenstruktur hinweist. Es sei darauf hingewiesen, dass einige Charakteristiken nicht den vollen Spannungsbereich  $-1\text{ V} \leq U \leq 1\text{ V}$  abdecken. Da hierbei die eingestellte Strombegrenzung erreicht wurde, wurden die entsprechenden Messwerte entfernt.

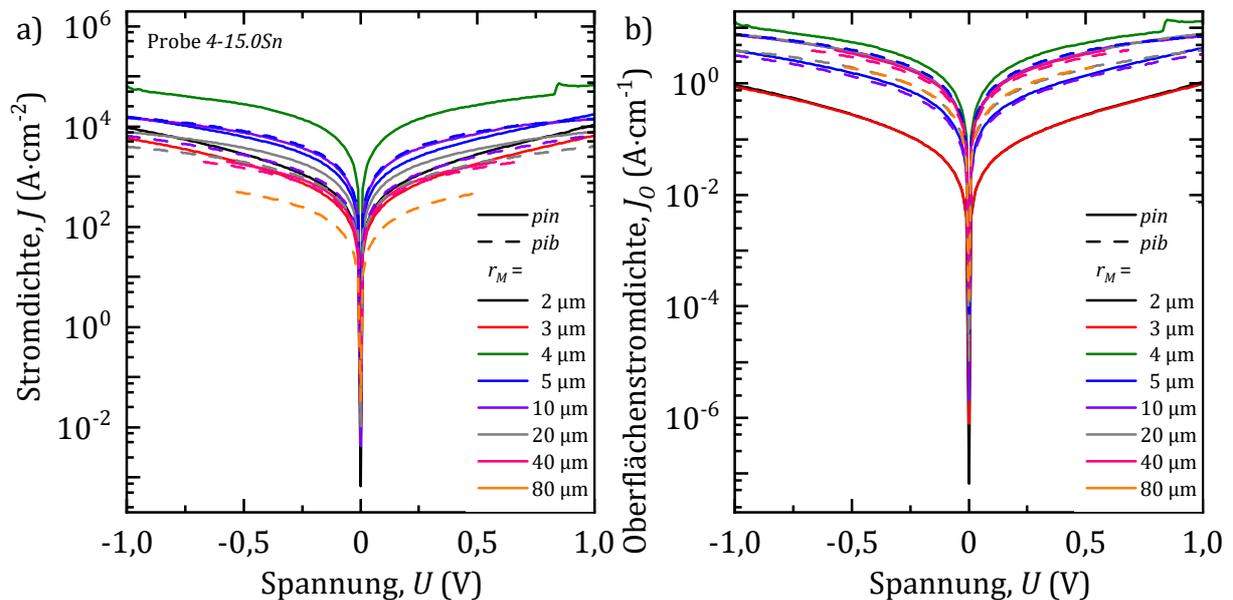


Abb. 7-20: Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung der Probe 4-15.0Sn, a)  $J(U)$ -Charakteristik, b)  $J_0(U)$ -Charakteristik

Eine mögliche Ursache für das ohmsche Verhalten der Dioden ist eine erhöhte Zahl an Defekten im Kristallvolumen. Die dadurch deutlich erhöhte Defektrekombination überdeckt schließlich das gewünschte Diodenverhalten. Dies wäre allerdings an einer Volumenproportionalität der Charakteristiken erkennbar. Ein Kurzschlusspfad entlang

der Mesa-Oberfläche, hervorgerufen durch eine unzureichende Passivierung dieser, wäre hingegen an einer Umfangsproportionalität erkennbar. Da jedoch weder eine Volumen- noch eine Umfangsproportionalität erkennbar ist, können diese Ursachen ausgeschlossen werden.

Darüber hinaus konnten Metallreste durch eine unzureichende Ätzung der Metallisierung ausgeschlossen werden. Die Ursache für die erkennbaren Charakteristiken ist daher nicht zweifelsfrei zu erklären und bedarf künftig weiterer Analysen. Es ist jedoch anzumerken, dass die elektrischen Charakteristiken der bisher hergestellten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Dioden mit einer Sn-Konzentration von  $c_{\text{Sn}} = 15\%$  stets kein Diodenverhalten erkennen ließen.

Da die Charakteristiken kein typisches Diodenverhalten aufweisen wurde keine weitere qualitative Auswertung vorgenommen. Die Probe 4-15.0Sn wird daher in der folgenden Zusammenfassung der Probenserie 4 nicht berücksichtigt

#### 7.4.6. Zusammenfassung der I(U)-Charakterisierung der Probenserie 4

In diesem Abschnitt erfolgt ein abschließender Vergleich der Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung der Probenserie 4. Hierzu sind in Abb. 7-21 a) und b) jeweils die Stromdichte- und Umfangstromdichte-Charakteristiken einer Diode des Typs *pib* des Feldes A3 mit  $r_M = 3\ \mu\text{m}$  und  $r_M = 80\ \mu\text{m}$  der Proben 4-5.0Sn, 4-7.5Sn, 4-10.0Sn und 4-12.5Sn im Vergleich dargestellt.

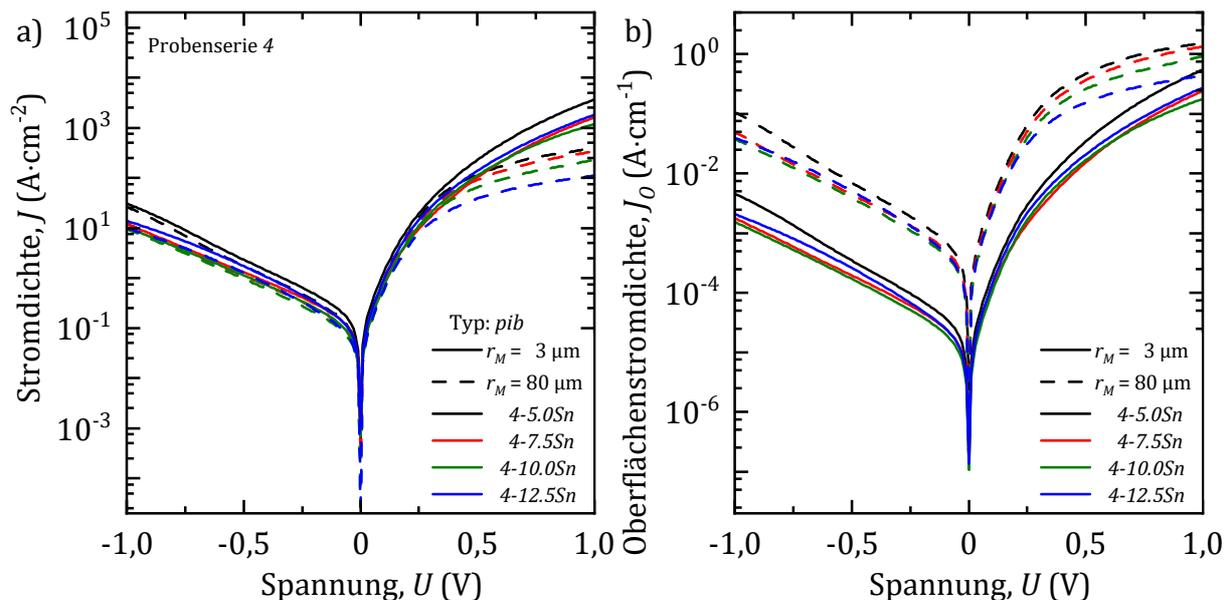


Abb. 7-21: Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung der Probenserie 4, a)  $J$ (U)-Charakteristik, b)  $J_o$ (U)-Charakteristik.

Die Stromdichte-Charakteristiken lassen dabei nur geringfügige Unterschiede zwischen den einzelnen Proben erkennen, was auf eine durchgehend gleichbleibende Qualität der Dioden hinweist.

In der Umfangsstromdichte-Charakteristik ist zudem erwartungsgemäß eine Gruppierung der Charakteristiken der Bauelemente mit  $r_M = 3 \mu\text{m}$  und  $r_M = 80 \mu\text{m}$  zu erkennen.

Abschließend sind die bereits in Abschnitt 7.1.6 verwendeten Bewertungskriterien für die Dioden der Probenserie 4 in Tab. 7-2 zusammengefasst. Die Ergebnisse der I(U)-Charakterisierung zeigen generell eine sehr gute Eignung der hergestellten Dioden der Probenserie 4 für die nachfolgende C(U)-Charakterisierung zur Bestimmung der Built-In-Spannung  $U_{bi}$ . Lediglich die Probe 4-15.0Sn weist keine funktionierenden Dioden auf.

<b>Probe</b>	<b><math>J_{-1V}</math> (<math>\text{A} \cdot \text{cm}^{-2}</math>)</b>	<b><math>\eta</math></b>
<b>4-5.0Sn</b>	$30 \pm 4$	$1,59 \pm 0,06$
<b>4-7.5Sn</b>	$12 \pm 1$	$1,60 \pm 0,05$
<b>4-10.0Sn</b>	$10 \pm 1$	$1,60 \pm 0,09$
<b>4-12.5Sn</b>	$13 \pm 4$	$1,47 \pm 0,04$

Tab. 7-2: Aus den Ergebnissen der I(U)-Charakterisierung der Probenserie 4 extrahierte Diodenparameter.

7.5. C(U)-Charakterisierung von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Heterodioden

In Abschnitt 1.1 wurde zuvor die indirekte Bandlücke von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$   $E_{\text{SiGeSn}}^L$  anhand der Ergebnisse der C(U)-Charakterisierung von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Homodioden bestimmt. Im nächsten Schritt wird das Verfahren zur Bestimmung des Leitungs- und Valenzbandversatzes  $\Delta E_L$  und  $\Delta E_V$  auf die  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Heterodioden der Probenserie 4 angewendet. In diesem Abschnitt werden zunächst die Ergebnisse der C(U)-Charakterisierung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Heterodioden der Probenserie 4 betrachtet.

Die Auswertung beginnt dabei gemäß Kapitel 2 zunächst wieder mit der Korrektur der Kapazität der Diode  $C_{\text{Diode}}$  um die Kapazität  $C_{\text{Open}}$  zur Sperrschichtkapazität  $C_S$ . Diese wird anschließend auf die Mesafläche  $A_{\text{Mesa}}$  normiert. Abb. 7-22 zeigt exemplarisch die normierten  $C_S(U)$ -Charakteristiken der Dioden des Feldes A3 der Probe 4-5.0Sn. Hierbei zeigt sich erwartungsgemäß eine sehr gute Volumenproportionalität im für die Auswertung relevanten Spannungsbereich  $-0,5 \text{ V} \leq U \leq 0,05 \text{ V}$ .

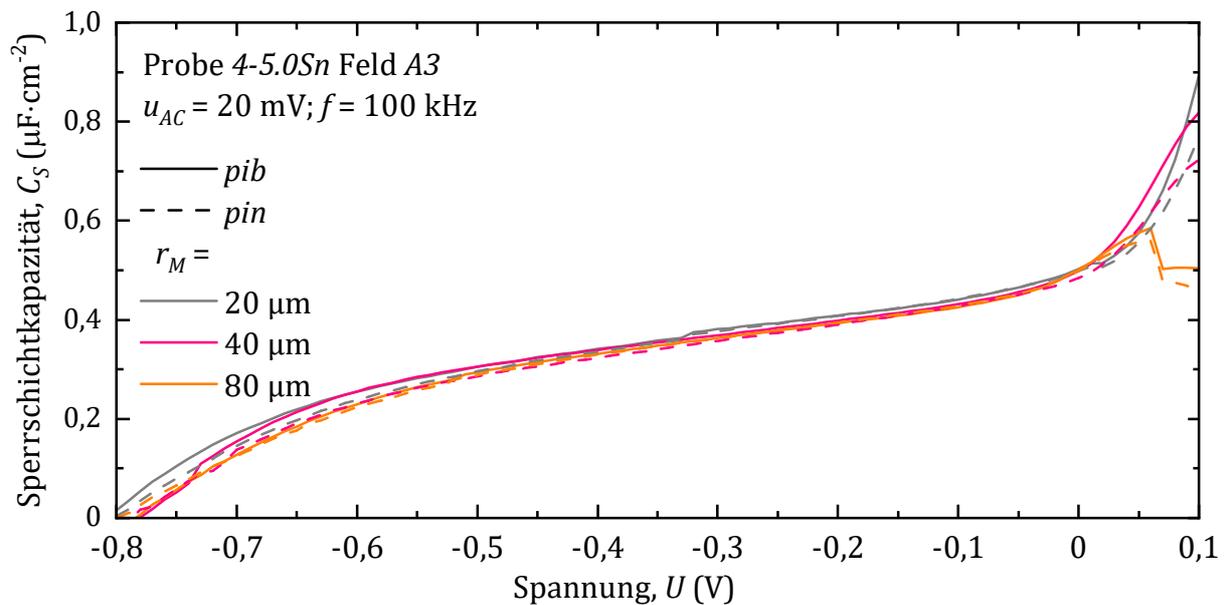


Abb. 7-22: Normierte  $C_S(U)$ -Charakteristiken von Dioden mit  $r_M = \{20, 40, 80\} \mu\text{m}$  der Probe 4-5.0Sn.

Im Vergleich zu den Ergebnissen der C(U)-Charakterisierung der Probenserie 3 sinkt die Kapazität für Spannungen  $U < -0,5 \text{ V}$  bereits deutlich früher gegen  $C_S \rightarrow 0 \mu\text{F} \cdot \text{cm}^{-2}$  ab. Dies ist zunächst auf die unterschiedlichen Schichtstrukturen der beiden Probenserien 3 und 4 (Dicke und Dotierstoffkonzentrationen) zurückzuführen. Eine weitere Ursache ist

der im Rahmen der  $I(U)$ -Charakterisierung in Abschnitt 7.4 beobachtete, deutlich steilere Anstieg des Sperrstromes.

Im nächsten Schritt werden die  $C_S(U)$ -Charakteristiken der Probenserie 4 in Abb. 7-23 verglichen. Exemplarisch hierfür dient jeweils die Diode des Typs *pib* mit  $r_M = 80 \mu\text{m}$ . Die  $C_S(U)$ -Charakteristiken unterscheiden sich dabei in ihrer Position entlang der Spannungsachse und ihrer Höhe nur geringfügig.

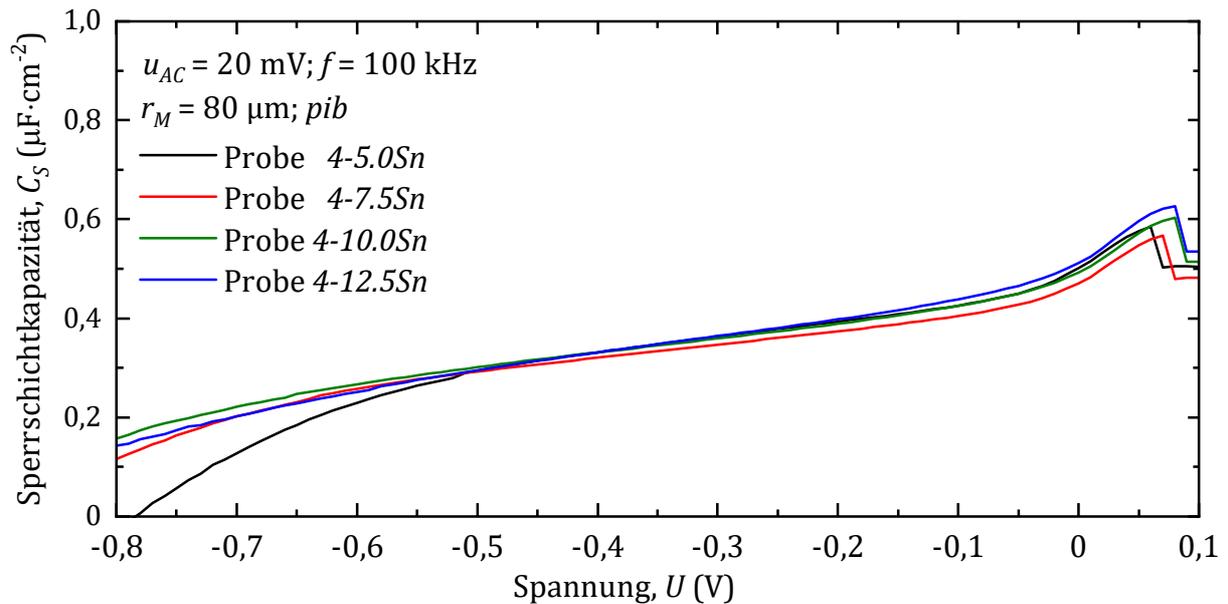


Abb. 7-23: Vergleich der  $C_S(U)$ -Charakteristiken von Dioden der Probenserie 4 mit  $r_M = 80 \mu\text{m}$ .

Einen deutlich besseren Aufschluss gibt hier erneut die  $C_S^2$ -Darstellung in Abb. 7-24.

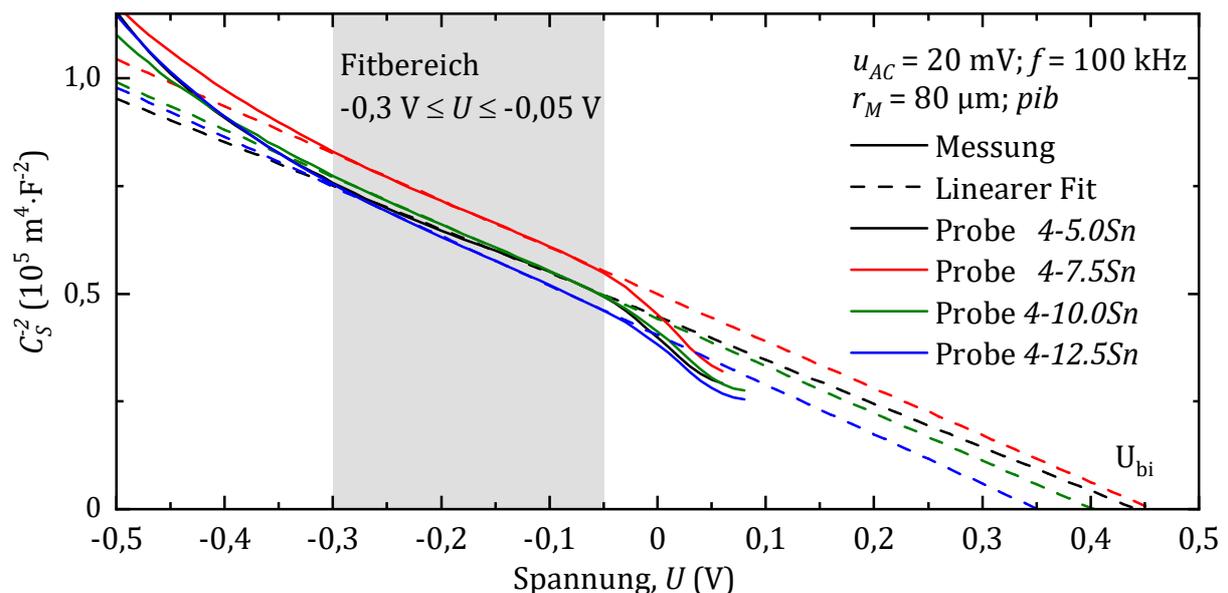


Abb. 7-24: Vergleich der  $C_S^{-2}(U)$ -Charakteristiken von Dioden der Probenserie 4 mit  $r_M = 80 \mu\text{m}$ .

Hierbei zeigt sich erneut gemäß den theoretischen Erwartungen ein linearer Verlauf. Die lineare Anpassung des Verlaufs, als Basis für die lineare Extrapolation, erfolgt hier im Spannungsbereich  $-0,3 \text{ V} \leq U \leq -0,05 \text{ V}$ . Der Schnittpunkt der linearen Extrapolation kennzeichnet die Built-In-Spannung  $U_{bi}$ , welche im nachfolgenden Abschnitt für die Berechnung der Leitungs- und Valenzbandversätze  $\Delta E_L$  und  $\Delta E_V$  verwendet wird.

Die Auswertung wurde hierbei an  $n > 27$  Dioden für die Proben  $4-5.0\text{Sn}$ ,  $4-7.5\text{Sn}$ ,  $4-10.0\text{Sn}$  und  $4-12.5\text{Sn}$  durchgeführt. Die Ergebnisse sind in der Box-Whisker-Darstellung in Abb. 7-25 zusammenfassend dargestellt.

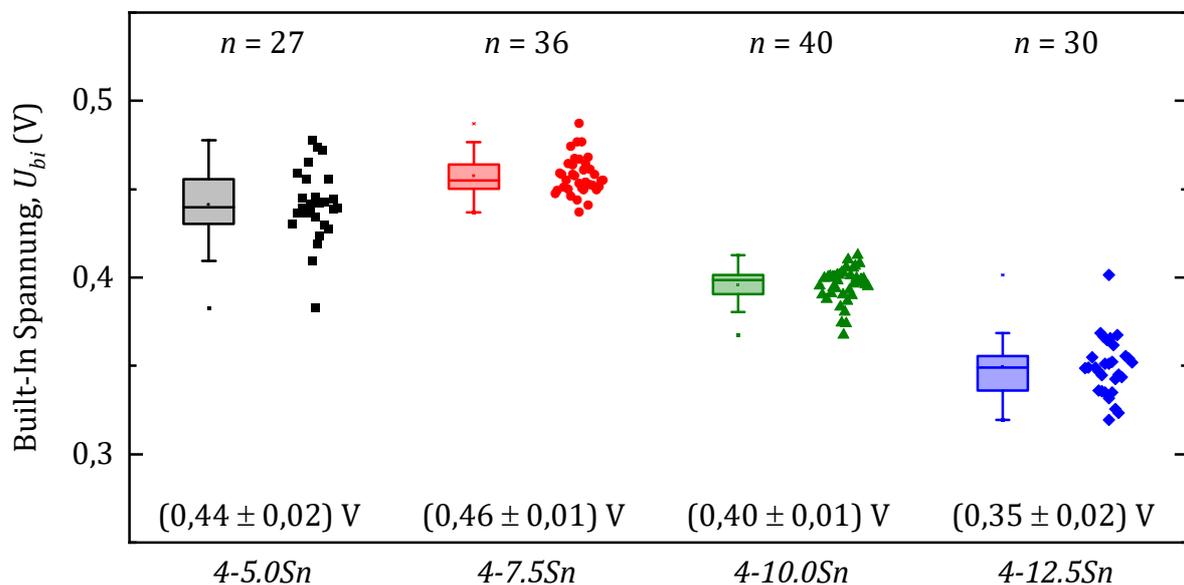


Abb. 7-25: Box-Whisker-Darstellung der extrahierten Built-In-Spannungen  $U_{bi}$  der Proben  $4-5.0\text{Sn}$ ,  $4-7.5\text{Sn}$ ,  $4-10.0\text{Sn}$  und  $4-12.5\text{Sn}$ .

Im letzten Schritt der  $C(U)$ -Charakterisierung wurde auch hier die Akzeptorkonzentration  $N_{A,\text{Ge}}$  der schwach dotierten Ge-Schicht unter Verwendung von Gleichung (2-16) berechnet. Diese dient im nachfolgenden Abschnitt zur Berechnung der Lage des Fermi-Niveaus in der Ge-Schicht.

Zunächst wird hierfür wieder die nach Gleichung (2-16) resultierende Akzeptorkonzentrations-Charakteristik in Abb. 7-26 betrachtet. Bemerkenswert ist hierbei die abfallende Akzeptorkonzentration  $N_{A,\text{Ge}}$  für Spannungen  $U < -0,3 \text{ V}$ . Dabei handelt es sich um ein Artefakt aus der Berechnung, da die Sperrschichtkapazität ab dieser Spannung, wie in Abb. 7-23 erkennbar, gegen Null absinkt  $C_S(U < -0,3 \text{ V}) \rightarrow 0 \mu\text{F} \cdot \text{cm}^{-2}$ . Zurückzuführen ist dieses Verhalten auf den zunehmenden Sperrstrom, hervorgerufen durch Defekte.

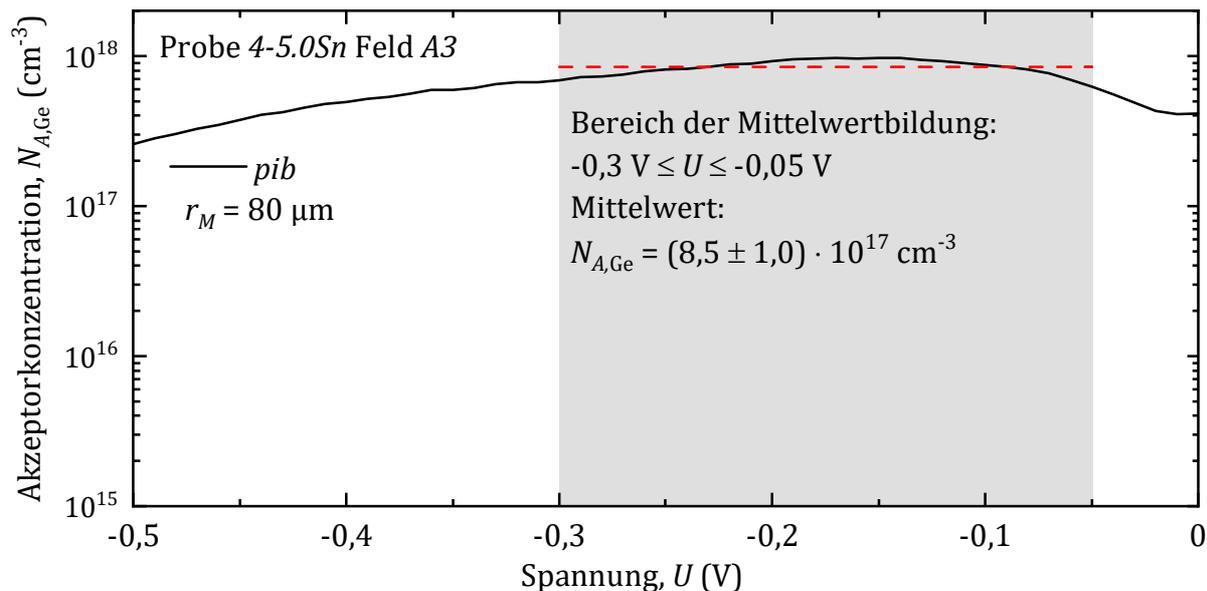


Abb. 7-26: Akzeptorkonzentrations-Charakteristik einer Diode des Feldes A3 des Typs *pib* mit  $r_M = 80 \mu\text{m}$  der Probe 4-5.0Sn.

Die Akzeptorkonzentration  $N_{A,\text{Ge}}$  wurde hierbei im Spannungsbereich  $-0,3 \text{ V} \leq U \leq -0,05 \text{ V}$  durch Mittelwertbildung für  $n > 30$  Dioden der Probenserie 4 berechnet. Die Ergebnisse sind in der Box-Whisker-Darstellung in Abb. 7-27 zusammenfassend dargestellt. Dabei ist nur eine geringe Abweichung von der angestrebten Akzeptorkonzentration von  $N_{A,\text{Ge}}$  erkennbar. Die Akzeptorkonzentration  $N_{A,\text{Ge}}$  liegt im Vergleich der Proben in einem Bereich von  $8 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3} \leq N_{A,\text{Ge}} \leq 1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .

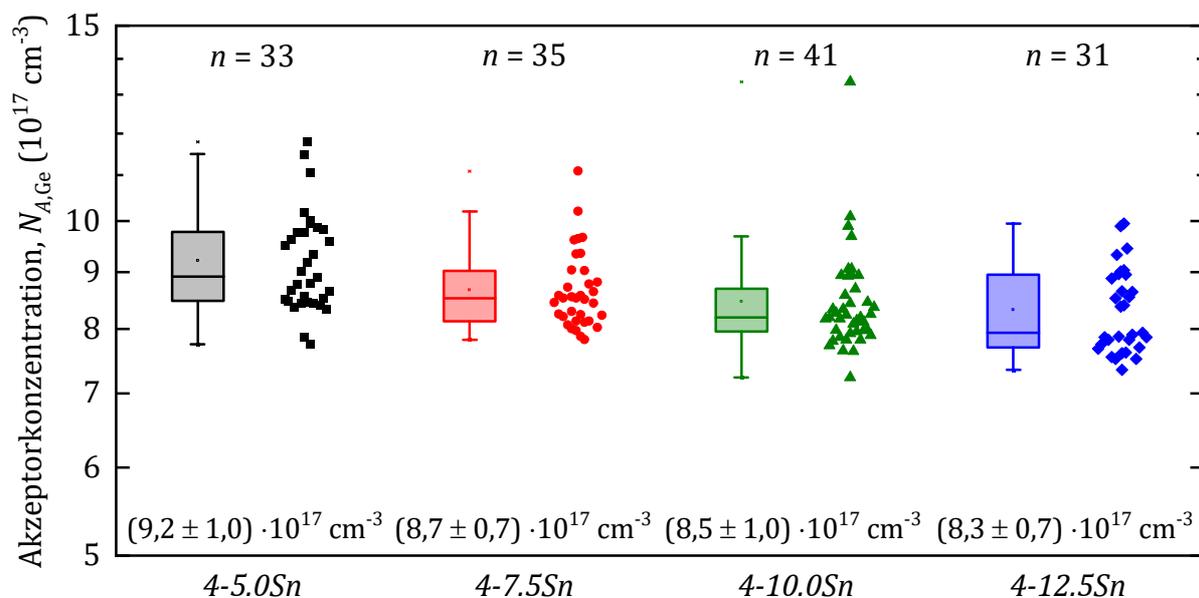


Abb. 7-27: Box-Whisker-Darstellung der extrahierten Akzeptorkonzentration  $N_{A,\text{Ge}}$  der Probenserie 4.

7.6. Berechnung des Leitungs- und Valenzbandversatzes  $\Delta E_L$  und  $\Delta E_V$ 

Die Berechnung der Leitungs- und Valenzbandversätze  $\Delta E_L$  und  $\Delta E_V$  aus der Built-In-Spannung  $U_{bi}$  einer pn-Heterostruktur basiert auf der Idee von Herbert Krömer [12]. Das Verfahren würde auch schon zur Analyse anderer Halbleitersysteme verwendet [74].

Zu Beginn der Auswertung wird nächst das zu erwartende Banddiagramm der Heterostruktur der Probenreihe 4 in Abb. 7-28 betrachtet. Es wird dabei ein Heteroübergang vom Typ I angenommen.

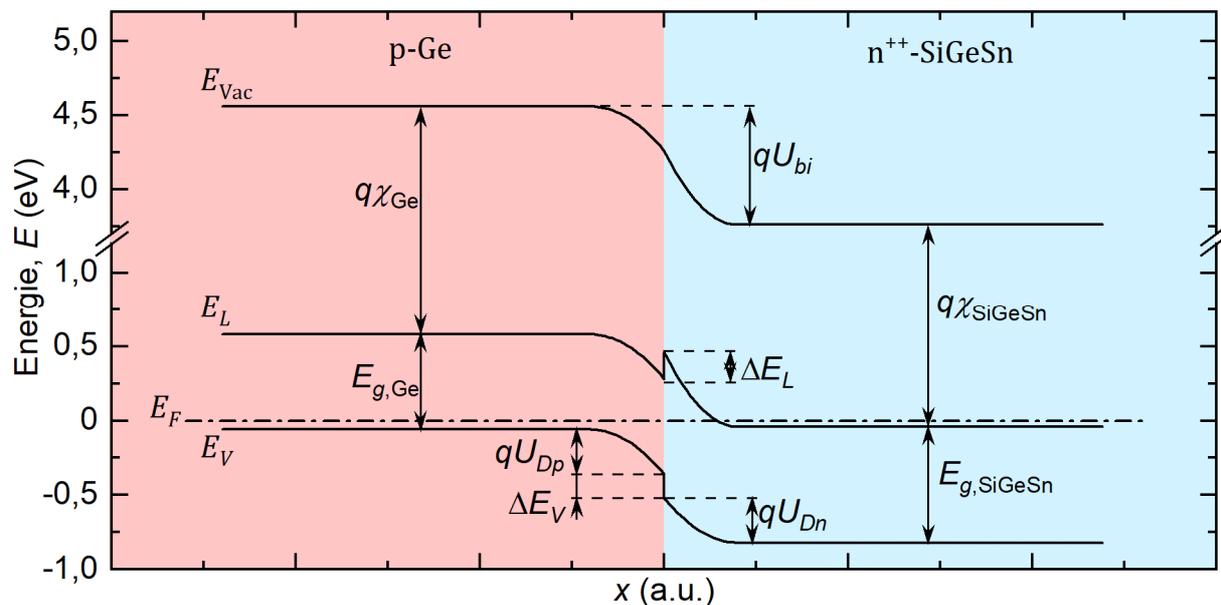


Abb. 7-28: Zu erwartendes Banddiagramm der Heterostruktur der Probenreihe 4. Annahme: Heteroübergang Typ I.

Aufgrund der hohen Donatorkonzentration in der n-typ dotierten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht  $N_{D,\text{SiGeSn}}$  wird angenommen, dass das Fermi-Niveau hier bereits oberhalb der Leitungsbandkante  $E_L$  liegt. Die Built-In-Spannung  $U_{bi}$  berechnet sich dabei nach H. Krömer nach Gleichung (7-4) (Gleichung (3) in [12, S. 562]). Darin enthalten sind die Diffusionspotentiale im p- und n-Gebiet  $U_{Dp}$  und  $U_{Dn}$  und einem zusätzlichen Korrekturfaktor [12].

$$U_{bi} = U_{Dp} + U_{Dn} + \frac{2k_B T}{q} \quad (7-4)$$

Die Berechnung der Diffusionsspannungen im p- und n-Gebiet  $U_{Dp}$  und  $U_{Dn}$  folgt dabei aus der Lösung der Poisson-Gleichung im p- und n-Gebiet [2, S. 82]. Die resultierenden Beziehungen sind in den Gleichungen (7-5) und (7-6) angegeben.

$$U_{Dp} = q \frac{N_{A,Ge} \cdot x_{p,Ge}^2}{\epsilon_{Ge} \cdot 2} \quad (7-5)$$

$$U_{Dn} = q \frac{N_{D,SiGeSn} \cdot x_{n,SiGeSn}^2}{\epsilon_{SiGeSn} \cdot 2} \quad (7-6)$$

Für die Berechnung wird ebenfalls die relative Permittivität  $\epsilon_{SiGeSn}$ , welche in Abschnitt 2.6.2 bestimmt wurde, verwendet. Die Berechnung der Diffusionsspannungen im p- und n-Gebiet  $U_{Dp}$  und  $U_{Dn}$  erfordert außerdem die Kenntnis der Raumladungszonenweiten  $x_{p,Ge}$  und  $x_{n,SiGeSn}$  in den jeweiligen Gebieten. Um diese berechnen zu können wird zunächst der Quotient  $U_{Dp}/U_{Dn}$ , wie in Gleichung (7-7) dargestellt, gebildet.

$$\frac{U_{Dp}}{U_{Dn}} = \frac{q \frac{N_{A,Ge} \cdot x_{p,Ge}^2}{\epsilon_{Ge} \cdot 2}}{q \frac{N_{D,SiGeSn} \cdot x_{n,SiGeSn}^2}{\epsilon_{SiGeSn} \cdot 2}} = \frac{N_{D,SiGeSn} \cdot \epsilon_{SiGeSn}}{N_{A,Ge} \cdot \epsilon_{Ge}} \quad (7-7)$$

mit

$$x_{n,SiGeSn} = \frac{N_{A,Ge}}{N_{D,SiGeSn}} \cdot x_{p,Ge}$$

Durch Einsetzen und Vereinfachung von Gleichung (7-7) in die Gleichungen (7-5) und (7-6) und unter Verwendung von Gleichung (2-8) ergeben sich daraufhin die in den Gleichungen (7-8) und (7-9) dargestellten Beziehungen zur Berechnung der Diffusionsspannungen im p- und n-Gebiet  $U_{Dp}$  und  $U_{Dn}$ . Hierbei sind alle nötigen Material- und Schichtparameter bekannt.

$$U_{Dn} = q \frac{U_{bi} - 2 \frac{k_B T}{q}}{1 + \frac{N_{D,SiGeSn} \cdot \epsilon_{SiGeSn}}{N_{A,Ge} \cdot \epsilon_{Ge}}} \quad (7-8)$$

$$U_{Dp} = U_{bi} - U_{Dn} - 2 \frac{k_B T}{q} \quad (7-9)$$

Im nächsten Schritt folgen aus den Zusammenhängen des Banddiagramms in Abb. 7-28 die in den Gleichungen (7-10) und (7-11) dargestellten Beziehungen zur Berechnung des Leitungs- und Valenzbandversatzes  $\Delta E_L$  und  $\Delta E_V$  der dargestellten Heterostruktur.

$$\Delta E_V = E_{g,\text{SiGeSn}} - qU_{Dp} - qU_{Dn} - \Delta E_{FV,\text{Ge}} - \Delta E_{LF,\text{SiGeSn}} \quad (7-10)$$

$$\Delta E_L = E_{g,\text{SiGeSn}} - E_{g,\text{Ge}} - \Delta E_V \quad (7-11)$$

In Gleichung (7-11) wird zunächst die Bandlücke von Ge  $E_{g,\text{Ge}} = 0,66 \text{ eV}$  [2, S. 789] benötigt. Die Berechnung des Valenzbandversatzes nach Gleichung (7-10) erfordert außerdem die Kenntnis der Lage des Fermi-niveaus in der Ge-Schicht  $\Delta E_{FV,\text{Ge}}$  und der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht  $\Delta E_{LF,\text{SiGeSn}}$ . Aufgrund der hohen Dotierstoffkonzentrationen in den beiden Gebieten verliert hierbei die Boltzmann-Näherung bereits ihre Gültigkeit. Daher erfolgt die Berechnung der Lage des Fermi-niveaus  $\Delta E_{FV,\text{Ge}}$  und  $\Delta E_{LF,\text{SiGeSn}}$ , wie bereits in Abschnitt 7.3, mithilfe der Gleichungen (7-12) und (7-13) nach Sze (Gleichung 26a und 26b in [2]).

$$\Delta E_{FV,\text{Ge}} = E_F - E_V = -k_B T \left[ \ln \left( \frac{N_{A,\text{Ge}}}{N_{V,\text{Ge}}} \right) + 2^{-3/2} \left( \frac{N_{A,\text{Ge}}}{N_{V,\text{Ge}}} \right) \right] \quad (7-12)$$

$$\Delta E_{LF,\text{SiGeSn}} = E_L - E_F = -k_B T \left[ \ln \left( \frac{N_{D,\text{SiGeSn}}}{N_{L,\text{SiGeSn}}} \right) + 2^{-3/2} \left( \frac{N_{D,\text{SiGeSn}}}{N_{L,\text{SiGeSn}}} \right) \right] \quad (7-13)$$

Auf diese Weise wurden die Leitungs- und Valenzbandversätze  $\Delta E_L$  und  $\Delta E_V$  in Abhängigkeit der Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Schicht berechnet. Die Ergebnisse sind in Tab. 7-3 dargestellt.

$c_{\text{Si}}$ (%)	$c_{\text{Ge}}$ (%)	$c_{\text{Sn}}$ (%)	$\Delta E_L$ (eV)	$\Delta E_V$ (eV)
18,4	76,7	5,0	-0,316	0,354
27,5	65,0	7,5	-0,292	0,439

36,7	53,3	10,0	-0,350	0,204
------	------	------	--------	-------

Tab. 7-3: Leitungs- und Valenzbandversätze  $\Delta E_L$  und  $\Delta E_V$  der in Abb. 7-28 dargestellten Heterostruktur.

Auffallend hierbei ist der durchgehend negative Leitungsbandversatz  $\Delta E_L$ . Dies weist daraufhin, dass die ursprüngliche Annahme eines Heteroübergangs Typ I falsch ist. Stattdessen bildet sich ein Heteroübergang Typ II. Auf Basis der Ergebnisse wurde daher jeweils ein detailgetreues Banddiagramm der Proben 4-5.0Sn, 4-7.5Sn und 4-10.0Sn erstellt. Diese sind in Abb. 7-29, Abb. 7-30 und Abb. 7-31 dargestellt.

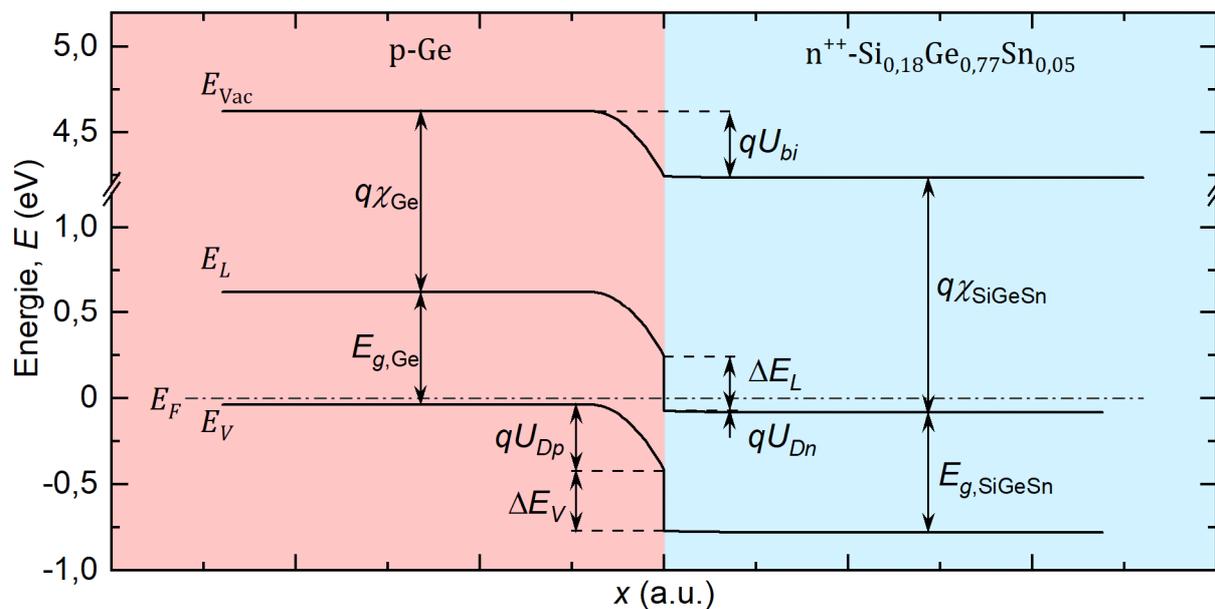


Abb. 7-29: Detailliertes Banddiagramm der Heterostruktur der Probe 4-5.0Sn.

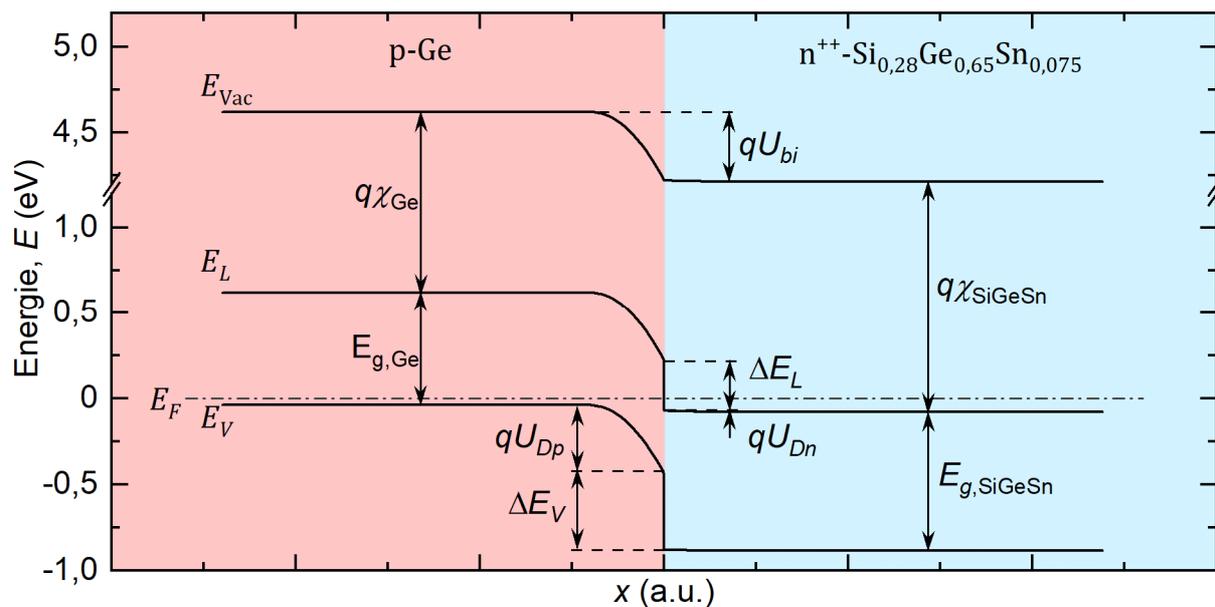


Abb. 7-30: Detailliertes Banddiagramm der Heterostruktur der Probe 4-7.5Sn.

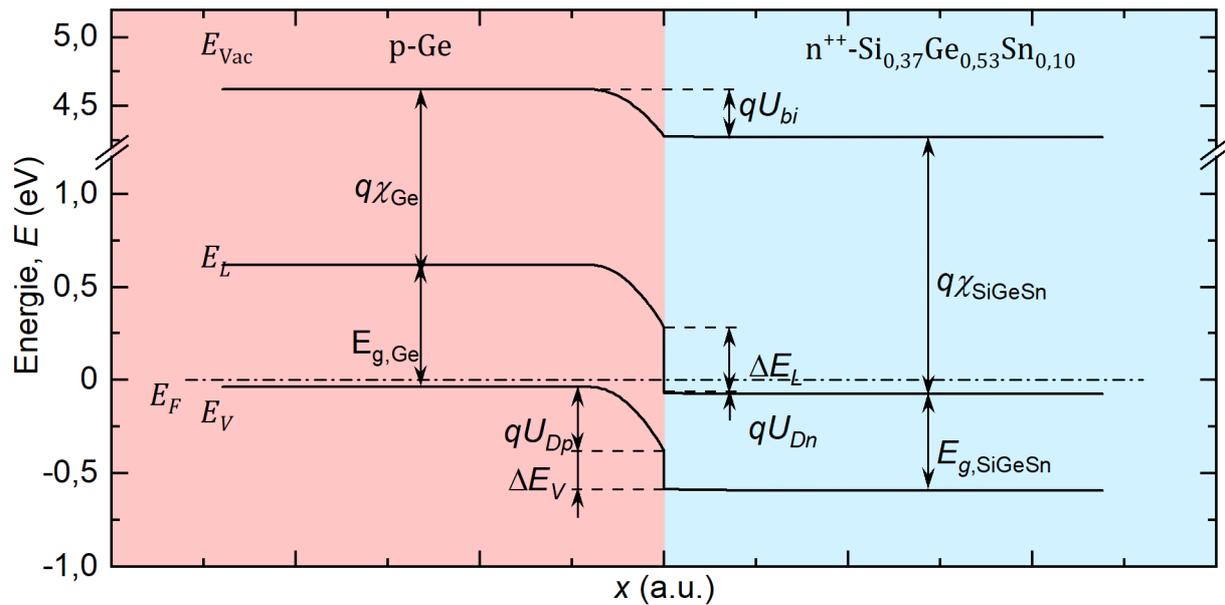


Abb. 7-31: Detailliertes Banddiagramm der Heterostruktur der Probe 4-10.0Sn.

Darüber hinaus erlaubt das korrigierte Banddiagramm die Bestimmung der Elektronenaffinität  $q\chi_{\text{SiGeSn}}$  in Abhängigkeit der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Zusammensetzung. In die Berechnung fließt die Elektronenaffinität von Ge mit einem Wert von  $\chi_{\text{Ge}} = 4,0 \text{ eV}$  [3, S. 152] ein. Die Ergebnisse sind in Tab. 7-4 dargestellt.

$c_{\text{Si}}$ (%)	$c_{\text{Ge}}$ (%)	$c_{\text{Sn}}$ (%)	$q\chi_{\text{SiGeSn}}$ (eV)
18,4	76,7	5,0	4,316
27,5	65,0	7,5	4,292
36,7	53,3	10,0	4,350

 Tab. 7-4: Elektronenaffinität  $q\chi_{\text{SiGeSn}}$  in Abhängigkeit der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Zusammensetzung.

7.7. Ermittelte Materialparameter von auf Ge gitterangepasstem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ 

In dieser Arbeit wurden mehrere Materialparameter von auf Ge gitterangepasstem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  sowohl experimentell als auch über theoretische Abschätzungen bestimmt. Die experimentell bestimmten Materialparameter, die indirekte Bandlücke  $E_{g,\text{SiGeSn}}^L$ , die Leitungs- und Valenzbandversätze  $\Delta E_L$  und  $\Delta E_V$  und die Elektronenaffinität  $q\chi_{\text{SiGeSn}}$  sind in Abhängigkeit der Zusammensetzung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Legierung abschließend in Tab. 7-5 zusammenfassend dargestellt. Aus Gründen der Übersichtlichkeit ist dabei nur die Sn-Konzentration  $c_{\text{Sn}}$  dargestellt.

$c_{\text{Sn}}$ (%)	$E_{g,\text{SiGeSn}}^L$ (eV)	$\Delta E_L$ (eV)	$\Delta E_V$ (eV)	$q\chi_{\text{SiGeSn}}$ (eV)
5,0	0,697	-0,316	0,354	4,316
7,5	0,807	-0,292	0,439	4,292
10,0	0,514	-0,350	0,204	4,350

Tab. 7-5: Die indirekte Bandlücke  $E_{g,\text{SiGeSn}}^L$ , die Leitungs- und Valenzbandversätze  $\Delta E_L$  und  $\Delta E_V$  und die Elektronenaffinität  $q\chi_{\text{SiGeSn}}$  in Abhängigkeit der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Zusammensetzung.

Die zusätzlich im Rahmen von Abschnitt 2.6 mittels erster Abschätzungen bestimmten Materialparameter, die relative Permittivität  $\epsilon_{r,\text{SiGeSn}}$ , die effektiven Massen im Leitungs- und Valenzband  $m_{L,\text{SiGeSn}}$  und  $m_{V,\text{SiGeSn}}$  und die effektiven Zustandsdichten im Leitungs- und Valenzband  $N_{L,\text{SiGeSn}}$  und  $N_{V,\text{SiGeSn}}$  sind ebenfalls abschließend nochmals in Tab. 7-6 zusammengefasst.

$c_{\text{Sn}}$ (%)	$\epsilon_r$	$m_{L,\text{SiGeSn}}$	$m_{V,\text{SiGeSn}}$	$N_{L,\text{SiGeSn}}$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$N_{V,\text{SiGeSn}}$ ( $\text{cm}^{-3}$ )
5,0	15,47	0,229	0,335	$1,10 \cdot 10^{19}$	$4,88 \cdot 10^{18}$
7,5	15,35	0,236	0,361	$1,15 \cdot 10^{19}$	$5,44 \cdot 10^{18}$
10,0	15,10	0,240	0,380	$1,18 \cdot 10^{19}$	$5,88 \cdot 10^{18}$

Tab. 7-6: Die relative Permittivität  $\epsilon_{r,\text{SiGeSn}}$ , die effektiven Massen im Leitungs- und Valenzband  $m_{L,\text{SiGeSn}}$  und  $m_{V,\text{SiGeSn}}$  und die effektiven Zustandsdichten im Leitungs- und Valenzband  $N_{L,\text{SiGeSn}}$  und  $N_{V,\text{SiGeSn}}$  in Abhängigkeit der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Zusammensetzung

## 8. Zusammenfassung und Ausblick

*In diesem Kapitel werden die eingangs formulierten Ziele der Arbeit nochmals rekapituliert und die erreichten Ergebnisse abschließend zusammengefasst.*

*Ein finaler Ausblick der Arbeit dient zur Anregung für künftige Forschungsarbeiten im Rahmen der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxie. Ein besonderer Augenmerk liegt dabei auf möglichen Strategien zur künftigen Funktionalisierung von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  für die eingangs motivierten möglichen Anwendungen.*

### 8.1. Fazit der erreichten Ziele

Die vorliegende Arbeit hatte das primäre Ziel die MBE von unverspanntem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  auf Ge-VS zu optimieren um somit die Herstellung von auf Ge gitterangepassten Heterostrukturen zu ermöglichen. Dabei wurden zunächst die Kernprobleme der MBE von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Legierungen identifiziert. Der stark temperaturabhängige Effekt der Sn-Segregation beeinflusst die Kristallqualität nachteilig und erfordert daher die MBE in einem sehr niedrigen Substrattemperaturregime von  $T_S < 250$  °C. Die Einhaltung derart niedriger Substrattemperaturen wird dabei zusätzlich durch die Dynamik des verwendeten MBE-Systems und die Heizwirkung der Molekularstrahlquellen erschwert. Dieses Problem konnte nur durch den Einsatz von Infrarot-Pyrometrie gelöst werden, welche die Beobachtung der dynamischen Effekte auf der Substratoberfläche und gleichzeitig die Entwicklung neuer Strategien zur Regelung der Substrattemperatur erlaubt.

Unter Verwendung der neu entwickelten Strategie zur Regelung der Substrattemperatur wurde anschließend die MBE von unverspanntem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  auf Ge-VS in einem Sn-Konzentrationsbereich von  $2,5\% \leq c_{\text{Sn}} \leq 15,0\%$  optimiert. Hierzu wurde die Substrattemperatur im Rahmen einer umfangreichen Probenserie für jede Sn-Konzentration im Bereich  $T_S = \{160, 200, 250, 300\}$  °C variiert. Die resultierende, optimale Substrattemperatur für die MBE von unverspanntem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  auf Ge-VS liegt dabei bei  $T_S < 200$  °C.

Der zweite Schwerpunkt der Arbeit lag auf der Materialcharakterisierung von auf Ge gitterangepasstem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ . Hierzu wurden, unter Verwendung des optimierten

Epitaxieprozesses, sowohl  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Homodiodenstrukturen als auch  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Heterodiodenstrukturen mit Sn-Konzentrationen von  $5,0\% \leq c_{\text{Sn}} \leq 15,0\%$  hergestellt und mithilfe der am IHT verfügbaren Reinraumtechnologie zu diskreten Dioden weiterverarbeitet.

Die Dioden wurden anschließend einer umfassenden elektrischen Charakterisierung unterzogen, deren Ergebnisse zunächst zur Bewertung der Kristallqualität der hergestellten Diodenstrukturen und somit des Epitaxieprozesses dienen. Die Ergebnisse der darauffolgenden C(U)-Charakterisierung wurden zur Bestimmung der indirekten Bandlücke  $E_{g,\text{SiGeSn}}^L$  und der Leitungs- und Valenzbandversätze  $\Delta E_L$  und  $\Delta E_V$  verwendet. Es handelt sich dabei um wichtige Materialparameter für die künftige Konzeptionierung von auf Ge gitterangepassten  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Heterostrukturen. Als finales Ergebnis zeigt die nachfolgende Abb. 8-1 nochmals das resultierende Banddiagramm einer Ge- $\text{Si}_{0,37}\text{Ge}_{0,53}\text{Sn}_{0,10}$ -Heterostruktur, welches auf Daten der in dieser Arbeit gewonnenen Ergebnisse berechnet wurde.

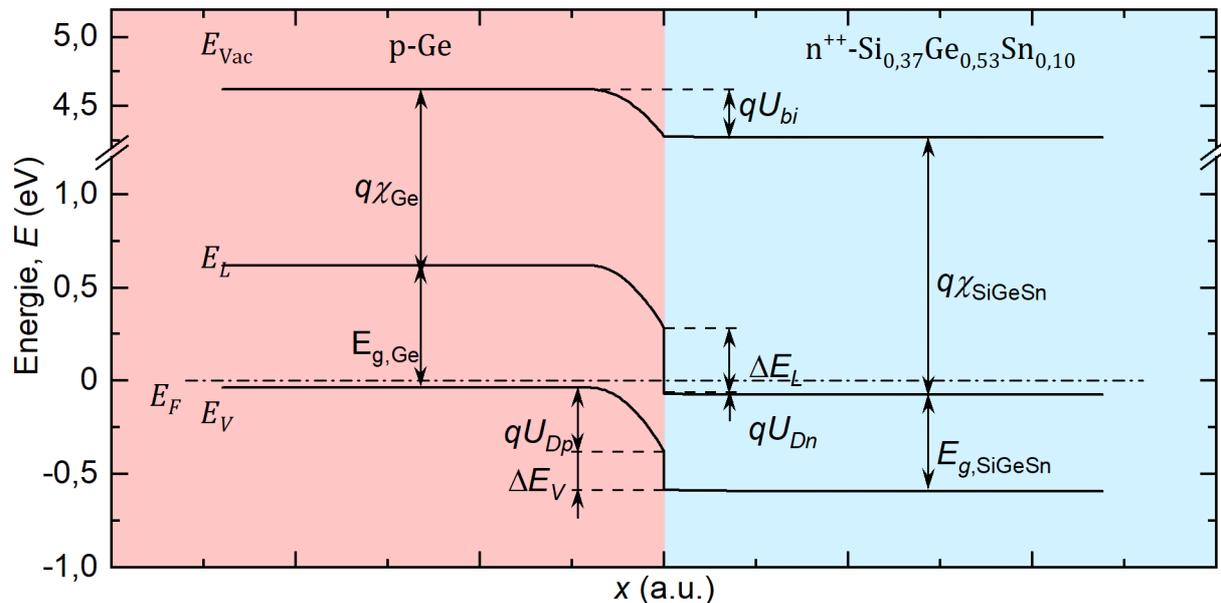


Abb. 8-1: Banddiagramm einer Ge- $\text{Si}_{0,37}\text{Ge}_{0,53}\text{Sn}_{0,10}$ -Heterostruktur

## 8.2. Ausblick auf die künftige Funktionalisierung von $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$

Die vorliegende Arbeit ist, gegeben durch die verfügbare Ge-VS-Technologie, bewusst auf die Epitaxie von auf Ge gitterangepasstem  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  limitiert. Es wurde allerdings bereits mehrfach gezeigt, dass dieser Konzentrationsbereich ebenfalls nicht das mögliche direkte Halbleiterverhalten von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  adressiert. Zur Verdeutlichung zeigt die folgende Abb. 8-2 nochmals die erwartete Bandlücke  $E_{g,\text{SiGeSn}}$  von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ .

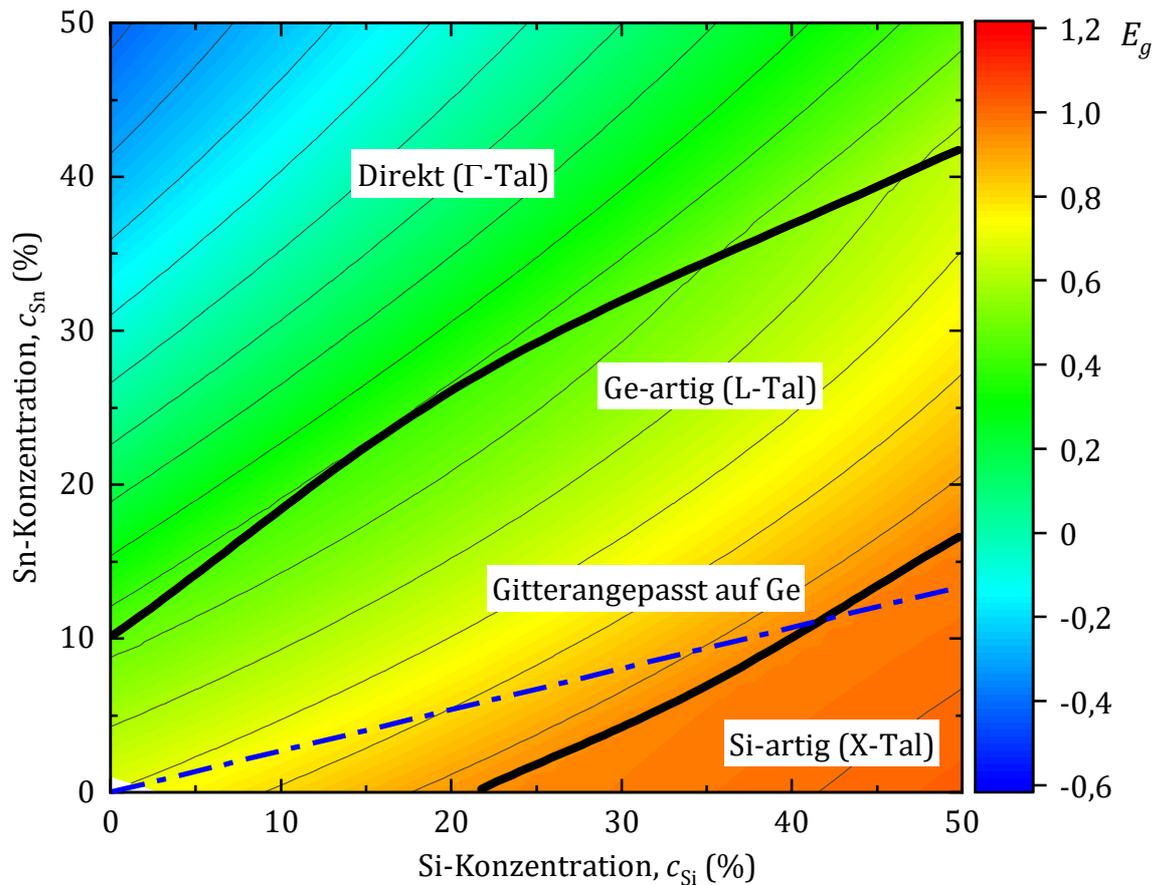


Abb. 8-2: Berechnete Bandlücke von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ , basierend auf Simulationen von Moontragoon, Soref und Ikonik vgl. [22] (Eigene Darstellung, Daten entnommen aus [22])

Ein möglicher künftiger Forschungsansatz stellt daher die Entwicklung von virtuellen  $\text{Ge}_{1-z}\text{Sn}_z$ -Substraten dar. Dies würde die Adressierung des vollen Zusammensetzungsbereiches von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  und somit potenzielle Anwendungen im Bereich der Si-Photonik erschließen.

Für die Funktionalisierung von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  im Rahmen komplexer Bauteilstrukturen ist es außerdem unabdingbar die beobachtete Hintergrunddotierung von  $10^{17} \text{ cm}^{-3} \leq$

$N_{A,i-\text{SiGeSn}} \leq 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  deutlich zu reduzieren. Eine Möglichkeit hierfür ist die Durchführung der  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Epitaxie in  $\text{H}_2$ -Atmosphäre. Für die Reduktion der Hintergrunddotierung von  $\text{Ge}_{1-z}\text{Sn}_z$  wurde diese Methode bereits von Asano et al. erfolgreich angewandt vgl. [75]. Hierfür ist allerdings eine umfangreiche Erweiterung des A-MBE-Systems notwendig.

Zur weiteren Optimierung der Reproduzierbarkeit der Gitteranpassung sind darüber hinaus alternative Verfahren zur Messung und Regelung der Molekularstrahlflüsse in Betracht zu ziehen. Ein besonderes Augenmerk liegt dabei auf der Messung und Regelung des Si-Flusses. Eine mögliche Alternative bietet hier die Ratenmessung mittels Quarzsensoren. Da ein Quarzsensoren stets sämtliche auftreffende Atome in die Messung einbezieht kann hiermit das Messsignal des Si-Flusses im Vergleich zur Messung mittels QMS deutlich erhöht werden. Eine Herausforderung hierbei ist jedoch die optimale Einbaulage des Quarzsensors. Einerseits muss der Quarzsensoren direkt in den Si-Molekularstrahl des ESVs blicken, andererseits jedoch eine Messung der anderen Molekularstrahlflüsse vermieden werden.

Eine letzte Möglichkeit künftiger  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Forschungen ist die Fortsetzung der im Rahmen dieser Arbeit begonnenen, umfangreichen Materialcharakterisierung zur experimentellen Bestimmung der Materialeigenschaften. In der vorliegenden Arbeit mussten einige Parameter zunächst mithilfe erster theoretischer Abschätzungen bestimmt werden, um die Bestimmung der indirekten Bandlücke  $E_{g,\text{SiGeSn}}^L$  und der Leitungs- und Valenzbandversätze  $\Delta E_L$  und  $\Delta E_V$  auf Basis der gewonnenen Ergebnisse überhaupt zu ermöglichen. An dieser Stelle gilt es die Arbeit fortzusetzen und die noch fehlenden Materialparameter anhand experimenteller Daten zu bestimmen. Nur auf diese Weise wird es möglich sein die Funktionalisierung von  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -Heterostrukturen weiter voranzutreiben.

## Anhang

## A. Maskensatz

In dieser Arbeit wurde der nachfolgend in Abb. A-1 dargestellte Maskensatz *SiGePIN2009* verwendet. Der Maskensatz ist dabei in einzelne Chipfelder unterteilt. Neben einigen, nicht verwendeten, Feldern sind mittig die Hauptfelder (in Abb. A-1 rot umrahmt) angeordnet. Es handelt sich dabei um 16 Chipfelder, welche alle den gleichen Aufbau aufweisen. Die Hauptfelder sind dabei in Zeilen von *A* bis *D* und Spalten von *1* bis *4* durchnummeriert.

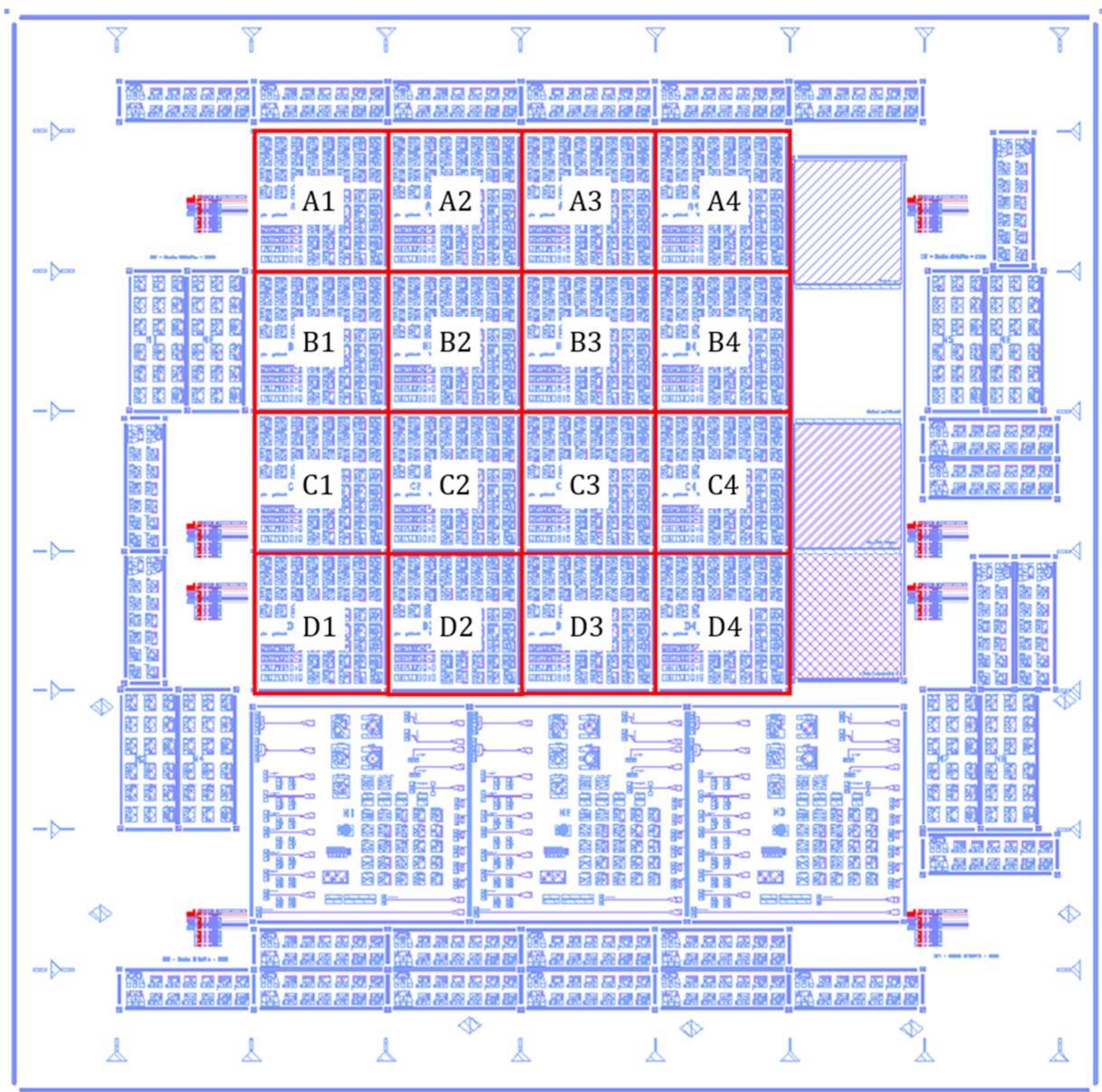


Abb. A-1: Gesamtübersicht des verwendeten Maskensatzes *SiGePIN2009*

## A. Maskensatz

Eine Detailansicht eines Hauptfeld ist exemplarisch für das Feld A1 in Abb. A-2 dargestellt. Ein Hauptfeld enthält dabei, wie in Abb. A-2 markiert, mehrere verschiedene Strukturen mit kreisförmiger Mesa.

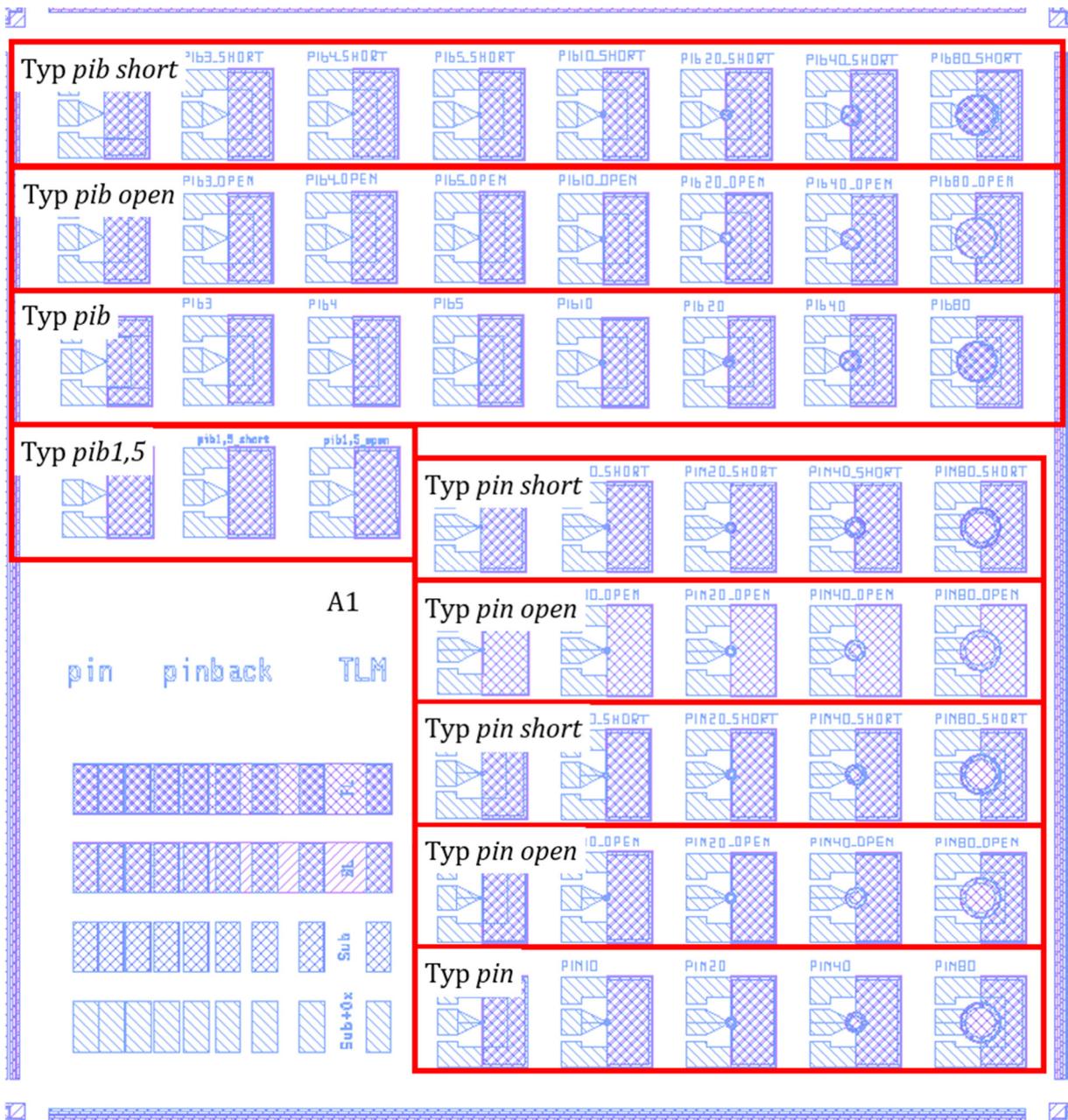


Abb. A-2: Gesamtübersicht des verwendeten Maskensatzes SiGePIN2009

Der Maskensatz zur Herstellung der Strukturen mit kreisförmiger Mesa unterteilt sich dabei in drei Ebenen: *Mesa* zur Strukturierung der eigentlichen Mesa, *Oxidfenster* zur Definition von Kontaktöffnungen im Passivierungsoxid und *Metallisierung* zur

Strukturierung der Kontaktflächen. Abb. A-3 zeigt die drei Ebenen nebeneinander und zusätzlich die Überlagerung der Ebenen.

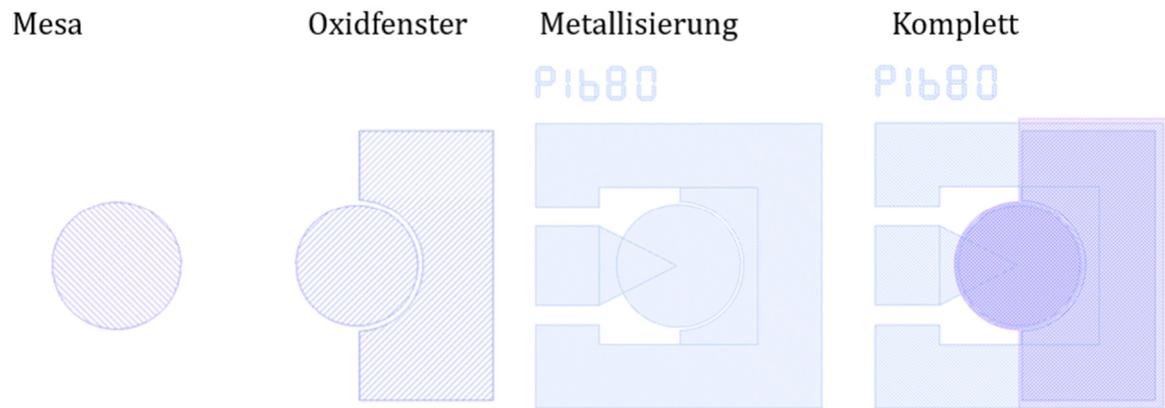


Abb. A-3: Übersicht der einzelnen Maskenebenen des verwendeten Maskensatzes *SiGePIN2009*

Außerdem wird unterschieden zwischen Strukturen des Typs *pib* und des Typs *pin*. Strukturen des Typs *pib* weisen dabei einen vollflächigen Metallkontakt zur oberen Kontaktschicht auf. Strukturen des Typs *pin* weisen hingegen einen ringförmigen Metallkontakt zur oberen Kontaktschicht auf. Dadurch entsteht in der Mitte der Kontaktfläche ein optisches Fenster. An dieser Stelle ist es möglich die prozessierten Strukturen mittels optischer Verfahren zu charakterisieren. Verdeutlicht wird der Unterschied durch den Vergleich der Oxidfensterebenen in Abb. A-4.

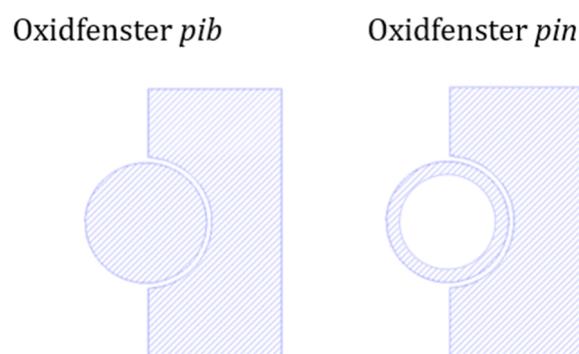


Abb. A-4: Vergleich der Strukturen des Typs *pib* und des Typs *pin*

Darüber hinaus enthält der Maskensatz noch Strukturen des Typs *open* und des Typs *short*. Bei Strukturen des Typs *open* ist dabei keine Öffnung im Passivierungsoxid für den Metallkontakt der oberen Kontaktschicht enthalten. Die Struktur dient dabei zur Bestimmung der Kapazität des Metallkontakts im Rahmen der C(U)-Charakterisierung. Der Unterschied wird auch hier deutlich im Vergleich der Oxidfensterebenen in Abb. A-5.

Oxidfenster *pib*



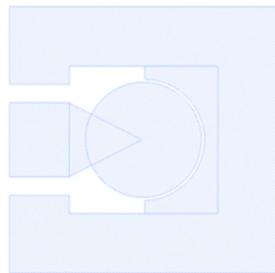
Oxidfenster *pib\_open*



Abb. A-5: Vergleich der Strukturen des Typs *pib* und des Typs *pib\_open*

Bei Strukturen des Typs *short* sind hingegen die beiden Kontaktflächen durch einen Steg verbunden. Der Vergleich in Abb. A-6 verdeutlicht den Unterschied. Hier ist der Kontakt rot markiert. Die Struktur wird für Hochfrequenzmessungen benötigt und in dieser Arbeit nicht verwendet.

Metallisierung *pib*



Metallisierung *pib\_short*

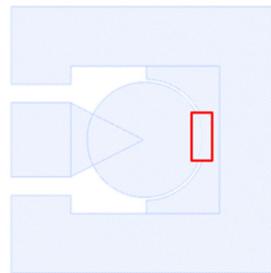


Abb. A-6: Vergleich der Strukturen des Typs *pib* und des Typs *pib\_short*

Zusätzlich enthält der Maskensatz noch Strukturen für Transferlängenmessungen (TLM). Sie sind im linken unteren Rand von Abb. A-2 zu erkennen.

## B. Proben- und Prozessübersicht

Im Folgenden erfolgt eine Zuordnung der in dieser Arbeit eingeführten Probenbezeichnungen zu den am IHT verwendeten Probenidentifikationsnummern (Proben-ID). Dabei werden die einzelnen Probenserien gruppiert.

Probenbezeichnung	Proben-ID
<i>1.0-GeSn-8.0Sn-1</i>	A4920
<i>1.0-GeSn-8.0Sn-2</i>	A4921
<i>1.1-5.0Sn</i>	A4224
<i>1.2-7.5Sn</i>	A4534
<i>1.1-10.0Sn</i>	A4226
<i>1.2-10.0Sn</i>	A4536
<i>1.2-12.5Sn</i>	A4538
<i>1.1-15.0Sn</i>	A4228
<i>1.2-15.0Sn</i>	A4540

Tab. B-1: Proben-ID-Zuordnung Probenserie 1

Probenbezeichnung	Proben-ID
<i>2-2.5Sn-150C</i>	A4980
<i>2-2.5Sn-170C</i>	A4981
<i>2-2.5Sn-250C</i>	A4982
<i>2-2.5Sn-300C</i>	A4983
<i>2-5.0Sn-160C</i>	A4986
<i>2-5.0Sn-200C</i>	A4988
<i>2-5.0Sn-250C</i>	A4987
<i>2-5.0Sn-300C</i>	A4989
<i>2-7.5Sn-160C</i>	A4990
<i>2-7.5Sn-200C</i>	A4991

## B. Proben- und Prozessübersicht

<i>2-7.5Sn-250C</i>	A4992
<i>2-7.5Sn-300C</i>	A4993
<i>2-10.0Sn-160C</i>	A4994
<i>2-10.0Sn-200C</i>	A4999
<i>2-10.0Sn-250C</i>	A4996
<i>2-10.0Sn-300C</i>	A5000
<i>2-12.5Sn-160C</i>	A5001
<i>2-12.5Sn-200C</i>	A5002
<i>2-12.5Sn-250C</i>	A5003
<i>2-12.5Sn-300C</i>	A5004
<i>2-15.0Sn-160C</i>	A5005
<i>2-15.0Sn-200C</i>	A5006
<i>2-15.0Sn-250C</i>	A5008
<i>2-15.0Sn-300C</i>	A5009
<i>2-0.0Sn-GeRef</i>	A4997

Tab. B-2: Proben-ID-Zuordnung Probenserie 2

Probenbezeichnung	Proben-ID
<i>3-5.0Sn-200C</i>	A5095
<i>3-7.5Sn-200C</i>	A5098
<i>3-10.0Sn-200C</i>	A5100
<i>3-12.5Sn-200C</i>	A5102
<i>3-12.5Sn-180C</i>	A5122
<i>3-12.5Sn-160C</i>	A5123
<i>3-15.0Sn-160C</i>	A5126
<i>3-0.0Sn-GeRef</i>	A5093

Tab. B-3: Proben-ID-Zuordnung Probenserie 3

Probenbezeichnung	Proben-ID
<i>4-5.0Sn</i>	A4895
<i>4-7.5Sn</i>	A4891
<i>4-10.0Sn</i>	A4892
<i>4-12.5Sn</i>	A4893
<i>4-15.0Sn</i>	A4894

Tab. B-4: Proben-ID-Zuordnung Probenserie 4

Zusätzlich erfolgt eine Zuordnung der Prozessbezeichnungen zu den Prozessidentifikationsnummern (Prozess-ID) des IHT.

Prozess	Prozess-ID
<i>P1-SiGeSn-Homopin</i>	431-1
<i>P2-SiGeSn-Heteropin</i>	348-2

Tab. B-4: Prozess-ID-Zuordnung zu den Prozessbezeichnungen

Anhand der hier erfolgten Zuordnung können bei Bedarf weitere Daten und Ergebnisse über das Archiv des IHT abgerufen werden.



---

**Literaturverzeichnis**

- [1] P. A. Tipler und D. Gerlich, *Physik*, Neuaufl. Heidelberg: Spektrum Akad. Verl, 2004.
- [2] S. M. Sze und K. K. Ng, *Physics of semiconductor devices*, 3rd ed. Hoboken, N.J: Wiley-Interscience, 2007.
- [3] M. E. Levinshtein, S. L. Rumyantsev, und M. Shur, Hrsg., *Properties of advanced semiconductor materials: GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe*. New York: Wiley, 2001.
- [4] G. Dresselhaus, A. F. Kip, und C. Kittel, „Cyclotron Resonance of Electrons and Holes in Silicon and Germanium Crystals“, *Phys. Rev.*, Bd. 98, Nr. 2, S. 368–384, Apr. 1955, doi: 10.1103/PhysRev.98.368.
- [5] B. L. Booth und A. W. Ewald, „Nonparabolicity of the Gray-Tin  $\Gamma_8^+$  Conduction Band“, *Phys. Rev.*, Bd. 168, Nr. 3, S. 796–804, Apr. 1968, doi: 10.1103/PhysRev.168.796.
- [6] H. D. Barber, „Effective mass and intrinsic concentration in silicon“, *Solid-State Electron.*, Bd. 10, Nr. 11, S. 1039–1051, Nov. 1967, doi: 10.1016/0038-1101(67)90122-0.
- [7] S. H. Groves, C. R. Pidgeon, A. W. Ewald, und R. J. Wagner, „Interband magneto-reflection of  $\alpha$ -Sn“, *J. Phys. Chem. Solids*, Bd. 31, Nr. 9, S. 2031–2049, Sep. 1970, doi: 10.1016/0022-3697(70)90006-5.
- [8] W. C. Dunlap und R. L. Watters, „Direct Measurement of the Dielectric Constants of Silicon and Germanium“, *Phys. Rev.*, Bd. 92, Nr. 6, S. 1396–1397, Dez. 1953, doi: 10.1103/PhysRev.92.1396.
- [9] R. E. Lindquist und A. W. Ewald, „Optical Constants of Single-Crystal Gray Tin in the Infrared“, *Phys. Rev.*, Bd. 135, Nr. 1A, S. A191–A194, Juli 1964, doi: 10.1103/PhysRev.135.A191.
- [10] H. J. McSkimin, „Measurement of Elastic Constants at Low Temperatures by Means of Ultrasonic Waves—Data for Silicon and Germanium Single Crystals, and for Fused Silica“, *J. Appl. Phys.*, Bd. 24, Nr. 8, S. 988–997, Aug. 1953, doi: 10.1063/1.1721449.
- [11] H. Kroemer, „Theory of a Wide-Gap Emitter for Transistors“, *Proc. IRE*, Bd. 45, Nr. 11, S. 1535–1537, Nov. 1957, doi: 10.1109/JRPROC.1957.278348.
- [12] H. Kroemer, „Heterostructure devices: A device physicist looks at interfaces“, *Surf. Sci.*, Bd. 132, Nr. 1, S. 543–576, Sep. 1983, doi: 10.1016/0039-6028(83)90561-7.
- [13] V. R. D’Costa u. a., „Optical critical points of thin-film  $\text{Ge}_{1-y}\text{Sn}_y$  alloys: A comparative  $\text{Ge}_{1-y}\text{Sn}_y/\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$  study“, *Phys. Rev. B*, Bd. 73, Nr. 12, S. 125207, März 2006, doi: 10.1103/PhysRevB.73.125207.
- [14] H. Lin, R. Chen, W. Lu, Y. Huo, T. I. Kamins, und J. S. Harris, „Investigation of the direct band gaps in  $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$  alloys with strain control by photoreflectance spectroscopy“, *Appl. Phys. Lett.*, Bd. 100, Nr. 10, S. 102109, März 2012, doi: 10.1063/1.3692735.
- [15] A. A. Tonkikh u. a., „Pseudomorphic  $\text{GeSn}/\text{Ge}(001)$  quantum wells: Examining indirect band gap bowing“, *Appl. Phys. Lett.*, Bd. 103, Nr. 3, S. 032106, Juli 2013, doi: 10.1063/1.4813913.

- 
- [16] M. Oehme, K. KostECKI, M. Schmid, F. Oliveira, E. Kasper, und J. Schulze, „Epitaxial growth of strained and unstrained GeSn alloys up to 25% Sn“, *Thin Solid Films*, Bd. 557, S. 169–172, Apr. 2014, doi: 10.1016/j.tsf.2013.10.064.
- [17] J. Margetis *u. a.*, „Growth and Characterization of Epitaxial Ge<sub>1-x</sub>Sn<sub>x</sub> Alloys and Heterostructures Using a Commercial CVD System“, *ECS Trans.*, Bd. 64, Nr. 6, S. 711, Aug. 2014, doi: 10.1149/06406.0711ecst.
- [18] H. Li, C. Chang, T. P. Chen, H. H. Cheng, Z. W. Shi, und H. Chen, „Characteristics of Sn segregation in Ge/GeSn heterostructures“, *Appl. Phys. Lett.*, Bd. 105, Nr. 15, S. 151906, Okt. 2014, doi: 10.1063/1.4898583.
- [19] S. Assali, J. Nicolas, und O. Moutanabbir, „Enhanced Sn incorporation in GeSn epitaxial semiconductors via strain relaxation“, *J. Appl. Phys.*, Bd. 125, Nr. 2, S. 025304, Jan. 2019, doi: 10.1063/1.5050273.
- [20] G. Han *u. a.*, „High-mobility germanium-tin (GeSn) P-channel MOSFETs featuring metallic source/drain and sub-370 °C process modules“, in *2011 International Electron Devices Meeting*, Dez. 2011, S. 16.7.1-16.7.3. doi: 10.1109/IEDM.2011.6131569.
- [21] R. A. Soref und C. H. Perry, „Predicted band gap of the new semiconductor SiGeSn“, *J. Appl. Phys.*, Bd. 69, Nr. 1, S. 539–541, Jan. 1991, doi: 10.1063/1.347704.
- [22] P. Moontragoon, R. A. Soref, und Z. Ikonc, „The direct and indirect bandgaps of unstrained Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> and their photonic device applications“, *J. Appl. Phys.*, Bd. 112, Nr. 7, S. 073106, Okt. 2012, doi: 10.1063/1.4757414.
- [23] R. Soref und J. Lorenzo, „All-silicon active and passive guided-wave components for  $\lambda = 1.3$  and  $1.6 \mu\text{m}$ “, *IEEE J. Quantum Electron.*, Bd. 22, Nr. 6, S. 873–879, Juni 1986, doi: 10.1109/JQE.1986.1073057.
- [24] S. Wirths *u. a.*, „SiGeSn growth studies using reduced pressure chemical vapor deposition towards optoelectronic applications“, *Thin Solid Films*, Bd. 557, S. 183–187, Apr. 2014, doi: 10.1016/j.tsf.2013.10.078.
- [25] D. Stange *u. a.*, „Short-wave infrared LEDs from GeSn/SiGeSn multiple quantum wells“, *Optica*, Bd. 4, Nr. 2, S. 185, Feb. 2017, doi: 10.1364/OPTICA.4.000185.
- [26] N. von den Driesch *u. a.*, „Advanced GeSn/SiGeSn Group IV Heterostructure Lasers“, *Adv. Sci.*, Bd. 5, Nr. 6, S. 1700955, Juni 2018, doi: 10.1002/advs.201700955.
- [27] L. Kormoš *u. a.*, „Surface analysis of epitaxially grown GeSn alloys with Sn contents between 15% and 18%: Surface analysis of epitaxially grown GeSn alloys“, *Surf. Interface Anal.*, Bd. 49, Nr. 4, S. 297–302, Apr. 2017, doi: 10.1002/sia.6134.
- [28] D. Schwarz, H. S. Funk, M. Oehme, und J. Schulze, „Alloy Stability of Ge<sub>1-x</sub>Sn<sub>x</sub> with Sn Concentrations up to 17% Utilizing Low-Temperature Molecular Beam Epitaxy“, *J. Electron. Mater.*, Bd. 49, Nr. 9, S. 5154–5160, Sep. 2020, doi: 10.1007/s11664-020-08188-6.
- [29] M. Bauer *u. a.*, „Synthesis of ternary SiGeSn semiconductors on Si(100) via Sn<sub>x</sub>Ge<sub>1-x</sub> buffer layers“, *Appl. Phys. Lett.*, Bd. 83, Nr. 11, S. 2163–2165, Sep. 2003, doi: 10.1063/1.1606104.
-

- [30] P. Aella, C. Cook, J. Tolle, S. Zollner, A. V. G. Chizmeshya, und J. Kouvetakis, „Optical and structural properties of  $\text{Si}_x\text{Sn}_y\text{Ge}_{1-x-y}$  alloys“, *Appl. Phys. Lett.*, Bd. 84, Nr. 6, S. 888–890, Feb. 2004, doi: 10.1063/1.1645324.
- [31] V. R. D’Costa, Y.-Y. Fang, J. Tolle, J. Kouvetakis, und J. Menéndez, „Ternary GeSiSn alloys: New opportunities for strain and band gap engineering using group-IV semiconductors“, *Thin Solid Films*, Bd. 518, Nr. 9, S. 2531–2537, Feb. 2010, doi: 10.1016/j.tsf.2009.09.149.
- [32] R. T. Beeler, D. J. Smith, J. Kouvetakis, und J. Menéndez, „GeSiSn Photodiodes With 1 eV Optical Gaps Grown on Si(100) and Ge(100) Platforms“, *IEEE J. Photovolt.*, Bd. 2, Nr. 4, S. 434–440, Okt. 2012, doi: 10.1109/JPHOTOV.2012.2206568.
- [33] C. Xu u. a., „Synthesis and optical properties of Sn-rich  $\text{Ge}_{1-x-y}\text{Si}_x\text{Sn}_y$  materials and devices“, *Thin Solid Films*, Bd. 557, S. 177–182, Apr. 2014, doi: 10.1016/j.tsf.2013.08.043.
- [34] T. Yamaha u. a., „Growth and Characterization of Heteroepitaxial Layers of GeSiSn Ternary Alloy“, *ECS Trans.*, Bd. 50, Nr. 9, S. 907–913, März 2013, doi: 10.1149/05009.0907ecst.
- [35] T. Asano u. a., „Epitaxial growth and crystalline properties of  $\text{Ge}_{1-x-y}\text{Si}_x\text{Sn}_y$  on Ge(001) substrates“, *Solid-State Electron.*, Bd. 110, S. 49–53, Aug. 2015, doi: 10.1016/j.sse.2015.01.006.
- [36] N. Taoka u. a., „Non-uniform depth distributions of Sn concentration induced by Sn migration and desorption during GeSnSi layer formation“, *Appl. Phys. Lett.*, Bd. 106, Nr. 6, S. 061107, Feb. 2015, doi: 10.1063/1.4908121.
- [37] T. Yamaha u. a., „Experimental observation of type-I energy band alignment in lattice-matched  $\text{Ge}_{1-x-y}\text{Si}_x\text{Sn}_y/\text{Ge}$  heterostructures“, *Appl. Phys. Lett.*, Bd. 108, Nr. 6, S. 061909, Feb. 2016, doi: 10.1063/1.4941991.
- [38] M. Fukuda, „Formation and characterization of  $\text{Ge}_{1-x-y}\text{Si}_x\text{Sn}_y/\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x/\text{Ge}_{1-x-y}\text{Si}_x\text{Sn}_y$  double heterostructures with strain-controlled  $\text{Ge}_{1-x-y}\text{Si}_x\text{Sn}_y$  layers“, *Mater. Sci. Semicond. Process.*, S. 6, 2017.
- [39] M. Fukuda, K. Watanabe, M. Sakashita, M. Kurosawa, O. Nakatsuka, und S. Zaima, „Control of  $\text{Ge}_{1-x-y}\text{Si}_x\text{Sn}_y$  layer lattice constant for energy band alignment in  $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x/\text{Ge}_{1-x-y}\text{Si}_x\text{Sn}_y$  heterostructures“, *Semicond. Sci. Technol.*, Bd. 32, Nr. 10, S. 104008, Okt. 2017, doi: 10.1088/1361-6641/aa80ce.
- [40] M. A. Herman und H. Sitter, *Molecular beam epitaxy: fundamentals and current status*, 2nd, rev. updated ed Aufl. Berlin ; New York: Springer, 1996.
- [41] L. Spieß, Hrsg., *Moderne Röntgenbeugung: Röntgendiffraktometrie für Materialwissenschaftler, Physiker und Chemiker*, 2., Überarb. und erw. Aufl. Wiesbaden: Vieweg + Teubner, 2009.
- [42] Sirona Valdueza-Felip, „Nitride-based semiconductor nanostructures for applications in optical communications at 1.5  $\mu\text{m}$ “, 2011, doi: 10.13140/RG.2.1.1799.6005.

- [43] H. Jorke, „Surface segregation of Sb on Si(100) during molecular beam epitaxy growth“, *Surf. Sci.*, Bd. 193, Nr. 3, S. 569–578, Jan. 1988, doi: 10.1016/0039-6028(88)90454-2.
- [44] R. Beeler, R. Roucka, A. V. G. Chizmeshya, J. Kouvetakis, und J. Menéndez, „Nonlinear structure-composition relationships in the  $\text{Ge}_{1-y}\text{Sn}_y/\text{Si}(100)$  ( $y < 0.15$ ) system“, *Phys. Rev. B*, Bd. 84, Nr. 3, Juli 2011, doi: 10.1103/PhysRevB.84.035204.
- [45] D. J. O’Connor, B. A. Sexton, und R. S. C. Smart, Hrsg., *Surface analysis methods in materials science*, 2nd ed. Berlin ; New York: Springer, 2003.
- [46] D. B. Williams und C. B. Carter, *Transmission electron microscopy: a textbook for materials science*, 2. ed. New York: Springer, 2009.
- [47] Ziegler, Johannes, „Bestimmung der Bandlücke von unverspanntem SiGeSn mittels C(U)-Messung von pin-Dioden“. Universität Stuttgart, 31. März 2021.
- [48] B. W. Levinger und D. R. Frankl, „Cyclotron resonance measurements of the energy band parameters of germanium“, *J. Phys. Chem. Solids*, Bd. 20, Nr. 3–4, S. 281–288, Aug. 1961, doi: 10.1016/0022-3697(61)90015-4.
- [49] I. A. Fischer u. a., „Growth and characterization of SiGeSn quantum well photo-diodes“, *Opt. Express*, Bd. 23, Nr. 19, S. 25048, Sep. 2015, doi: 10.1364/OE.23.025048.
- [50] T. Wendav u. a., „Compositional dependence of the bandgap of  $\text{Ge}_{1-x-y}\text{Si}_x\text{Sn}_y$  alloys“, *Appl. Phys. Lett.*, Bd. 108, Nr. 24, S. 242104, Juni 2016, doi: 10.1063/1.4953784.
- [51] D. Schwarz, M. Oehme, und J. Schulze, „Growth of  $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{Sn}_y$  structures with high Sn content for bandgap investigation“, gehalten auf der Austrian MBE Workshop 2017, Vienna, Austria, Sep. 2017.
- [52] D. Schwarz, I. A. Fischer, M. Oehme, P. Zaumseil, G. Capellini, und J. Schulze, „Temperature stability of MBE-grown  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -structures with high Sn content“, gehalten auf der 1st Joint Conference of International SiGe Technology and Device Meeting (ISTDM) and International Conference on Silicon Epitaxy and Hetero-structures (ICSi), Potsdam, Germany, Mai 2018.
- [53] M. Oehme, D. Schwarz, J. Schulze, C. J. Clausen, und I. A. Fischer, „SiGeSn material for integrated optical devices“, in *Silicon Photonics: From Fundamental Research to Manufacturing*, Strasbourg, France, Mai 2018, S. 11. doi: 10.1117/12.2318011.
- [54] D. Schwarz u. a., „MBE-Grown  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  Diode and Quantum Well Diode Structures with High Sn Content for Optical Applications“, *Meet. Abstr.*, Bd. MA2018-02, Nr. 31, S. 1016–1016, Juli 2018.
- [55] C. J. Clausen u. a., „Electrical characterization of n-doped SiGeSn diodes with high Sn content“, *Semicond. Sci. Technol.*, Bd. 33, Nr. 12, S. 124017, Dez. 2018, doi: 10.1088/1361-6641/aae3ab.
- [56] P. Povolni u. a., „Electrical Characterization of Fabricated pin Diodes made from  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$  with an Embedded  $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$  Quantum Well“, in *2019 42nd International Convention on Information and Communication Technology, Electronics and Microelectronics (MIPRO)*, Mai 2019, S. 1–6. doi: 10.23919/MIPRO.2019.8757211.

- 
- [57] M. Oehme, J. Werner, M. Kaschel, O. Kirfel, und E. Kasper, „Germanium waveguide photodetectors integrated on silicon with MBE“, *Thin Solid Films*, Bd. 517, Nr. 1, S. 137–139, Nov. 2008, doi: 10.1016/j.tsf.2008.08.062.
- [58] E. Kasper, M. Bauer, und M. Oehme, „Quantitative secondary ion mass spectrometry analysis of SiO<sub>2</sub> desorption during in situ heat cleaning“, *Thin Solid Films*, Bd. 321, Nr. 1–2, S. 148–152, Mai 1998, doi: 10.1016/S0040-6090(98)00464-7.
- [59] E. Kasper und H.-J. Herzog, „Elastic strain and misfit dislocation density in Si<sub>0.92</sub>Ge<sub>0.08</sub> films on silicon substrates“, *Thin Solid Films*, Bd. 44, Nr. 3, S. 357–370, Aug. 1977, doi: 10.1016/0040-6090(77)90443-6.
- [60] B. Predel, „Introduction“, in *Numerical data and functional relationships in science and technology: new series. Group 4 Vol. 12 Subvol. A: Physical chemistry Phase equilibria, crystallographic and thermodynamic data of binary alloys Ac-Ag ... Au-Zr*, Bd. 12A, B. Predel, Hrsg. Berlin/Heidelberg: Springer-Verlag, 2006, S. 1–23. doi: 10.1007/10793176\_2.
- [61] „VACOM Produkt Katalog“. 3. Februar 2021. Zugegriffen: 7. Juni 2021. [Online]. Verfügbar unter: <https://www.vacom.de/downloads/vacom-produktkatalog?download=3241:vacom-produktkatalog-komplett>
- [62] H. Daembkes, H.-J. Herzog, H. Jorke, H. Kibbel, und E. Kasper, „The n-channel SiGe/Si modulation-doped field-effect transistor“, *IEEE Trans. Electron Devices*, Bd. 33, Nr. 5, S. 633–638, Mai 1986, doi: 10.1109/T-ED.1986.22544.
- [63] E. A. Fitzgerald und S. B. Samavedam, „Line, point and surface defect morphology of graded, relaxed GeSi alloys on Si substrates“, *Thin Solid Films*, Bd. 294, Nr. 1, S. 3–10, Feb. 1997, doi: 10.1016/S0040-6090(96)09296-6.
- [64] T. Satō, „Spectral Emissivity of Silicon“, *Jpn. J. Appl. Phys.*, Bd. 6, Nr. 3, S. 339–347, März 1967, doi: 10.1143/JJAP.6.339.
- [65] N. Ravindra *u. a.*, „Emissivity Measurements and Modeling of Silicon-Related Materials: An Overview“, *Int. J. Thermophys.*, Bd. 22, S. 1593–1611, Sep. 2001, doi: 10.1023/A:1012869710173.
- [66] H. Kirmse *u. a.*, „Correction for artifacts of EDXS-based quantification of chemical composition of SiGeSn-based epitaxial structures“, gehalten auf der Microscopy Conference 2021, Digital Conference, Aug. 2021.
- [67] D. V. Yurasov, A. V. Antonov, M. N. Drozdov, V. B. Schmagin, K. E. Spirin, und A. V. Novikov, „Antimony segregation in Ge and formation of n-type selectively doped Ge films in molecular beam epitaxy“, *J. Appl. Phys.*, Bd. 118, Nr. 14, S. 145701, Okt. 2015, doi: 10.1063/1.4932665.
- [68] S. Gupta *u. a.*, „Highly Selective Dry Etching of Germanium over Germanium–Tin (Ge<sub>1-x</sub>Sn<sub>x</sub>): A Novel Route for Ge<sub>1-x</sub>Sn<sub>x</sub> Nanostructure Fabrication“, *Nano Lett.*, Bd. 13, Nr. 8, S. 3783–3790, Aug. 2013, doi: 10.1021/nl4017286.
- [69] W. Takeuchi, T. Asano, Y. Inuzuka, M. Sakashita, O. Nakatsuka, und S. Zaima, „Characterization of Shallow- and Deep-Level Defects in Undoped Ge<sub>1-x</sub>Sn<sub>x</sub> Epitaxial Layers by Electrical Measurements“, *ECS J. Solid State Sci. Technol.*, Bd. 5, Nr. 4, S. P3082–P3086, 2016, doi: 10.1149/2.0151604jss.
-

- [70] G. Sun, R. A. Soref, und H. H. Cheng, „Design of an electrically pumped SiGeSn/GeSn/SiGeSn double-heterostructure midinfrared laser“, *J. Appl. Phys.*, Bd. 108, Nr. 3, S. 033107, 2010.
- [71] H. Lin, „Growth and characterization of GeSn and SiGeSn alloys for optical interconnects“, PhD Thesis, Stanford University Stanford, 2012.
- [72] S. A. Ghetmiri *u. a.*, „Study of a SiGeSn/GeSn/SiGeSn structure toward direct bandgap type-I quantum well for all group-IV optoelectronics“, *Opt. Lett.*, Bd. 42, Nr. 3, S. 387, Feb. 2017, doi: 10.1364/OL.42.000387.
- [73] W. Du *u. a.*, „Investigation of optical transitions in a SiGeSn/GeSn/SiGeSn single quantum well structure“, *J. Appl. Phys.*, Bd. 122, Nr. 12, S. 123102, Sep. 2017, doi: 10.1063/1.4986341.
- [74] M. Mebarki, D. Boukredimi, S. Sadik, und J. L. Lazzari, „Electrical determination of band offsets in a  $p$ -Ga<sub>0.77</sub>In<sub>0.23</sub>As<sub>0.20</sub>Sb<sub>0.80</sub>/ $n$ -GaSb type-II heterojunction“, *J. Appl. Phys.*, Bd. 73, Nr. 5, S. 2360–2363, März 1993, doi: 10.1063/1.353114.
- [75] T. Asano *u. a.*, „Impact of hydrogen surfactant on crystallinity of Ge<sub>1-x</sub>Sn<sub>x</sub> epitaxial layers“, *Jpn. J. Appl. Phys.*, Bd. 54, Nr. 4S, S. 04DH15, Apr. 2015, doi: 10.7567/JJAP.54.04DH15.

## Publikationsliste

Im Rahmen dieser Arbeit entstanden die folgenden Publikationen:

Konferenzpublikationen:

- [1] H. Kirmse, **D. Schwarz**, K. Elsner, H. Kropf, M. Wollgarten, J. Schulze, und C. T. Koch, „Correction for artifacts of EDXS-based quantification of chemical composition of SiGeSn-based epitaxial structures“, geplant auf der Microscopy Conference 2021, Aug. 2021.
- [2] M. Wanitzek, M. Oehme, **D. Schwarz**, K. Guguieva, und J. Schulze, „Ge-on-Si Avalanche Photodiodes for LIDAR Applications“, in *2020 43rd International Convention on Information, Communication and Electronic Technology (MIPRO)*, Opatija, Croatia, Sep. 2020, S. 8–12. doi: 10.23919/MIPRO48935.2020.9245425.
- [3] M. M. Dettling, D. Weißhaupt, H. S. Funk, M. Kern, F. Berkmann, C. Clausen, M. Oehme, **D. Schwarz**, J. v. Slageren, und J. Schulze, „Carrier mobilities in heavily doped pseudomorphic Ge<sub>1-x</sub>Sn<sub>x</sub>-epilayers“, in *2020 43rd International Convention on Information, Communication and Electronic Technology (MIPRO)*, Sep. 2020, S. 17–21. doi: 10.23919/MIPRO48935.2020.9245273.
- [4] **D. Schwarz**, M. Oehme, und J. Schulze, „Alloy Stability of GeSn and SiGeSn with Sn Concentrations up to 15% Utilizing Low-Temperature Molecular Beam Epitaxy“, gehalten auf der International Conference on Defects-Recognition, Imaging and Physics in Semiconductors (DRIP XVIII), Berlin, Sep. 2019.
- [5] M. C. J. Weiser, **D. Schwarz**, H. S. Funk, D. Weißhaupt, C. Serra, J. Schulze, und S. Chiussi, „Fabrication of GePb-Alloys by Means of Pulsed Laser Induced Epitaxy“, in *2019 42nd International Convention on Information and Communication Technology, Electronics and Microelectronics (MIPRO)*, Mai 2019, S. 1–6. doi: 10.23919/MIPRO.2019.8756640.
- [6] P. Povolni, **D. Schwarz**, C. J. Clausen, Y. Elogail, H. S. Funk, M. Oehme, D. Weißhaupt, und J. Schulze, „Electrical Characterization of Fabricated pin Diodes made from Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> with an Embedded Ge<sub>1-x</sub>Sn<sub>x</sub> Quantum Well“, in *2019 42nd International Convention on Information and Communication Technology, Electronics and Microelectronics (MIPRO)*, Mai 2019, S. 1–6. doi: 10.23919/MIPRO.2019.8757211.
- [7] L. Gebert, **D. Schwarz**, A. Elsayed, und J. Schulze, „Electrical Characterization of pure Boron-on-Germanium pin Diodes“, in *2019 42nd International Convention on Information and Communication Technology, Electronics and Microelectronics (MIPRO)*, Mai 2019, S. 13–18. doi: 10.23919/MIPRO.2019.8757123.
- [8] J. F. Dick, A. Elsayed, **D. Schwarz**, und J. Schulze, „Electrical Characterization of Low-Temperature Boron on Silicon Deposition utilizing Molecular Beam Epitaxy“, in *2019 42nd International Convention on Information and Communication Technology, Electronics and Microelectronics (MIPRO)*, Mai 2019, S. 19–23. doi: 10.23919/MIPRO.2019.8756927.

- [9] C. J. Clausen, I. A. Fischer, N. Hoppe, R. Koerner, M. Oehme, **D. Schwarz**, und J. Schulze, „Tunnel injection into group IV semiconductors and its application to light-emitting devices“, gehalten auf der *Integrated Mid-Infrared Photonics (IPMI) Topic of the 2018 IEEE Photonics Society Summer Topical Meeting Series (SUM)*, Hawaii, USA, Juli 2018.
- [10] M. Oehme, **D. Schwarz**, J. Schulze, C. J. Clausen, und I. A. Fischer, „SiGeSn material for integrated optical devices“, in *Silicon Photonics: From Fundamental Research to Manufacturing*, Strasbourg, France, Mai 2018, S. 11. doi: 10.1117/12.2318011.
- [11] **D. Schwarz**, I. A. Fischer, M. Oehme, P. Zaumseil, G. Capellini, und J. Schulze, „Temperature stability of MBE-grown  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_y$ -structures with high Sn content“, gehalten auf der *1st Joint Conference of International SiGe Technology and Device Meeting (ISTDM) and International Conference on Silicon Epitaxy and Heterostructures (ICSi)*, Potsdam, Germany, Mai 2018.
- [12] J. Schulze, C. J. Clausen, **D. Schwarz**, P. Zaumseil, G. Capellini, und I. A. Fischer, „Ultra-thin Sn-rich GeSn quantum well structures“, gehalten auf der *1st Joint Conference of International SiGe Technology and Device Meeting (ISTDM) and International Conference on Silicon Epitaxy and Heterostructures (ICSi)*, Potsdam, Germany, Mai 2018.
- [13] L. A. Hänel, Y. Elogail, **D. Schwarz**, I. A. Fischer, und J. Schulze, „Performance of C6H8O7-treated and H- and Cl-passivated Ge-MOS-capacitances on Ge-virtual-substrate on Si(001)“, in *2018 41st International Convention on Information and Communication Technology, Electronics and Microelectronics (MIPRO)*, Mai 2018, S. 0027–0031. doi: 10.23919/MIPRO.2018.8400005.
- [14] F. Berkmann, L. Augel, M. B. Schilling, A. Berrier, **D. Schwarz**, D. Weißhaupt, M. Oehme, J. Schulze, und I. A. Fischer, „Optical characterization of highly n-type doped  $\text{Ge}_{0.95}\text{Sn}_{0.05}$  rod antennas on Si(001) substrates“, in *2018 41st International Convention on Information and Communication Technology, Electronics and Microelectronics (MIPRO)*, Mai 2018, S. 0032–0035. doi: 10.23919/MIPRO.2018.8400006.
- [15] R. Koerner, I. A. Fischer, R. Soref, **D. Schwarz**, C. J. Clausen, L. Hanel, M. Oehme, und J. Schulze, „Tunnel-modulated Ge LED/laser light source and a sub-thermal voltage switching detector for the monolithic on-chip optical transceiver“, in *2017 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, San Francisco, CA, Dez. 2017, S. 24.4.1–24.4.4. doi: 10.1109/IEDM.2017.8268453.
- [16] **D. Schwarz**, M. Oehme, und J. Schulze, „Growth of  $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{Sn}_y$  structures with high Sn content for bandgap investigation“, gehalten auf dem Austrian MBE Workshop 2017, Vienna, Austria, Sep. 2017.
- [17] R. Koerner, **D. Schwarz**, C. Clausen, M. Oehme, I. A. Fischer, und J. Schulze, „The Germanium Zener-Emitter for Silicon Photonics“, gehalten auf der *19th European Conference on Intergrated Optics*, Eindhoven, The Netherlands, Apr. 2017
- [18] R. Koerner, **D. Schwarz**, I. A. Fischer, L. Augel, S. Bechler, L. Haenel, M. Kern, M. Oehme, E. Rolseth, B. Schwartz, D. Weisshaupt, W. Zhang, und J. Schulze, „The Zener-Emitter: A novel superluminescent Ge optical waveguide-amplifier with 4.7 dB gain at 92 mA based on free-carrier modulation by direct Zener tunneling monolithically integrated on Si“, in *2016 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, Dez. 2016, S. 22.5.1–22.5.4. doi: 10.1109/IEDM.2016.7838474.

Journalpublikationen:

- [1] R. Khosla, **D. Schwarz**, H. S. Funk, K. Guguieva, und J. Schulze, „High-quality remote plasma enhanced atomic layer deposition of aluminum oxide thin films for nanoelectronics applications“, *Solid-State Electron.*, S. 108027, Mai 2021, doi: 10.1016/j.sse.2021.108027.
- [2] A. Marchionni, C. Zucchetti, F. Ciccacci, M. Finazzi, H. S. Funk, **D. Schwarz**, M. Oehme, J. Schulze, und F. Bottegoni, „Inverse spin-Hall effect in GeSn“, *Appl. Phys. Lett.*, Bd. 118, Nr. 21, S. 212402, Mai 2021, doi: 10.1063/5.0046129.
- [3] D. Weißhaupt, H. S. Funk, M. Kern, M. M. Dettling, **D. Schwarz**, M. Oehme, C. Sürgers, J. van Slageren, I. A. Fischer, und J. Schulze, „Weak localization and weak antilocalization in doped Ge<sub>1-y</sub>Sn<sub>y</sub> layers with up to 8% Sn“, *J. Phys. Condens. Matter*, Bd. 33, Nr. 8, S. 085703, Feb. 2021, doi: 10.1088/1361-648X/abcb68.
- [4] S. Choudhary, **D. Schwarz**, H. S. Funk, R. Khosla, S. K. Sharma, und J. Schulze, „Impact of Charge Trapping On Epitaxial p-Ge<sub>on</sub>-p-Si and HfO<sub>2</sub> Based Al/HfO<sub>2</sub>/p-Ge<sub>on</sub>-p-Si/Al Structures Using Kelvin Probe Force Microscopy and Constant Voltage Stress“, *IEEE Trans. Nanotechnol.*, Bd. 20, S. 346–355, 2021, doi: 10.1109/TNANO.2021.3069820.
- [5] M. Wanitzek, M. Oehme, **D. Schwarz**, K. Guguieva, und J. Schulze, „Ge-on-Si Avalanche Photodiodes for LIDAR Applications“, in *2020 43rd International Convention on Information, Communication and Electronic Technology (MIPRO)*, Opatija, Croatia, Sep. 2020, S. 8–12. doi: 10.23919/MIPRO48935.2020.9245425.
- [6] **D. Schwarz**, H. S. Funk, K. Guguieva, M. Oehme, und J. Schulze, „Capacitance-Voltage Measurements on MBE-Grown Ge-Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> Heterojunction pn-Diodes for Material Characterisation“, *ECS Trans.*, Bd. 98, Nr. 5, S. 339–349, Sep. 2020, doi: 10.1149/09805.0339ecst.
- [7] **D. Schwarz**, H. S. Funk, M. Oehme, und J. Schulze, „Alloy Stability of Ge<sub>1-x</sub>Sn<sub>x</sub> with Sn Concentrations up to 17% Utilizing Low-Temperature Molecular Beam Epitaxy“, *J. Electron. Mater.*, Bd. 49, Nr. 9, S. 5154–5160, Sep. 2020, doi: 10.1007/s11664-020-08188-6.
- [8] I. A. Fischer, C. J. Clausen, **D. Schwarz**, P. Zaumseil, G. Capellini, M. Virgilio, M. C. da Silva Figueira, S. Birner, S. Koelling, P. M. Koenraad, M. R. S. Huang, C. T. Koch, T. Wendav, K. Busch, und J. Schulze, „Composition analysis and transition energies of ultrathin Sn-rich GeSn quantum wells“, *Phys. Rev. Mater.*, Bd. 4, Nr. 2, S. 024601, Feb. 2020, doi: 10.1103/PhysRevMaterials.4.024601.
- [9] M. C. J. Weiser, **D. Schwarz**, H. S. Funk, D. Weißhaupt, C. Serra, J. Schulze, und S. Chiussi, „Fabrication of GePb-Alloys by Means of Pulsed Laser Induced Epitaxy“, in *2019 42nd International Convention on Information and Communication Technology, Electronics and Microelectronics (MIPRO)*, Mai 2019, S. 1–6. doi: 10.23919/MIPRO.2019.8756640.
- [10] P. Povolni, **D. Schwarz**, C. J. Clausen, Y. Elogail, H. S. Funk, M. Oehme, D. Weißhaupt, und J. Schulze, „Electrical Characterization of Fabricated pin Diodes made from Si<sub>x</sub>Ge<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>y</sub> with an Embedded Ge<sub>1-x</sub>Sn<sub>x</sub> Quantum Well“, in *2019 42nd International*

- Convention on Information and Communication Technology, Electronics and Microelectronics (MIPRO)*, Mai 2019, S. 1–6. doi: 10.23919/MIPRO.2019.8757211.
- [11] L. Gebert, **D. Schwarz**, A. Elsayed, und J. Schulze, „Electrical Characterization of pure Boron-on-Germanium pin Diodes“, in *2019 42nd International Convention on Information and Communication Technology, Electronics and Microelectronics (MIPRO)*, Mai 2019, S. 13–18. doi: 10.23919/MIPRO.2019.8757123.
- [12] J. F. Dick, A. Elsayed, **D. Schwarz**, und J. Schulze, „Electrical Characterization of Low-Temperature Boron on Silicon Deposition utilizing Molecular Beam Epitaxy“, in *2019 42nd International Convention on Information and Communication Technology, Electronics and Microelectronics (MIPRO)*, Mai 2019, S. 19–23. doi: 10.23919/MIPRO.2019.8756927.
- [13] L. A. Hänel, Y. Elogail, **D. Schwarz**, I. A. Fischer, und J. Schulze, „Performance of C<sub>6</sub>H<sub>8</sub>O<sub>7</sub>-treated and H- and Cl-passivated Ge-MOS-capacitances on Ge-virtual-substrate on Si(001)“, in *2018 41st International Convention on Information and Communication Technology, Electronics and Microelectronics (MIPRO)*, Mai 2018, S. 0027–0031. doi: 10.23919/MIPRO.2018.8400005.
- [14] F. Berkmann, L. Augel, M. B. Schilling, A. Berrier, **D. Schwarz**, D. Weißhaupt, M. Oehme, J. Schulze, und I. A. Fischer, „Optical characterization of highly n-type doped Ge<sub>0.95</sub>Sn<sub>0.05</sub> rod antennas on Si(001) substrates“, in *2018 41st International Convention on Information and Communication Technology, Electronics and Microelectronics (MIPRO)*, Mai 2018, S. 0032–0035. doi: 10.23919/MIPRO.2018.8400006.
- [15] R. Koerner, I. A. Fischer, **D. Schwarz**, C. J. Clausen, N. Hoppe, und J. Schulze, „Engineering of Germanium Tunnel Junctions for Optical Applications“, *IEEE Photonics J.*, Bd. 10, Nr. 2, S. 1–12, Apr. 2018, doi: 10.1109/JPHOT.2018.2818662.
- [16] R. Koerner, I. A. Fischer, **D. Schwarz**, C. Clausen, M. Oehme, und J. Schulze, „MBE grown germanium tunnel-junctions—burstein-moss effect and band-edge luminescence in the Ge Zener-Emitter“, *Semicond. Sci. Technol.*, Bd. 32, Nr. 12, S. 124005, Dez. 2017, doi: 10.1088/1361-6641/aa916f.
- [17] R. Koerner, I. A. Fischer, R. Soref, **D. Schwarz**, C. J. Clausen, L. Hanel, M. Oehme, und J. Schulze, „Tunnel-modulated Ge LED/laser light source and a sub-thermal voltage switching detector for the monolithic on-chip optical transceiver“, in *2017 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, San Francisco, CA, Dez. 2017, S. 24.4.1–24.4.4. doi: 10.1109/IEDM.2017.8268453.
- [18] R. Koerner, **D. Schwarz**, I. A. Fischer, L. Augel, S. Bechler, L. Haenel, M. Kern, M. Oehme, E. Rolseth, B. Schwartz, D. Weisshaupt, W. Zhang, und J. Schulze, „The Zener-Emitter: A novel superluminescent Ge optical waveguide-amplifier with 4.7 dB gain at 92 mA based on free-carrier modulation by direct Zener tunneling monolithically integrated on Si“, in *2016 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, Dez. 2016, S. 22.5.1–22.5.4. doi: 10.1109/IEDM.2016.7838474.

### Danksagung

Abschließend möchte ich mich bei allen Personen, die mich auf meinem Lebensweg bis hierher begleitet und unterstützt haben.

Mein besonderer Dank gilt zunächst Prof. Dr.-Ing. habil. Jörg Schulze für die Möglichkeit der Promotion am Institut für Halbleitertechnik in diesem sehr interessanten Thema. Ich bedanke mich außerdem für die sehr gute Betreuung, insbesondere die ständige Hilfsbereitschaft in allen Fragen und die vielen fachlichen Diskussionen. Besonders die intensive wissenschaftliche Arbeit in den Doktorandenseminaren hat mich sehr geprägt.

Des Weiteren danke ich Prof. Dr. sc. techn. Jan Hesselbarth für den Prüfungsvorsitz, Prof. Dr. Peter Michler für die Übernahme der Mitberichterstattung und Prof. Dr. Jens Anders für die Übernahme des Mitprüfers.

Dr. Michael Oehme danke ich besonders für die Hilfe bei der Einarbeitung in die Molekularstrahlepitaxie und die langjährige und vor allem tatkräftige Unterstützung und Zusammenarbeit bei der Instandhaltung der A-MBE-Anlage. Außerdem danke ich recht herzlich für die vielen XRD-Analysen, die vielen wissenschaftlichen Diskussionen und das zahlreiche konstruktive Feedback zu meiner Arbeit.

Außerdem möchte ich mich bei allen Kollegen am Institut für Halbleitertechnik bedanken, die mich auf dieser Reise über die Jahre hinweg begleitet haben. Diese sind Ahmed Elsayed, Caterina Clausen, Cinja Schwiedel, David Weißhaupt, Fritz Berkmann, Hannes Funk, Inga Fischer, Jan Dick, Jochen Grob, Kateryna Guguieva, Klaus Matthies, Lion Augel, Lukas Seidel, Markus Ayasse, Maurice Wanitzek, Roman Körner, Stefan Bechler, Thanh Hai Nguyen und Yasmine Elogail. Vielen Dank für die gute Zusammenarbeit und die angenehme Arbeitsatmosphäre. Daneben möchte ich mich bei meinen Studenten und hier ganz besonders Johannes Ziegler für die tatkräftige Unterstützung bedanken.

Besonders hervorhebend möchte ich dabei nochmals Ahmed Elsayed und Hannes Funk erwähnen ohne deren Hilfe und Unterstützung diese Arbeit nicht möglich gewesen wäre. Ich bin glücklich euch als meine Freunde bezeichnen zu dürfen.

Für die zahlreichen TEM-EDXS-Analysen möchte ich mich außerdem Dr. Holm Kirmse von der Humboldt-Universität zu Berlin bedanken. Für die RBS-Analysen danke ich gleichermaßen Viktoria Schlykow und Dan Buca vom Forschungszentrum Jülich und Oliver Steuer vom Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf. Für die HT-XRD danke ich außerdem Dr. Peter Zaumseil vom Leibniz-Institut für innovative Mikroelektronik (IHP).

Außerdem möchte ich mich bei meiner Familie, besonders meinen Eltern für den langjährigen Zuspruch bedanken.

Mein ganz besonderer Dank gilt meiner Frau Natascha und meinen Kindern, Lea-Sophie und Lennard. Vielen Dank für euer ausdauerndes Verständnis für die langen Arbeitstage und die stressige Zeit. Euer Zuspruch und die gemeinsame Zeit sind für mich immer wieder die Quelle für neue Motivation.



Eidesstattliche Erklärung

Ich erkläre hiermit, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und nur unter Benutzung der angegebenen Literatur und Hilfsmittel angefertigt habe. Wörtlich übernommene Sätze oder Satzteile sind als Zitat belegt, andere Anlehnungen hinsichtlich Aussage und Umfang unter Quellenangabe kenntlich gemacht. Die Arbeit hat in gleicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen und ist nicht veröffentlicht.

Stuttgart, 11. März 2022

---

Ort, Datum



---

Daniel Schwarz