

Si/Ge_n/Si(001) 异质结薄膜的掠入射荧光 X 射线吸收精细结构研究^{*}

潘志云 孙治湖 谢 治 闫文盛 韦世强[†]

(中国科学技术大学国家同步辐射实验室, 合肥 230029)

(2006 年 7 月 7 日收到, 2006 年 9 月 22 日收到修改稿)

利用掠入射荧光 X 射线吸收精细结构(XAFS)方法研究了在 400℃ 的温度下分子束外延生长的 Si/Ge_n/Si(001) 异质结薄膜($n=1, 2, 4$ 和 8 个原子层)中 Ge 原子的局域环境结构. 结果表明, 在 1 至 2 个 Ge 原子层(ML)生长厚度的异质结薄膜中, Ge 原子的第一近邻配位主要是 Si 原子. 随着 Ge 原子层厚度增加到 4 ML, Ge 原子的最近邻配位壳层中的 Ge-Ge 配位的平均配位数增加到 1.3. 当 Ge 原子层厚度增加到 8 ML 时, 第一配位壳层中的 Ge-Ge 配位占的比例只有 55%. 这表明在 400℃ 的生长条件下, Ge 原子有很强的迁移到 Si 覆盖层的能力. 随着 Ge 层厚度从 1 增加到 2, 4 和 8 ML, Ge 原子迁移到 Si 覆盖层的量由 0.5 ML 分别增加到 1.5, 2.0 和 3.0 ML. 认为在覆盖 Si 过程中 Ge 原子的迁移主要是通过产生 Ge 原子表面偏析来降低表面能和 Ge 层的应变能.

关键词: XAFS, Si/Ge_n/Si(001) 异质膜, 迁移效应

PACC: 6110, 6855, 6822

1. 引 言

由于相对于传统的纯 Si 材料而言, Si/Ge 异质结薄膜具有较高的电子迁移率^[1-3]、较好的高频^[4, 5]和光电性能^[6]以及较低的能耗等优势, 因而成为在下一代半导体工业中极具应用前途的材料^[7-9], 尤其是其高的空穴迁移率使之已经应用于 p 型 MOSFET^[10]和 CMOS 器件^[11]. 在实际应用中, 为了防止氧化, Si/Ge 异质膜上还要覆盖 Si 保护层, 从而改变了 Si/Ge 层的电子性能和带结构. 因此, 对于 Si/Ge 异质膜的系统研究成为理解、控制并调节其性能的重要环节^[12, 13]. Tamagawa 等^[14]、Nakajima 等^[15]、Lu 等^[16]、Wei 和 Oyanagi 等^[17]分别使用高分辨率透射电子显微镜(TEM)、高分辨率卢瑟福背散射谱、X 射线光电子谱(XPS)、拉曼谱(Raman)和掠入射荧光 X 射线吸收精细结构(XAFS)等技术对其进行了详细的研究. 这些结果表明, Ge/Si 界面并不是理想尖锐的, 甚至在 20℃ 的生长温度下就已经能观测到 Si/Ge_n/Si(001) 异质膜中的 Ge 原子分布在好几个 Si

原子层中. 然而, 目前仍缺乏对于 Si/Ge 异质膜中 Ge 原子在 Si 覆盖层中迁移过程的定量了解, 从而难以充分理解 Si/Ge 异质膜的带隙结构.

掠入射荧光模式的 XAFS 技术是一种研究 Ge 原子在 Si 覆盖层中的迁移的有效手段, 能够对元素种类敏感因而能定量地探测到 Si 覆盖层中 Ge 原子的分布情况. 本文使用掠入射荧光 XAFS 技术考察 Si/Ge_n/Si(001) 异质膜中的 Ge 原子周围的局域结构随着不同 Ge 层厚度的变化规律, 研究在 Si 层覆盖过程中所引起的 Ge, Si 原子间相互作用的动力学效应, 并探讨可能的界面作用机理.

2. 实 验

Si/Ge_n/Si(001) 异质膜采用分子束外延装置制备, 生长室基压为 1.3×10^{-7} Pa. 生长过程为: 衬底在 800℃ 下加热去除氧化层, 在 500℃ 下生长约 200 nm 的 Si 缓冲层, 然后在 1000℃ 下退火 20 min. Ge 层是在 400℃ 下生长的, 生长速率为 0.03 nm/s, 厚度分别为 1, 2, 4 和 8 个原子层(ML). 接着 20—22 ML

^{*} 国家自然科学基金(批准号 10375059)、北京国家同步辐射实验室与合肥国家同步辐射实验室合作项目资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: sqwei@ustc.edu.cn

的 Si 层以 0.01 nm/s 的速率生长^[18,19]. 此外,在同样的条件下制备了厚度为 100—200 nm 的 Ge_{0.05}Si_{0.95}, Ge_{0.30}Si_{0.70} 和 Ge_{0.50}Si_{0.50} 合金薄膜以及晶态 Ge 粉末^[17] 被用来作为标准参比样品.

样品的 Ge K 吸收边 XAFS 谱在日本高能物理研究所光子工厂(PF, KEK)的 BL-13B 光束线 XAFS 实验站上室温测量. PF 的储存环能量和最大电流强度分别为 2.5 GeV 和 450 mA, 超导 Wiggler 磁铁的磁场强度为 1.5 T. 单色器为 Si(111) 平面双晶, 通过偏转 Si(111) 平面双晶的平行度, 使通过双晶的光强比最大光强低 30% 来消除高次谐波对 EXAFS 信号的影响. 使用 Si(Li) 固体探测器(SSD) 收集垂直于水平入射光的 10% 立体角内的荧光 X 射线^[18,19]. 从 f_{eff} 7 计算出 Ge 原子的振幅和相移函数^[20], 用于结构参数模拟. EXAFS 实验数据用中国科学技术大学钟文杰和韦世强编写的 NSRLXAFS3.0 软件包进行分析处理^[21].

3. 结 果

Si/Ge_n/Si(001) 异质膜 ($n = 1, 2, 4, 8$ ML) 的 Ge K 边吸收谱经背景扣除, μ_0 拟合, $E \rightarrow k$ 转换后获得的 EXAFS 函数 $\chi(k)$, 以及 Ge_{0.05}Si_{0.95}, Ge_{0.30}Si_{0.70}, Ge_{0.50}Si_{0.50} 合金膜和纯 Ge 粉等几个参考样品的 $\chi(k)$ 曲线如图 1 所示. 由图 1 可见, Ge 层厚度为 1 或 2 ML 的 Si/Ge_n/Si(001) 异质膜的 $\chi(k)$ 曲线与 Ge_{0.05}Si_{0.95} 合金膜的相近似, 显示出 Si 原子为第一近邻散射原子的振荡特征, 即 $\chi(k)$ 曲线在 40 nm⁻¹ 处有最大值并随着 k 值的增大而迅速减弱. 这说明对于 Ge 层厚度较薄的异质膜而言, Ge 原子周围主要被 Si 原子(而非 Ge 原子)所包围. 对于 Si/Ge₄/Si(001) 异质膜, 其 $\chi(k)$ 曲线的振荡频率与 Si/Ge₁/Si(001) 和 Si/Ge₂/Si(001) 异质膜的相近, 但是低 k 部分的振荡幅度有所降低. 这意味着 Ge-Si 的比例随着 Ge 层厚度的增大而降低. 进一步将 Ge 层厚度增大到 8 个原子层, Si/Ge₈/Si(001) 异质膜的 $\chi(k)$ 曲线接近于 Ge_{0.50}Si_{0.50} 合金膜的 $\chi(k)$ 曲线, 表明其 Ge-Ge 配位与 Ge-Si 配位近似于 1:1 的关系.

图 2 为 Si/Ge_n/Si(001) 异质膜 ($n = 1, 2, 4, 8$ ML) 以及晶态 Ge 样品的 Ge K 边 EXAFS 振荡函数加权 2 次后经过快速 Fourier 变换获得的径向结构函数

(RDF) $|FT(k^2\chi(k))|$. 从图中可以看出, Si/Ge₁/Si(001) 异质膜的第一近邻配位峰的中心出现在 $R = 0.196$ nm 处, 低于晶态 Ge 的第一近邻配位峰的中心位置 ($R = 0.218$ nm). 这说明 Si/Ge₁/Si(001) 异质膜中第一近邻大量 Ge-Si 和少量 Ge-Ge 配位的键长比纯 Ge 中第一近邻 Ge-Ge 配位的键长短. 与 Si/Ge₁/Si(001) 异质膜相比, Si/Ge₂/Si(001) 和 Si/Ge₄/Si(001) 异质膜的第一近邻配位峰的中心略向高 R 方向移动, 这表明二者的第一近邻配位的键长略有增加, 也进一步证明随着 Ge 层厚度的增加, Ge-Ge 配位随之增加. 当 Ge 层厚度增加到 8 ML 时, Si/Ge₈/Si(001) 异质膜第一近邻配位峰的中心位置 ($R = 0.204$ nm) 介于 Si/Ge₁/Si(001) 异质膜和纯 Ge 之间, 这表明 Si/Ge₈/Si(001) 异质膜的第一近邻配位的键长进一步增加, 但是仍然比纯 Ge 的第一近邻 Ge-Ge 配位的键长短. 由于 Si/Ge₈/Si(001) 异质膜中的第一近邻 Ge-Ge 配位与 Ge-Si 配位近似于 1:1 的关系, 相对于第一近邻以 Ge-Si 配位为主的 Si/Ge₁/Si(001) 异质膜, 其第一近邻配位峰的中心位置会向纯 Ge (第一近邻全是 Ge-Ge 配位) 的高 R 方向移动.

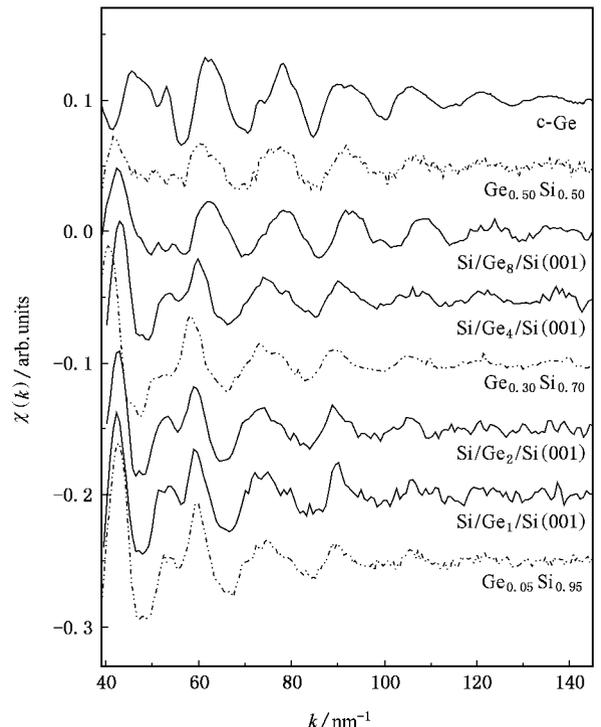


图 1 Si/Ge_n/Si(001) 异质膜 ($n = 1, 2, 4, 8$ ML), Ge_{0.05}Si_{0.95}, Ge_{0.30}Si_{0.70}, Ge_{0.50}Si_{0.50} 合金膜以及晶态 Ge 样品的 Ge K 边 $\chi(k)$ 函数

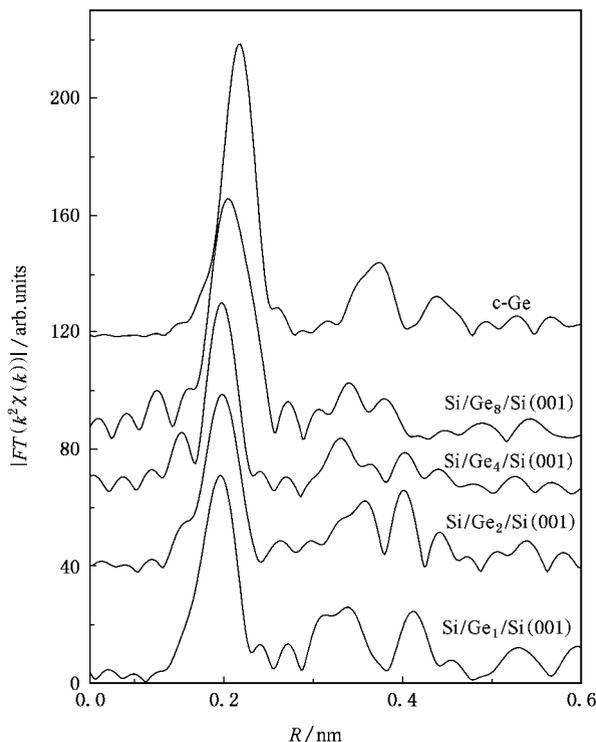


图2 Si/Ge_n/Si(001)异质膜($n = 1, 2, 4, 8$ ML)以及晶态 Ge 样品的 Ge K 边径向结构函数

为了获取 Si/Ge_n/Si(001)异质结薄膜($n = 1, 2, 4, 8$ ML)以及晶态 Ge 样品中 Ge 原子最近邻配位的结构参量,对 EXAFS 信号进行实验曲线拟合^[21],具体描述与文献[22, 23]相同,拟合结果如图 3 所示,得到的结构参量列于表 1 中.

表 1 Si/Ge_n/Si(001)异质结薄膜($n = 1, 2, 4, 8$ ML)以及晶态 Ge 样品中 Ge 原子最近邻配位的结构参量(x 表示第一配位壳层中的 Ge-Ge 配位所占的比例)

样品	$x/\%$	配位原子	N	R/nm	σ^2/nm^2
Si/Ge _n /Si(001) $n = 1$ ML	8	Ge-Ge	0.3(3)	0.240(5)	0.000039(7)
		Ge-Si	3.7(2)	0.237(5)	0.000039(5)
Si/Ge _n /Si(001) $n = 2$ ML	13	Ge-Ge	0.5(3)	0.243(3)	0.000033(9)
		Ge-Si	3.5(3)	0.238(4)	0.000035(5)
Si/Ge _n /Si(001) $n = 4$ ML	33	Ge-Ge	1.3(1)	0.242(2)	0.000033(9)
		Ge-Si	2.7(3)	0.238(3)	0.000033(9)
Si/Ge _n /Si(001) $n = 8$ ML	55	Ge-Ge	2.2(2)	0.242(2)	0.000033(9)
		Ge-Si	1.8(3)	0.238(4)	0.000039(7)
单晶 Ge	—	Ge-Ge	4.0(2)	0.243(1)	0.000037(3)
Ge _n /Si(001) $n = 1$ ML ^{a)}		Ge-Ge	0.9	0.251	
		Ge-Si	2.6	0.240	
(Ge _n Si _n) ₂ $n = 4$ ML ^{b)}		Ge-Ge	1.8	0.242	
		Ge-Si	2.2	0.238	

a) 文献[27]; b) 文献[19]

4. 讨 论

从表 1 的结果可以看出,随着 Ge 层厚度从 1 ML 增加到 2, 4 和 8 ML, Si/Ge_n/Si(001) 异质膜第一近邻 Ge-Ge 配位的平均配位数由 0.3 增加到 0.5, 1.3 和 2.2. 与 Oyanagi 等人^[24]同在 400°C 下 MBE 制备的未覆盖 Si 的 Ge₁/Si(001) 异质膜($N_{\text{Ge-Ge}} = 0.9, N_{\text{Ge-Si}} = 2.6$)相比, Si/Ge₁/Si(001) 异质膜($N_{\text{Ge-Ge}} = 0.3$)的第一近邻 Ge-Ge 配位在总配位中所占的比例小得多. 由于二者具有相同的 Ge 层厚度和生长温度,在 Ge-on-Si 界面的 Ge-Si 混合程度应该是一致的,因此 Si/Ge₁/Si(001) 异质膜中的 Ge-Si 配位不会只来源于生长过程中 Ge 原子与 Si 衬底之间的“位交换”,而是更多地来源于 Si 覆盖过程. 另外,根据在 400°C 的生长温度下 Ge 原子向 Si 原子中热扩散的系数^[25-27],可以计算出在此温度下 Ge 原子通过扩散进入 1 ML 厚的 Si 覆盖层约需要 10 h, 这一时间比生长 Si 覆盖层所用时间(约 5 min)高两个数量级. 因此在 Si 覆盖层生长过程中 Ge 原子扩散进入 Si 覆盖层中的量非常少,热扩散带来的 Ge-Si 混和效应可以忽略不计.

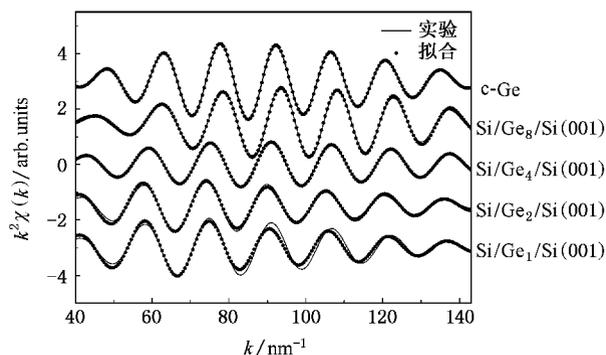


图 3 Si/Ge_n/Si(001)异质膜($n = 1, 2, 4, 8$ ML)以及晶态 Ge 样品的结构参数拟合曲线

对于 Ge 层厚度只有 1 到 2 ML 的 Si/Ge_n/Si(001) 异质膜, Ge 原子周围的 Ge-Ge 配位的比例 x 分别只有 0.08 和 0.13, 表明 Ge 原子周围仅有很少的 Ge 原子近邻, 仍然以 Si 原子近邻为主. 据此可以推断, Si/Ge₁/Si(001) 和 Si/Ge₂/Si(001) 异质膜中不存在纯 Ge 层; 也就是说, 几乎全部 Ge 迁移进入了 Si 覆盖层而形成 GeSi 合金. 这个结论与许多利用 XPS、拉曼谱^[16]、掠入射 X 射线反射^[28] 和 XAFS^[18] 等技术获得的研究结果一致. 当 Ge 层厚度增加到 4 ML 时, Ge-Ge 配位的平均配位数为 1.3, 与我们在文

献 [17] 曾报道的同为 400℃ 生长的 (Ge₄Si₄)₃ 超晶格的值 (1.8) 有显著差异. 文献 [17] 用 XAFS 技术揭示了 Si-on-Ge 界面并非完全原子尖锐, 而是有 1 ML 的 Ge 原子与 Si 原子混合. 然而在 Ge 层厚度同为 4 ML 的 Si/Ge₄/Si(001) 异质膜中, 有超过 1 ML 的 Ge 原子迁移进入 Si 覆盖层, 否则就无法解释如此低的 Ge-Ge 配位数. 在这二个样品中迁移进入 Si 覆盖层的 Ge 原子的量显著不同的原因在于: (1) 在 (Ge₄Si₄)₃ 超晶格中 Ge 原子从 Ge₄ 层向 Si₄ 层的迁移被重复生长的 Ge₄ 层所抑制, 而在 Si/Ge₄/Si(001) 异质膜中则不存在这样的抑制层; (2) 在 (Ge₄Si₄)₃ 超晶格中 Ge 原子在 Si 层中的迁移长度只有 4 ML, 而在 Si/Ge₄/Si(001) 异质膜中 Ge 的迁移长度可以是整个 Si 覆盖层 (22 ML), 因此容许更多的 Ge 原子迁移到 Si 中. 根据文献结果, 在 400℃ 的生长温度下 Ge 原子在 Si 覆盖层中的迁移长度可达几 nm^[16, 29, 30]. 虽然 Ge 原子在 Si 覆盖层中呈梯度分布, 作为一个粗略的近似, 可以假定在整个 Si 覆盖层中形成了均匀的 Ge-Si 合金^[14, 16, 31, 32], 如图 4 所示. 除去 0.5 ML 的 Ge 原子与 Si 衬底的“位置交换”, 由图 4 可以估算出有约 2 ML 的 Ge 原子迁移进入到 Si 覆盖层中. 进一步将 Ge 层厚度增加到 8 ML 导致 Si/Ge₈/Si(001) 异质膜中的第一近邻 Ge-Ge 配位数增加到 2.2. 此时约有 3 ML 的 Ge 原子迁移进入 Si 覆盖层, 较 Si/Ge₄/Si(001) 异质膜增加了 50%. 值得注意的是, 与 Si/Ge₁/Si(001) 和 Si/Ge₂/Si(001) 异质膜相反, Si/Ge₄/Si(001) 和 Si/Ge₈/Si(001) 异质膜中仍然保留有纯 Ge 层. 由于 Ge 与 Si 有 4.2% 的晶格失配, Ge 在 Si 衬底上生长时, 应变能将会随着 Ge 层厚度的增加而不断累积, 从而增加了应变 Ge 层中 Ge 原子的迁移性^[33]. 一旦 Si 覆盖层开始生长, 处于高度应变状态下的 Ge 原子更趋向于迁移进入 Si 覆盖层并形成 Ge-Si 合金, 从而释放 Ge 层中的应变能. 因此生长的 Ge 层越厚, 迁移进入 Si 覆盖层中的 Ge 就越多, 这是 Si/Ge_n/Si(001) 异质膜中 Ge 原子的迁移量高于 Si/Ge₄/Si(001) 异质膜的原因. 综上所述, 对于所有的 Si/Ge_n/Si(001) 异质膜 (n = 1, 2, 4, 8 ML), Ge 原子都具有极强的迁移进入 Si 覆盖层的能力, 并且 Si-on-Ge 界面的混合程度随着 Ge 层厚度的增加而增加.

Ge 原子如此显著的迁移能力可以用两个可能的原因来解释. 一是异质界面的应变导致的“位置选

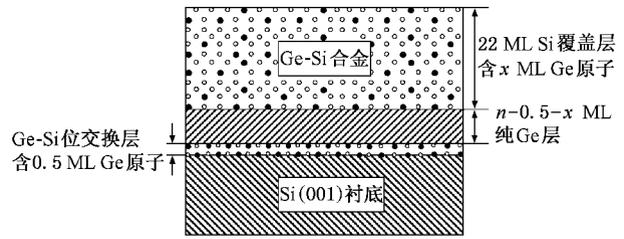


图 4 Si/Ge_n/Si(001) 异质膜结构示意图

择交换”. 韦世强等人^[17]的研究表明对于 400℃ 下覆盖 Si 的 Ge 层, Ge-on-Si 层和 Si-on-Ge 层的 Ge-Si “位置交换”量均为 0.5 ML 左右. 显然只用“位交换”机理不能解释 Si/Ge_n/Si(001) 异质膜 (n = 4, 8 ML) 中 Ge 原子周围如此高的 Si 含量. 二是在 Si 覆盖层生长过程中的 Ge 原子的表面偏析. Ge 原子的表面偏析发生的根本原因在于 Ge 原子具有比 Si 原子更低的表面悬键能, 因此能够显著降低体系的表面能^[1, 34]和表面焓^[31], 而应变能的存在则对这一偏析过程起加剧和加速作用. 根据 Beck 等人^[34]第一性原理的计算, Ge(001) 的表面能为 6600 meV/nm², 比 Si(001) 的表面能 9000 meV/nm² 低 27%. 因此, 当 Si 覆盖层沉积在 Ge 层上时, Ge 原子很容易地偏析到刚刚生长的 Si 层表面, 从而降低整体的表面能. 这一过程随着 Si 层的继续生长而延伸到整个 Si 覆盖层. 值得注意的是, Ge 原子的迁移也依赖于生长温度. 根据 Godbey 等人^[35]的 X 射线光电子谱 (XPS) 和次电子质谱分析 (SIMS) 的结果, 最大的迁移长度 (10.0 nm) 出现在 370℃, 接近于 Si/Ge_n/Si(001) 异质膜的生长温度. 综上所述, 我们认为 Ge 原子的表面偏析是 Si/Ge_n/Si(001) 异质膜 (n = 1, 2, 4, 8 ML) 中 Ge 原子迁移效应的主要原因.

5. 结 论

用掠入射荧光 XAFS 方法研究了在 400℃ 的温度下分子束外延生长的 Si/Ge_n/Si(001) 异质结薄膜 (n = 1, 2, 4, 8 ML), XAFS 结果表明在所有的异质结薄膜中都存在强烈的 Ge 原子向 Si 覆盖层迁移的效应. 对于 Ge 原子层厚度为 1 ML 和 2 ML 的异质结薄膜, Ge 原子主要被 Si 原子所包围, 不存在纯 Ge 层, 几乎全部 Ge 原子 (0.5 ML 和 1.5 ML) 都迁移进入了 Si 覆盖层而形成 GeSi 合金. 随着 Ge 原子层的厚度增加到 4 ML, 第一近邻配位壳层中的 Ge-Ge 配位和 Ge-Si 配位的配位数分别为 2.7 和 1.3, 大约有 2 ML

的 Ge 原子与 Si 覆盖层混合. 甚至对于 Ge 原子层厚度为 8 ML 的异质结薄膜, 第一近邻配位壳层中的 Ge-Ge 配位占的比例只有 55%, 并且有约 3 ML 的 Ge 原子迁移进入 Si 覆盖层. 我们认为在 Si 覆盖层的生长过程中 Ge 原子的迁移效应主要是由于具有大表面迁移率的 Ge 原子发生了表面偏析, 从而降低了 Si

覆盖层的表面能以及 Ge 层的应变能.

致谢 感谢日本高能物理研究所光子工厂提供 XAFS 测量的用光时间. 日本国家产业技术综合研究所的 H. Oyanagi 教授在样品制备和实验测量方面提供了许多帮助, 在此表示由衷的感谢.

- [1] Brunner K 2002 *Rep. Prog. Phys.* **65** 27
- [2] Abstreiter G, Brugger H, Wolf T, Jorke H J 1985 *Phys. Rev. Lett.* **54** 2441
- [3] Lee M L, Fitzgerald E A, Bulsara M T, Currie M T, Lochtefeld A 2005 *J. Appl. Phys.* **97** 011101
- [4] Fritz K E, Randall B A, Fokken G J, Degerstrom M J, Lorscheid M J, Prairie J F, Amundsen E L H, Schreiber S M, Gilbert B K, Greenberg D R, Joseph A 2003 *Inter. J. of High Speed Elec. and Sys.* **13** 221
- [5] Marshall P, Carls M, Campbell A, Ladbury R, Reed R, Marshall C, Currie S, McMorro D, Buchner S, Seidleck C, Riggs P, Fritz K, Randall B, Gilbert B 2004 *IEEE Trans. on Nuclear Science* **51** 3457
- [6] Abstreiter G 1998 *Semicond. Semimet.* **49** 37
- [7] Ma L, Gao Y, Wang C L 2004 *Chin. Phys.* **13** 1114
- [8] Yang H G, Shi Y, Lu J, Pu L, Zhang R, Zheng Y D 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1211 [杨红官、施毅、闫锦、濮林、张荣、郑有 2004 物理学报 **53** 1211]
- [9] Deng N, Chen P Y, L Z J 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 3136 [邓宁、陈培毅、李志坚 2004 物理学报 **53** 3136]
- [10] Lee M L, Leitz C W, Cheng Z, Pitera A J, Langdo T, Currie M T, Taraschi G, Fitzgerald E A, Antoniadis D A 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 3344
- [11] Lee M L, Fitzgerald E A 2004 *J. Appl. Phys.* **95** 1550
- [12] Spencer B, Voorhees P W, Tersoff J 2001 *Phys. Rev. B* **64** 235318
- [13] Huang L, Liu F, Lu G H, Gong X G 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 016103
- [14] Tamagawa T, Shintani T, Ueba H, Tatsuyama C, Nakagawa K, Miyao M 1994 *Thin Solid Films* **237** 282
- [15] Nakajima K, Hosaka N, Hattori T, Kimura K 2002 *Nucl. Instrum. Meth. B* **190** 587
- [16] Lu Z H, Baribeau J M, Lockwood D J 1994 *J. Appl. Phys.* **76** 3911
- [17] Wei S Q, Oyanagi H, Sakamoto K, Takeda Y, Pearsall T P 2000 *Phys. Rev. B* **62** 1883
- [18] Oyanagi H, Sakamoto K, Sakamoto T 1992 *Jpn. J. Appl. Phys.* **S 32-1** 119
- [19] Oyanagi H, Sakamoto T, Sakamoto K, Matsushita T, Yao T, Ishiguro T 1988 *J. Phys. Soc. Japan* **57** 2086
- [20] Rehr J J, Zabinsky S I, Albers R C 1992 *Phys. Rev. Lett.* **38** 3397
- [21] Zhong W J, Wei S Q 2001 *J. Univ. Sci. Tech. China* **31** 328 [钟文杰、韦世强 2001 中国科学技术大学学报 **31** 328]
- [22] Yan W S, Yin S L, Fan J W, Li Y Z, Liu W H, Hao L Y, Pan Z Y, Wei S Q 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5707 [闫文盛、殷世龙、范江玮、李玉芝、刘文汉、郝绿原、潘志云、韦世强 2005 物理学报 **54** 5707]
- [23] Qi Z M, Shi C S, Wang Z, Wei Y G, Xie Y N, Hu T D, Li F L 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1318 [戚泽明、施朝淑、王正、魏亚光、谢亚宁、胡天斗、李福利 2001 物理学报 **50** 1318]
- [24] Oyanagi H, Sakamoto K, Shioda R 1995 *Phys. Rev. B* **52** 5824
- [25] Milman V, Jesson D E, Pennycook S J, Payne M C, Lee M H, Stich I 1994 *Phys. Rev. B* **50** 2663
- [26] Mo Y W, Lagally M G 1991 *Surf. Sci.* **248** 313
- [27] Tan P H, Bougeard D, Abstreiter G, Brunner K 2004 *Appl. Phys. Lett.* **84** 2632
- [28] Baribeau J M, Lockwood D J, Headrick R L 1995 *J. Electron. Mater.* **24** 341
- [29] Fukatsu S, Fujita K, Yaguchi H, Shiraki Y, Ito R 1991 *Appl. Phys. Lett.* **59** 2103
- [30] Godbey D J, Ancona M G 1998 *Surf. Sci.* **395** 60
- [31] Kelires P C, Tersoff J 1989 *Phys. Rev. Lett.* **63** 1164
- [32] Weakliem P C, Carter E A 1992 *Phys. Rev. B* **45** 13458
- [33] Oyanagi H, Sakamoto K, Shioda R, Sakamoto T 1994 *Jpn. J. Appl. Phys. Part 1* **33** 3545
- [34] Beck M J, Walle A, Asta M 2004 *Phys. Rev. B* **70** 205337
- [35] Godbey D J, Lill J V, Deppe J, Hobart K D 1994 *Appl. Phys. Lett.* **65** 711

Local structures of Si/Ge_n/Si(001) hetero-structure films studied by grazing incidence fluorescence X-ray absorption fine structure *

Pan Zhi-Yun Sun Zhi-Hu Xie Zhi Yan Wen-Sheng Wei Shi-Qiang[†]

(National Synchrotron Radiation Laboratory , University of Science & Technology of China , Hefei 230029 , China)

(Received 7 July 2006 ; revised manuscript received 22 September 2006)

Abstract

The local structures around Ge atoms in the Si/Ge_n/Si(001) hetero-structure films (consisting of 1 , 2 , 4 and 8 monolayers) prepared by molecular beam epitaxy at 400°C have been investigated by grazing incidence fluorescence X-ray absorption fine structure (XAFS). The results show that for the Si/Ge₁/Si(001) or Si/Ge₂/Si(001) hetero-structure film , the Ge atoms are dominantly surrounded by Si atoms as the nearest neighbor. For the Si/Ge₄/Si(001) hetero-structure film , the coordination environment around Ge atoms is close to that of Si_{0.70}Ge_{0.30} alloy. Even for the Si/Ge₈/Si(001) hetero-structure film , the fraction of Ge-Ge coordination pair in the first shell is only 55% . This suggests that under the growth temperature of 400°C , the Ge atoms have a strong ability to migrate into the Si capping layer. With the thickness of Ge layer increasing from 1 to 2 , 4 and 8 ML , the amount of migrated Ge atoms increases from about 0.5 to 1.5 , 2.0 and 3.0 nominal ML. We consider that the migration of Ge atoms during the growth of the Si cap is mainly attributed to the surface segregation of Ge atoms , which leads to the decrease in surface energy as well as strain energy in the Ge layer.

Keywords : XAFS , Si/Ge_n/Si(001) hetero-structure film , migration effect

PACC : 6110 , 6855 , 6822

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10375059) and the Cooperation Program between BSRF and NSRL.

[†] Corresponding author. E-mail : sqwei@ustc.edu.cn