

Hochauflösende Röntgenbeugung an Si/SiGe Heterostrukturen

E. Koppensteiner*, P. Hamberger*, G. Bauer*, H. Kibbel#, H. Presting#, E. Kasper#,
A. Pesek**

*Institut für Halbleiterphysik, Johannes Kepler Universität Linz,
4040 Linz

#Daimler Benz AG, Forschungszentrum Ulm,
D-7900 Ulm

**Forschungsinstitut für Optoelektronik, Johannes Kepler Universität Linz,
4040 Linz

1. Einleitung

Beim epitaktischen Wachstum von Si/SiGe Heterostrukturen im allgemeinen und dünnperiodischen Si_mGe_n Übergittern (SL) (m, n : Zahl der atomaren Lagen) im besonderen wurde vor etwa einem Jahr ein wesentlicher Fortschritt dadurch erreicht, daß als Pufferschicht zwischen Si-Substrat und den Schichten, in denen das zwei-dimensionale Elektronengas vorhanden ist, anstelle relativ dünner, (einige 100\AA dicker) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ Pufferschichten mit konstantem Ge-Gehalt verhältnismäßig dicke ($>1\ \mu\text{m}$) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ Pufferschichten mit entweder stufenweise oder linear mit der Dicke zunehmendem Ge-Gehalt aufgewachsen wurden [1]. Während die Verwendung von konventionellen Pufferschichten mit konstantem Ge-Gehalt (kP) zu Versetzungsdichten in der Größenordnung von 10^{10}cm^{-2} im darüberliegenden Schichtsystem führt, wurde gezeigt, daß mithilfe von dicken Pufferschichten mit variablem Ge-Gehalt (vP) eine signifikante Verringerung dieser Versetzungsdichten um mehrere Größenordnungen erreicht werden kann [2]-[4]. In Si/Ge Strukturen, die auf vP's aufgewachsen wurden, werden z.B. Elektronenbeweglichkeiten von bis zu $200.000\ \text{cm}^2/\text{Vs}$ bei $T=4.2\ \text{K}$ erreicht [5],[6]. Außerdem konnte in Si_mGe_n SL's auf diesen vP's eine scharfe und intensitätsstarke Lumineszenz im nahen Infrarot beobachtet werden [1],[7].

Der Dehnungszustand in Si_mGe_n SL's beeinflusst deren Energielücke. Versetzungen in den SL-Schichten verschlechtern die elektronischen Eigenschaften. Eine wichtige zerstörungsfreie Methode zur Untersuchung der strukturellen Eigenschaften dieser Strukturen ist die hochauflösende Röntgenbeugung. Mit ihrer Hilfe können aus den Positionen der Bragg-Reflexe und deren Halbwertsbreiten (FWHM's) Informationen über den Dehnungszustand sowie grob über die Versetzungsdichten gewonnen werden [8]-[11]. Anstelle der Zweiachsen-Diffraktometer (DCD's) kamen in den letzten zwei Jahren verstärkt Dreiachsen-Diffraktometer (TAD's) zur Anwendung, welche durch die zusätzlich verwendeten Analysatorkristalle eine deutlich höhere Auflösung im reziproken Gitter erreichen [12]. Dadurch wird es möglich, die Intensitätsverteilung diffus gestreuter Röntgenstrahlung rund um reziproke Gitterpunkte (REL P's) komplexer Vielschichtsysteme in zwei voneinander unabhängigen Richtungen in der Beugungsebene des reziproken Gitters direkt zu messen (reciprocal space mapping). Während allein die relative Lage der RELP-Maxima Auskunft über Dehnungszustände und zusätzliche Netzebenenverkipnungen ("tilts") in den einzelnen Schichten gibt, erhält man durch die Kenntnis der diffus gestreuten Intensitätsverteilung Informationen über Dehnungsgradienten, Mosaikstruktur, mittlere Versetzungsabstände und die Grenzflächenrauigkeit der Schichten [12].

Mit Hilfe dieser Diffraktometrie, welche Intensitätskonturen um reziproke Gitterpunkte liefert (reciprocal space maps: RSM's) können die unterschiedlichen Dehnungszustände sehr genau

ermittelt werden. Für Si/Ge Strukturen, welche entlang der [100] Wachstumsrichtung abge-schieden werden reichen, zwei RSM's aus um sowohl den genauen x-Gehalt als auch den Dehnungszustand jeder einzelnen Schicht in $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ Legierungs-vP's bestimmen zu können. Außerdem soll hier gezeigt werden, daß man unmittelbar und ohne detaillierte Auswertung aus der relativen Position verschiedener RELP's in einem symmetrischen (z.B.(004) Bragg Reflex) und einem asymmetrischen (z.B.(224)Bragg Reflex) RSM direkt auf den Dehnungszustand von Puffer- und Übergitterschichten im Vergleich zum Si-Substrat schließen kann.

2. Experimente: Vergleich von Zwei- und Dreiaachsen-Diffraktometrie

Die hier untersuchten kurzperiodischen Si_mGe_n Übergitter wurden mit Hilfe von Molekularstrahlepitaxie (MBE) auf (001) orientierten Si Substraten gewachsen. Die strukturellen Parameter dieser SL's, welche sowohl auf kP- als auch auf vP-Pufferschichten aufgewachsen wurden, sind in den Abbildungen 1a-4a dargestellt, die Wachstumstemperaturen (T in °C) der einzelnen Schichten finden sich in den Tabellen I-IV. Die SL's in den Proben B1479 (145 Perioden von Si_6Ge_4) und B2189 (225 Perioden von Si_8Ge_8) wurden auf kP's gewachsen, während bei den Proben B2416 (100 Perioden von Si_6Ge_4) und B2512 (145 Perioden von Si_9Ge_6) das vP-Konzept zur Anwendung kam. In den beiden ersten Proben wurde zum Zweck der Dotierung nominell eine Atomlage Sb vor dem Puffer-Wachstum als Surfactant eingebracht, bei den beiden letzteren Proben geschah dies nach dem Wachstum der Pufferschichten. Das SL Wachstum wurde in allen vier Proben mit dem Wachstum einer 10\AA dünnen Si Deckschicht abgeschlossen.

Zur zerstörungsfreien strukturellen Charakterisierung wurde ein hochauflösendes Röntgen-diffraktometer verwendet, welches sowohl als DCD als auch als TAD verwendet werden kann. In beiden Fällen besteht der primäre Strahlengang aus einer Feinfokusröhre (verwendete Strahlung $\text{CuK}\alpha_1$) und einem Ge(220) 4-Kristall-Bartels Monochromator [13]. Der sekundäre DCD Strahlengang bestand für die hier gezeigten DCD Messungen aus einer Detektorblende mit $200''$ Öffnungswinkel, die im sekundären TAD Strahlengang durch einen weiteren Ge(220) 2-Kristall Analysator ersetzt wurde (Philips MRD, Materials Research Diffractometer).

Es wurde von jeder Probe ein symmetrischer (004) $\omega/2\Theta$ scan mit DCD Optik aufgenommen (Abb.1a-4a, oberste Kurven). Bei Probe B1479 (Abb.1a) erkennt man neben dem Substrat Reflex (Si(004)) den Reflex vom kP (B) und zwei SL Reflexe 0-ter (SL0) und erster Ordnung (SL-1). Der Reflex B ist aufgrund der geringen Dicke des kP schwach und breit. Die Verbreiterung von SL-1 im Vergleich zu SL0 ist symmetrisch, die Intensität von Satelliten höherer Ordnung liegt unterhalb der Hintergrundstrahlung von etwa 0.2 Impulsen/sec. Der Netzebenenabstand in der Pufferschicht ist in Wachstumsrichtung größer als der mittlere Netzebenenabstand im SL, da der Reflex von B bei einem kleineren Beugungswinkel auftritt als derjenige von SL0. Prinzipiell gilt dasselbe für Probe B2189 (Abb.2a), allerdings mit dem Unterschied, daß hier SL0 asymmetrisch ist, und die anderen SL Satelliten aufgespalten sind. Diese Aufspaltung wird deutlicher bei Satelliten höherer Ordnung. Die Gesamtdicke dieses SL's ist wegen der größeren Einzelschichtdicke und Zahl der Perioden wesentlich größer als diejenige der Probe B1479.

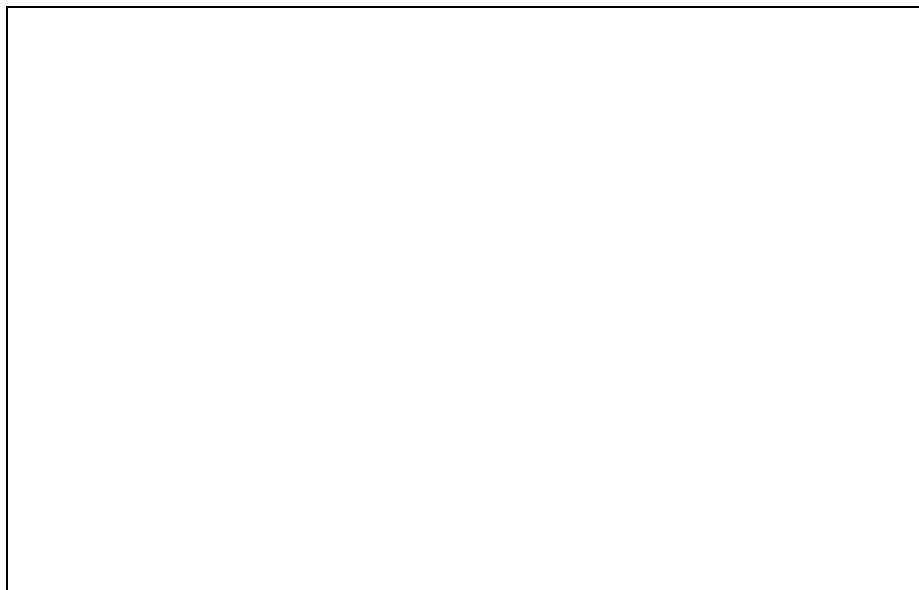
Abb. 1a: Symmetrischer (004) $\omega/2\Theta$ -Scan von Probe B1479.

Abb. 1b: (224) und (004) RSM's von Probe B1479.

Tabelle I: Probe B1479 (Si₆Ge₄)

Teil	t (Å)	x _{Ge} (%)	a _p (Å)	a _n (Å)	Kommentar	T (°C)
Puffer Pk	200	51	5.465	5.609	teilrelaxiert	450
SL: Si	0.6 +/- 0.3	0	5.480	5.393	*	350
Si	5.85*a _{n,Si} /4	0	"	"	*	
Si	0.6 +/- 0.3	0	"	"	*	
Ge	0.4 +/- 0.2	1	5.480	5.792	*	350
Ge	2.45*a _{n,Ge} /4	1	"	"	*	
Ge	0.4 +/- 0.2	1	"	"	*	

* Statischer Debye-Waller Faktor ($u=0.2\text{Å}$) für Grenzflächenrauigkeit

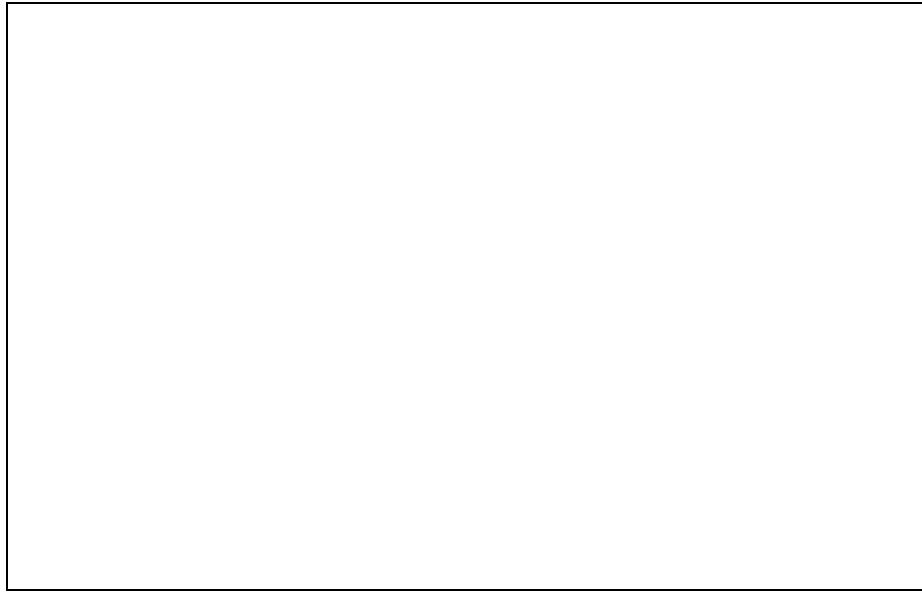
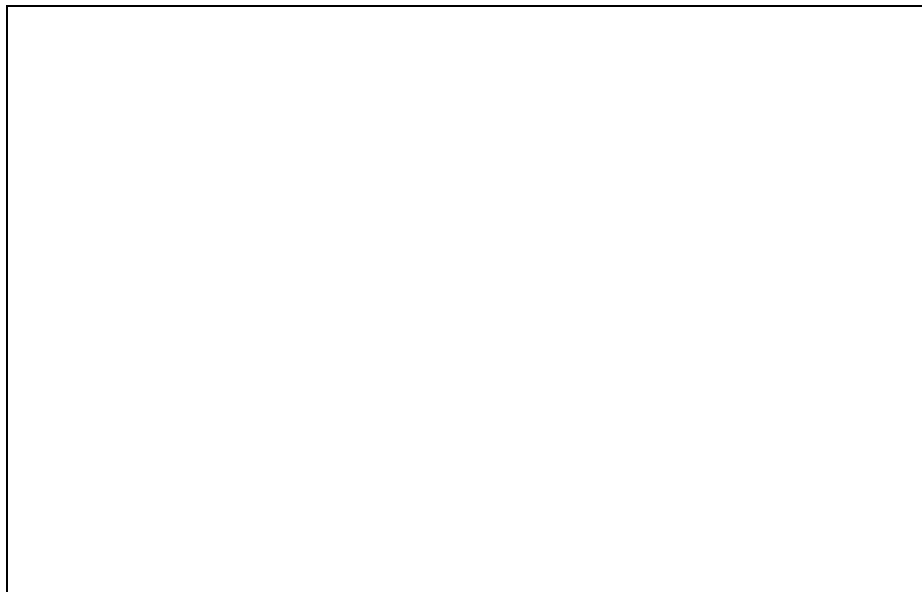
Abb. 2a: Symmetrischer (004) $\omega/2\theta$ -Scan von Probe B2189.

Abb. 2b:(224) und (004) RSM's von Probe B2189.

Tabelle II: Probe B2189 (SiGe)

Teil	t (Å)	x _{Ge} (%)	a _p (Å)	a _n (Å)	Kommentar	T (°C)
Puffer Pk	120	57	5.465	5.633	wenig relaxiert	450
SL: Si	8.6 - 9.16 * a _n .Si/4	0	5.565- 5.582	5.328-5.315	*	310
Ge	8.6 - 9.16 *a _n Ge/4	1	5.565- 5.582	5.728-5.715	*	310

* Grenzen der SL Schichtdicken entsprechen den Maxima in den aufgespaltenen SL-Satelliten



Abb. 3a: Symmetrischer (004) $\omega/2\theta$ -Scan von Probe B2416.



Abb. 3b:(224) und (004) RSM's von Probe B2416.

Tabelle III: Probe B2416 (Si₆Ge₄)

Teil	t (Å)	x _{Ge} (%)	a _p (Å)	a _n (Å)	Kommentar	T(°C)
Puffer vP: B1	7000	0 - 37	a _r *	a _r *	aus SIMS	600 - 520
Puffer Pk: B2	5500	37	a _r *	a _r *	Daten	500
SL: Si	7.1 * a _{n,Si} /4	0	5.509	5.371	keine period.	500
Ge	7.1 * a _{n,Ge} /4	1	5.509	5.770	Fluktuation	500
SL: Si	7.5 * a _{n,Si} /4	0	5.504	5.375	oder	500
Ge	4.3 * a _{n,Ge} /4	1	5.504	5.774	Rauhigkeit	500

* voll relaxierte Gitterkonstante in allen Teilen von PV

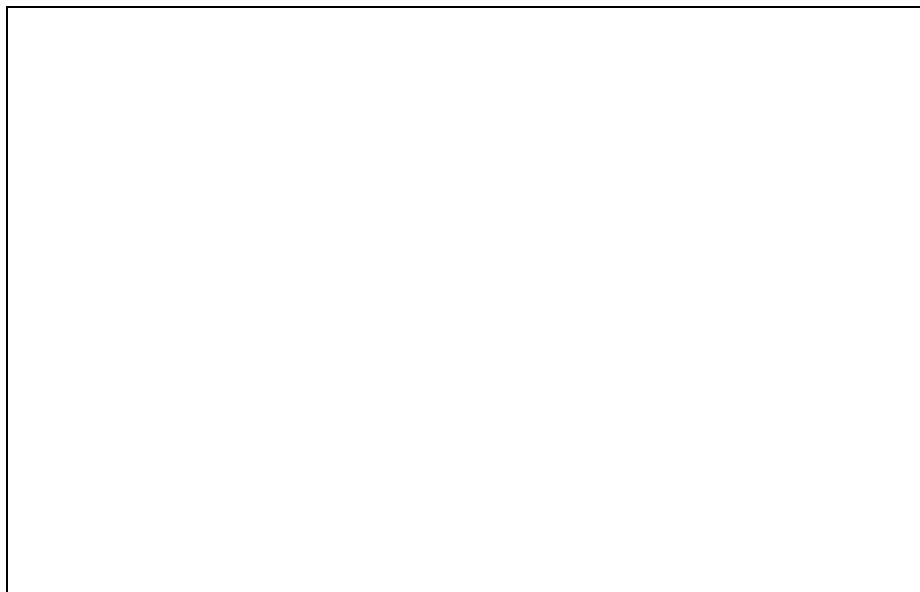
Abb. 4a: Symmetrischer (004) $\omega/2\theta$ -Scan von Probe B2512.

Abb. 4b: (224) und (004) RSM's von Probe B2512.

Tabelle IV: Probe B2512 (Si_9Ge_6)

Teil	t (Å)	x _{Ge} (%)	a _p (Å)	a _n (Å)	Kommentar	T(°C)
Puffer vP: B1	6500	0 - 39	a _r *	a _r *	dünner als bei Probe	600 - 520
Puffer Pk: B2	5000	39	a _r *	a _r *	B2416	520
SL: Si	9.18* a _{n,Si} /4	0	5.509	5.371	keine Per.Flukt.	500
Ge	5.81*a _{n,Ge} /4	1	5.509	5.770	od. Rauhigk.	500

* voll relaxierte Gitterkonstante in allen Teilen von PV

Im Gegensatz dazu haben alle SL Satelliten in den DCD (004) $\omega/2\theta$ Scans der Proben B2416 (Abb.3a) und B2512 (Abb.4a) wesentlich geringere FWHM's und sind weder asymmetrisch

noch aufgespalten. Die Puffer-Reflexe B1 (von vP) befinden sich zwischen denjenigen von Si(004) und SL0, die Puffer-Reflexe B2 (vom kP-Teil des Gesamtpuffers) fallen praktisch mit den SL0 Reflexen zusammen, haben also in Wachstumsrichtung Netzebenenabstände, die fast genauso groß sind wie die mit den jeweiligen Si und Ge Schichtdicken gewichteten mittleren SL-Netzebenenabstände. Bei Probe B2416 wurden unabhängig davon noch die Übergitter-Reflexe SL'0 und SL'-1 des nur 10 Perioden dicken zweiten SL's (Si₆Ge₆) aufgelöst. Aus symmetrischen und asymmetrischen $\omega/2\Theta$ Scans ließe sich der x-Gehalt in den vP's nur unter Annahme des Dehnungszustandes im vP ermitteln, oder aber der genaue Dehnungszustand nur unter Annahme eines bestimmten Germanium-Konzentrations-Profiles in Abhängigkeit von der Schichtdicke. Aus diesen $\omega/2\Theta$ Scans allein kann man nicht feststellen, inwieweit neben inhomogenen Dehnungen und Schichtdickenfluktuationen der mittlere Abstand von Faden-Versetzungen (threading dislocations) im Übergitter und damit die weithin mit Mosaizität umschriebene mittlere Größe und relative Verkippung von Mosaik-Blöcken im Übergitter die strukturelle Qualität des Schichtsystems beeinflussen.



Abb. 5: Schematische Darstellung des Relaxationsprozesses bei kurzperiodischen Übergitterstrukturen auf unterschiedlichen Mischkristall-Pufferschichten.

Es wurden daher von jeder Probe die relative Lage und Form der entscheidenden RELP's in der Beugungsebene mittels RSM bestimmt. Dabei mißt man etwa 100 $\omega/2\Theta$ Scans bei verschiedenen ω Winkeln ($\omega/2\Theta$ scan: radial vom Ursprung (000) im reziproken Raum; ω scan: entlang eines Kreises mit (000) als Mittelpunkt im reziproken Raum). Die $\omega/2\Theta$ - und ω -Scanrichtungen sind im reziproken Gitter in Abb.5 eingetragen. Im realen Raum bezeichnet ω den Winkel zwischen Primärstrahl und der Probenoberfläche und 2Θ den Winkel zwischen Primär- und Sekundärstrahl. Bei RSM's soll die Schrittweite in beiden Richtungen im Wellenvektorraum etwa der Größe der "Sonde" im reziproken Raum entsprechen, welche wiederum von den Winkeldivergenzen $\Delta\omega$ (auf der Primärseite) und $\Delta 2\Theta$ (auf der Sekundärseite, Abweichungen von perfekter Parallelität des Röntgenstrahls) und der spektralen Wellenlängendispersion $\Delta\lambda/\lambda$ (Abweichung von perfekter Monochromasie der Röntgenstrahls) der verwendeten Röntgenoptik abhängen. Ist die "Ausdehnung" eines betrachteten RELP's viel größer als die der Sonde im reziproken Raum, so kann man Abbildungsfehler vernachlässigen, die bei zu großer Sondenausdehnung, also bei zu geringer Auflösung im reziproken Raum, entstehen. Andererseits verliert man an Intensität, wenn man durch kleinere Blenden, aber auch durch zusätzliche Analysatorkristalle die Auflösung im reziproken Gitter erhöht und so die Sonde verkleinert. Es wurde nach diesen Gesichtspunkten für jedes RSM die

geeignete Optik verwendet. RELP's vom extrem versetzungsarmen, unverspannten und strukturell perfekten Substrat sollten abgesehen von "dynamischen Streifen", die von der begrenzten Eindringtiefe (ca. 10-100 μ m) der Röntgenstrahlung herrühren, kreisrund sein. Verzerrungen der intensitätsstarken Substrat-RELP's entlang der Ewald-Kugel, bei TAD "Analysator-Streifen" genannt, sind Artefakte, die allerdings für mit ein und derselben Optik gemessenen RELP's mit weitaus geringerer Intensität bedeutungslos werden. Die hier gezeigten (004) und (224) RSM's (Abb. 1b-4b) wurden wegen der geringen Intensität der interessanten RELP's mit DCD gemessen, zur Auswertung der genauen Dehnungsdaten und FWHM's wurden um die jeweiligen RELP's über einen viel kleineren Meßbereich TAD-RSM's aufgenommen.

Aus den symmetrischen (004) maps werden unmittelbar nicht statistisch verteilte Netzebenenverkipnungen zwischen den einzelnen Schichten mit einer Genauigkeit von etwa 0.003° ersichtlich, da in diesem Fall die Maxima der entsprechenden RELP's um einen der Verkippfung äquivalenten Betrag von der Linie $q(110)=0$ abweichen. Diese Verkipnungen müssen in die Dehnungsanalyse miteinbezogen werden. Außerdem dienen die Abstände zwischen RELP's wie die Reflexabstände aus den einzelnen $\omega/2\Theta$ Scans zur Kontrolle der aus den schrägen (224) RSM's unter Berücksichtigung der Verkipnungen ermittelten Werte der Gitterkonstanten in Wachstumsrichtung (a_n). Die auch durch Anpassen mit Gaußkurven ermittelten Verkipnungen symmetrischer Netzebenen waren bei sämtlichen hier untersuchten RELP's deutlich unter 0.01°.

Die schrägen (224) RSM's offenbaren auf einen Blick qualitativ den Dehnungszustand eines Schichtsystems, wenn man folgende Kriterien beachtet: Zwei vollständig pseudomorph verspannte Schichten haben die gleiche Gitterkonstante in der Wachstumsebene, daher befinden sich die ihnen entsprechenden RELP's bei schrägen Reflexen entlang der Wachstumsrichtung im reziproken Raum. Der Abstand beider RELP's in Wachstumsrichtung entspricht dem Unterschied in den Gitterkonstanten a_n normal zur Probenoberfläche. Im Gegensatz dazu, haben zwei vollständig relaxiert aufeinander aufgewachsene Schichten unterschiedliche Gitterkonstanten in der Wachstumsebene, bei kubischer Kristallstruktur sind dann aber die jeweiligen schrägen Netzebenen beider Schichten zueinander parallel. Im q -Raum liegen beide RELP's entlang der $\omega/2\Theta$ Richtung, d.h. entlang von $q(hkl)$, wenn es sich um den schrägen Reflex mit den Miller Indices hkl handelt. Dasselbe gilt für Übergitter, die von Schichten unterhalb völlig unbeeinflusst sind (in denen sich die Übergitterschichten nur noch gegenseitig verspannen, d.h. freistehende SL's), sofern die Unterschiede der elastischen Konstanten klein sind, wie dies bei Si und Ge angenommen werden kann [14].

Die kritische Übergitterschichtdicke eines freistehenden dünnperiodischen SL's, bei dem die Dicken der Einzelschichten unterhalb der jeweiligen kritischen Schichtdicken liegen, ist theoretisch unendlich groß. Deshalb könnte man in diesem Fall beliebig viele Perioden wachsen ohne Spannungsabbau durch unerwünschte Versetzungen im Übergitter hervorzurufen. Das Ziel besteht darin, durch geeignete Pufferschichten zwischen dem Substrat und den elektronisch aktiven Schichten dem Übergitter eine Gitterkonstante an der Oberfläche des Puffers anzubieten, die der des entsprechenden freistehenden SL's möglichst gleich ist. Bei Puffern mit konstantem Ge-Gehalt (kP 's) gilt es, den Ge-Gehalt und die Relaxation, und damit die Schichtdicke der Pufferschicht, optimal auf die aufzuwachsende Übergitterstruktur abzustimmen. Bei der Probe B1479 (Abb. 1b) erkennt man sofort, daß der Mischkristallpuffer (B) des Typs kP teilrelaxiert ist, und das Übergitter fast die gleiche Gitterkonstante in der Wachstumsebene hat wie B. Allerdings ist das SL nicht völlig freistehend. Im Vergleich dazu ist der dünnere kP Puffer in Probe B2189 (Abb. 2b) weniger relaxiert vom Substrat, das Übergitter aber freistehend. Allerdings deuten die Asymmetrie von SL_0 sowie die aufgespaltenen Satelliten-Reflexe darauf hin, daß innerhalb dieses Übergitters in Abhängigkeit von der

Gesamtschichtdicke unterschiedliche Dehnungszustände existieren [15]. Das bedeutet, daß die Relaxation des SL's weg von der vorgegebenen Gitterkonstante des Puffers in der Wachstumsebene nicht ausschließlich durch Versetzungen in der Puffer-SL Grenzfläche hervorgerufen wurde, sondern daß auch im Übergitter selbst Versetzungen erzeugt oder vorhandene verlängert wurden. Dafür spricht auch, daß die Hauptachse der SL0 Ellipse nicht senkrecht zu $q(224)$ steht [15], wie es bei reiner Mosaizität ohne Dehnungsgradienten der Fall wäre. Ähnliches träte auch in Probe B1479 auf, hätte man mehr Perioden bis zur gleichen SL-Gesamtschichtdicke wie in Probe B2189 aufgewachsen.

Für die beiden Proben B2416 (Si_6Ge_4 , Abb.3b) und B2512 (Si_9Ge_6 , Abb.4b) mit Puffertyp vP ergibt sich ein völlig anderes Bild. Alle Teile des dicken Pufferteils B1 sind voll relaxiert und liegen entlang von $q(224)$, wobei die Braggreflexe, die von Teilen des Puffers mit geringerem Ge-Gehalt herrühren, näher denjenigen liegen, die vom Substrat S stammen. Die RELP's B2 vom Teil des Puffers mit konstantem Ge-Gehalt und SL0 überlagern sich praktisch vollständig. Dem fast freistehendem Übergitter wurde vom Puffer her fast die adäquate Gitterkonstante in der Wachstumsebene angeboten. Es ist aus den (224) RSM's ersichtlich, daß das SL in Probe B2416 der Position eines völlig freistehenden Übergitters (auf der Linie $q(224)$) noch näher ist als das SL in Probe B2512. Der Puffer von B2512 ist insgesamt dünner als bei B2416, was sich auch auf die FWHM's der SL Satelliten auswirkt (Tab.V). In beiden Fällen sind die SL-Satelliten im Vergleich zum berechneten Beugungsdiagramm einer defektfreien Struktur nur wenig verbreitert, nicht asymmetrisch und nicht aufgespalten. Aus Tabelle V folgt, daß die Halbwertsbreiten sowohl parallel zu $q(004)$ als auch senkrecht dazu kleiner sind als diejenigen der ersten beiden Proben. Vor allem die FWHM's entlang $q(110)$ sind von Interesse, da kleine Werte großen, relativ wenig gegeneinander verkippten Mosaikblöcken und somit geringen Versetzungsdichten entsprechen. Die Halbwertsbreiten parallel zu $q(004)$ sind von der Zahl der Perioden abhängig und damit nur zwischen ähnlichen Strukturen vergleichbar. Bei Probe B1479 ist die FWHM von SL0 deutlich größer als bei B2416, obwohl beide Proben Si_6Ge_4 Übergitter sind und sogar die Probe B2416 um etwa die Hälfte weniger Perioden hat als die Probe B1479. Große Werte der Halbwertsbreiten der RELP's der Puffer B1 sind erwünscht, da dort Fehlpassungs- und Faden- (misfit und threading) Versetzungen konzentriert sein sollen.

Tabelle V: Halbwertsbreiten (FWHM) der SL RELPs parallel und senkrecht zur Richtung $q(004)$

Probe	(004) RELP	FWHM zu $q(004)$ (Winkelsekunden)	FWHM \perp zu $q(110)$ (Winkelsekunden)
B1479	SL 0	401	1146
B2189	SL 0	472	1445
	SL-1	538	1448
B2416	SL 0	356	1068
	SL-1	350	1071
	B1	-	1480
B2512	SL 0	365	1270
	SL-1	356	1380
	B1	-	1630

3. Diskussion

In Abbildung 5 sind die grundsätzlich unterschiedlichen Dehnungs-Relaxationsprozesse in Proben mit Mischkristallpuffern mit konstantem Ge-Gehalt (Typ kP, linke Seite, Probentyp A) solchen in Proben mit dem verbessertem dicken Pufferschichtkonzept (Typ vP, rechte

Seite, Probentyp B) gegenübergestellt. Die Pfeile symbolisieren zunehmende Relaxation der Pufferschichten, ihre Länge hängt vom Grad der Relaxation und ihre Richtung von den elastischen Konstanten der $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ Legierung ab. Bei Probe A wächst der Mischkristallpuffer zunächst pseudomorph auf dem Substrat und relaxiert ab seiner kritischen Schichtdicke entlang des eingezeichneten Pfeiles. Das SL, welches bei geringer Gesamtdicke wiederum die Gitterkonstante innerhalb der Wachstumsebene des Puffers annimmt, kann bei Überschreiten von dessen kritischer Gesamtschichtdicke ebenfalls vom Puffer weg in Richtung zu einem Punkt im reziproken Raum hin relaxieren, welcher einem freistehenden SL entspricht. Bei Proben des Typs B werden die einzelnen Teile des Puffers vP so dick gewachsen und der Ge-Gehalt so langsam erhöht, daß jeder Teil der Pufferschicht vollständig relaxieren kann. Auf diese Weise nähert man sich der RELP-Position des freistehenden Übergitters und schließt darüber hinaus zusätzlich aus, daß ein SL mit großer Gesamtdicke rückwirkend eine weitere Relaxation der Pufferschicht bewirken kann.

In der Folge wurden die exakten Dehnungen in und senkrecht zur Wachstumsebene aus den RSM's ermittelt (Gitterkonstanten a_p , a_n in den Tabellen I-IV, p für parallel, n für normal) und als fixe Parameter für in eine dynamische Simulation der Intensitätsverteilung der $(004) \omega/2\Theta$ Scans der Strukturen eingesetzt. Dabei wurde grundsätzlich angenommen, daß die nur wenige Monolagen dicken Si und Ge Schichten im SL dieselbe Gitterkonstante in der Wachstumsebene annehmen. Die Lage der SL_0 -Reflexe verschiebt sich im simulierten Diffraktogramm einerseits durch die gewählten Dehnungszustände in den SL-Schichten, andererseits auch durch die unterschiedlichen Schichtdickenverhältnisse im SL, wie sie z.B. durch Fluktuationen in den Periodendicken hervorgerufen werden. Durch genaue Kenntnis der Dehnungen aus den RSM's lassen sich letztere quantitativ erfassen. Bei der Simulation der $(004) \omega/2\Theta$ Einzelscans ist ein weiterer Aspekt zu beachten: für einen Einzelscan verwendet man durchgehend dieselbe Röntgenoptik. Tastet man aber mit ein und derselben Sondengröße entlang $q(004)$ im reziproken Raum über RELP's, welche Schichten unterschiedlicher Mosaizität entsprechen, also deren integrierte Intensität im reziproken Raum in verschiedenem Ausmaß entlang der Richtung $q(110)$ (d.h. für symmetrische Reflexe senkrecht zur Wachstumsrichtung) verteilt ist, so mißt man vergleichsweise geringere RELP- Intensitäten bei Schichten mit ausgeprägter Mosaizität. Bei der Simulation nach der dynamischen Beugungstheorie werden hier von vornherein perfekte Strukturen angenommen, man erhält also letztlich die integrierte Intensität der einzelnen Bragg-Reflexe. Es wurde daher in den symmetrischen RSM's entlang $q(110)$ die gebeugte Intensität aufintegriert. Die so gewonnenen eindimensionalen $(004) \omega/2\Theta$ Diffraktogramme (mittlere Kurven in den Abb.1a-4a) unterscheiden sich geringfügig in den Intensitätsverhältnissen von den gemessenen $(004) \omega/2\Theta$ Einzelscans und wurden zur Ermittlung der genauen Schichtdickenverhältnisse und Periodenfluktuationen herangezogen. Die so ermittelten Schichtdicken sind in den Tabellen I-IV als Vielfaches der Zahl der Monolagen ($a_{n,\text{Si}}/4$ bzw. $a_{n,\text{Ge}}/4$) dargestellt, die entsprechenden Simulationen finden sich in den Abbildungen 1a-4a, unterste Kurven. Für der Simulation der Periodenfluktuationen und der Grenzflächenrauigkeiten in Probe B1479 wurden Si und Ge Randschichten angenommen, die durch einen statischen Debye-Waller Faktor beschrieben wurden (Tab.I). Es wurde angenommen, daß die Dicke der rauhen Grenzschichten mit zunehmender Schichtdicke zunimmt [16]. In Tabelle II sind für Probe B2189 die den aufgespaltenen SL-Satelliten entsprechenden minimalen und maximalen Schichtdicken der Si und Ge Schichten als Grenze der Schichtdickenfluktuationen eingetragen. Bei den Simulationen zur Probe B2512 wurden zur Demonstration der starken Abhängigkeit dieser Methode vom Ge-Profil die nominellen Strukturparameter des Puffers vP verwendet. Außerdem blieb die Grenzflächenrauigkeit unberücksichtigt, was zu unterschiedlichen Intensitätsverhältnissen der SL-Satelliten führt.

Letztlich ist es möglich, das genaue Ge-Profil im vP-Puffer anzupassen, da der Dehnungszustand aller Teile des vP's aus den RSM's bekannt sind. Für beide vP's in den Proben B2416 und B2512 ergaben sich geringfügige Abweichungen von der Linearität des Ge-Gehaltes in den Stufen im mittleren vP-Bereich. Dort ist der Ge-Gehalt maximal um 2% geringer als der vom Wachstum her definierte Soll-Wert. Dieser Sachverhalt wurde durch SIMS-Daten bestätigt.

4. Zusammenfassung

Es wurden vier kurzperiodische Si_mGe_n Übergitter, die mittels Molekularstrahlepitaxie auf unterschiedlichen $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ Mischkristall-Pufferschichten aufgewachsen wurden, mit Hilfe der Zwei- und Dreiachsen-Röntgendiffraktometrie strukturell charakterisiert. Es stellt sich heraus, daß die Übergitter in den Proben, welche auf etwa $1.2\mu\text{m}$ dicken Mischkristall-Pufferschichten mit schrittweise mit der Schichtdicke zunehmendem Ge-Gehalt aufgewachsen wurden, eine erheblich bessere strukturelle Qualität aufweisen als Übergitter, die auf vergleichsweise dünnen Pufferschichten mit konstantem Ge-Gehalt aufgewachsen wurden. Trotz des relativ großen Unterschieds in den Gitterkonstanten von Si ($a_{\text{Si}}=5.43105\text{\AA}$) und Ge ($a_{\text{Ge}}=5.65785\text{\AA}$) ermöglicht das verbesserte Konzept des Pufferschicht-Wachstums die Herstellung von Übergitterstrukturen, die nahezu freistehend auf den darunterliegenden Schichten sind, und die deutlich geringere Mosaizität und Versetzungsdichten aufweisen als vergleichbare Übergitter, die auf den bisher üblichen Puffern mit konstantem Ge-Gehalt gewachsen wurden. Dies erklärt die erheblich höheren Elektronenbeweglichkeiten, die für das zweidimensionale Elektronengas in diesen Strukturen gefunden wurden. Weiters wurden die Vorteile der Aufnahme von Röntgenbeugungsdiagrammen als Funktion zweier Beugungswinkel zur zweidimensionalen Darstellung reziproker Gitterpunkte in der Beugungsebene gegenüber der Verwendung eindimensionaler Röntgendiffraktogramme bei der Analyse komplexer Schichtsysteme aufgezeigt. Dieses Verfahren erlaubt eine vergleichsweise einfache quantitative Analyse der Dehnungen in den einzelnen Schichten von Übergitterstrukturen und wurde anhand von Si_6Ge_4 , Si_8Ge_8 und Si_9Ge_6 Übergittern demonstriert.

Unterstützt durch Esprit project: EBR action 7128.

Literaturverzeichnis

- [1] W. Presting, A. Kibbel, M. Jaros, R.M. Turton, U. Menczigar, G. Abstreiter and H.G. Grimmeiss, *Semicond. Sci. Technol.* **7**,1127 (1992).
- [2] E.A. Fitzgerald, Y.H. Xie, M.L. Green, D. Brasen, A.R. Kortan, J. Michel, Y.J. Mii and B.E.Weir, *Appl. Phys. Lett.* **59**,811 (1991).
- [3] F.K. LeGoues, B.S. Meyerson and J.F. Morar, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2903 (1991).
- [4] W. Jäger, D. Stenkamp, P.Ehrhardt, K. Leifer, W. Sybertz, H. Kibbel, H. Presting and E. Kasper, *Thin Solid Films*, in print.
- [5] Y.J. Mii, Y.H. Xie, E.A. Fitzgerald, D. Monroe, F.A. Thiel and B.E.Weir, *Appl. Phys. Lett.* **59**,1611 (1991).
- [6] F. Schäffler, D. Többen, H.J. Herzog, G. Abstreiter and B. Holländer, *Semicond. Sci. Technol.* **7**, 260 (1992)
- [7] U. Menczigar, G. Abstreiter, J. Olajos, H. Grimmeis, H. Kibbel, H. Presting and E. Kasper, *Phys. Rev. Rapid Commun.*, in print.

-
- [8] D.C. Houghton, D.D. Perovic, J.M. Baribeau and G.C. Weathrly, *J. Appl. Phys.* **67**, 1850 (1990)
- [9] F.K. LeGoues, J.A. Ott, K. Eberl and S.S. Iyer, *Appl. Phys. Lett.* **61**, 174 (1992)
- [10] W. Koschinski, K. Dettmer and F.R. Kessler, *J. Appl. Phys.* **72**, 471 (1992)
- [11] P.J. Wang, M.S. Goorsky, B.S. Meyerson and F.K. LeGoues, *Appl. Phys. Lett.* **59**, 814 (1991)
- [12] P.F. Fewster, *J. Appl. Cryst.* **22**, 64 (1989); **24**, 178 (1991)
- [13] W.J. Bartels, *J. Vac. Sci. Technol.* **B1**(2), 338 (1983)
- 14 E. Koppensteiner, P. Hamberger, G. Bauer, H. Kibbel, H. Presting and E. Kasper, *Appl. Phys. Lett.* (1993) in print.
- [15] E. Koppensteiner, G. Springholz, P. Hamberger and G. Bauer, *J. Appl. Phys.* submitted
- [16] V. Holy, J. Kubena and K. Ploog, *Phys. Stat. Sol. (b)* **162**, 347 (1990)