

УДК 621.372

ОСОБЕННОСТИ КОНКУРИРУЮЩЕГО ЗАРОДЫШЕОБРАЗОВАНИЯ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК И НАНОПОР В ТРЕХКОМПОНЕНТНОЙ СИСТЕМЕ Si-Ge-C

К.М. ГАМБАРЯН, В.М. АРУТЮНЯН, А.К. СИМОНЯН, Л.Г. МОВСЕСЯН

Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 14 марта 2012 г.)

Для количественного изучения особенностей выращивания и механизма зародышеобразования квантовых точек (КТ), нанопор и совместных структур КТ–нанопор в трехкомпонентной системе Si-Ge-C использована континуальная модель эластичности. Найдена критическая концентрация углерода $x = 0.08$ для $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ и $y = 0.033$ для $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_y\text{C}_y$, при концентрации германия $x = 0.467$, соответственно, когда механизм роста меняется от зародышеобразования КТ к формированию нанопор. Показано, что увеличение концентрации углерода в бинарной системе SiC и концентрации германия в трехкомпонентной системе SiGeC приводит к уменьшению критического размера КТ. Вычислена и изучена свободная энергия смешения трехкомпонентной системы $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_y\text{C}_y$, а также построено ее 3D схематическое изображение. Показано, что внедрение углерода в Si и Ge до фоновой примесной концентрации энергетически предпочтительно, что объясняет экспериментально обнаруженное “загрязнение” кристаллов кремния и германия углеродом во время роста из графитного контейнера.

1. Введение

В настоящее время наиболее перспективными направлениями с точки зрения создания новых материалов и приборов с уникальными свойствами являются разработка технологий создания новых полупроводниковых наноструктур и изучение их физических свойств. Постоянно возрастающий интерес именно к полупроводниковым наноструктурам, в первую очередь, обусловлен существованием широкого спектра возможностей для управления свойствами полупроводников. Известно, что радикального изменения их свойств можно достичь путем варьирования состава полупроводниковых твердых растворов, изменения концентрации и типа примесей, изменением внешних условий и т.д. Ограничение движения свободных носителей в одном или нескольких направлениях, приводящее к эффекту размерного квантования, открывает дополнительную возможность эффективного управления свойствами приборов на основе наноструктур путем изменения их размеров [1-4]. Модифицированная плотность состояний квантовых точек (КТ), нанопроволок и совместных структур КТ–нанопоры приводит к существенному улучшению рабочих оптоэлектронных параметров таких полупроводниковых приборов, как лазеры, фотодетекто-

ры и т.д. Такие наноструктуры могут быть изготовлены с использованием нанолитографии или методом самоорганизации – методом Странски–Крастанова, который в последнее время является наиболее часто используемым. Релаксация эластичного (деформационного) напряжения, как принцип зародышеобразования, является основным механизмом при формировании наноструктур в таких полупроводниковых материалах, как соединения III–V и их твердые растворы, SiGe, SiC и т.д. В последнем случае имеется большое рассогласование параметров решетки SiC по сравнению с Si (–20%) и C(алмаз) (+22%). Карбид кремния проявляет также комплексные деформационно–управляемые поверхностные реконструкции, ведущие к самоорганизованному росту кремниевых и металлических нанопроволок, имеющих уникальные характеристики [5]. В зависимости от условий выращивания эластичное (деформационное) напряжение может релаксироваться с образованием квантовых проволок, КТ или даже уникальных пар КТ–нанопоры [6-8]. Высота островка и глубина нанопоры могут быть больше, чем средняя толщина слоя смачивания. Это означает, что во время роста происходит также перенос значительной массы из подложки к островкам [9]. Экспериментальные результаты показывают, что поверхностная морфология существенно зависит от условий роста и материала матрицы (подложки). На основе атомистической модели показано, что изменение энергии начального формирования может быть как отрицательным, так и положительным, в зависимости от знака несоответствия постоянных решеток подложки и смачиваемого слоя. Энергия начального формирования отрицательна при сжатом (вогнутом) напряжении рассогласования и определенно положительна при растянутом (выпуклом). Этот вывод противоречит классической модели, где начальная энергия всегда положительна и независима от знака несоответствия. В зависимости от материала и режима выращивания размеры нанопор и островков Si, Ge и SiGe лежат в области 5–50 нм в диаметре и 1.5–10 нм в высоту [10,11]. Экспериментально показано также, что внедрение углерода в систему SiGe приводит к уменьшению толщины смачивающего слоя и размеров КТ [11]. Следует также отметить, что твердые растворы в системе Si-Ge-C используются при создании быстродействующих, мощных и высокотемпературных биполярных и полевых транзисторов [5-8], а также других важных полупроводниковых приборов на основе наноструктур, которые впоследствии могут быть легко проинтегрированы в промышленную микро- и наноэлектронику.

В данной работе нами используется континуальная модель эластичности для количественного изучения особенностей роста и механизма зародышеобразования КТ, нанопор и совместных структур КТ–нанопоры в трехкомпонентной системе SiGeC.

2. Вычисление полной энергии совместных структур КТ–нанопоры в системе SiGeC

Трехкомпонентная система SiGeC может быть использована как тестовый материал для изучения механизма и закономерностей зародышеобразова-

ния КТ, нанопор и совместных структур КТ–нанопоры. Соответствующее изменение второго и третьего компонента позволяет обеспечить необходимый знак рассогласования, т.е. растягивающее или сжимающее напряжение несоответствия. В первом случае эластично напряженный смачивающий слой будет релаксировать образованием КТ, а во втором случае, наоборот, формированием нанопор. Для исследования конкурирующего механизма роста мы предполагаем, что поверхность имеет только дискретную ориентацию и, следовательно, нами будет рассматриваться только один угол зародышеобразования. Для простоты также будет предположено, что островки SiGeC имеют форму усеченной пирамиды, как это схематически представлено на рис.1. Для такой сложной системы мы также предполагаем, что трехкомпонентные островки свободны от дислокации и имеют однородный состав.

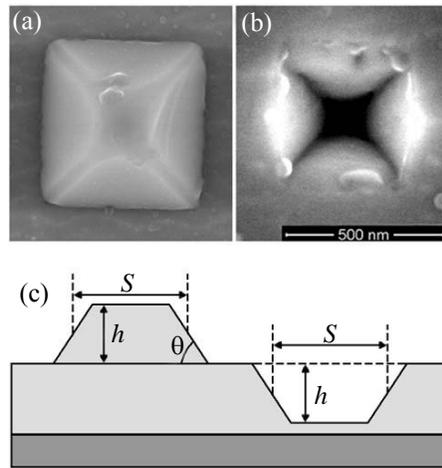


Рис.1. Изображение сканирующего электронного микроскопа а) пирамиды и б) нанопоры квазитрехкомпонентного состава InAsSbP [3]; в) схематический вид поперечного сечения островка и нанопоры.

Для количественного анализа механизма зародышеобразования в качестве базового подхода мы используем модель континуальной эластичности, предложенной Дж. Терсоффом из исследовательского центра IBM [1]. Полная свободная энергия для формирования точки или нанопоры равна $E = E_s + E_R$, где E_s и E_R – изменение поверхностной свободной энергии и уменьшение энергии деформационного напряжения за счет эластичной релаксации, соответственно. Минимизация полной свободной энергии относительно формы островка для фиксированного объема дает $s = t = h \cot \theta$, где s , t , h , и θ – соответственно, длина, ширина, высота (глубина) и контактный угол, как это изображено на рис.1с, а энергия определяется следующим выражением:

$$E = 4\Gamma V^{2/3} \tan^{1/3} \theta - 6cV \tan \theta \quad (1)$$

где $\Gamma = \gamma_e \operatorname{cosec} \theta - \gamma_s \cot \theta$. Для кристаллов с кубической симметрией имеем $\gamma_s =$

$(1/3)(\varepsilon^2(C_{11} + C_{44})d_{wet})$, $c = \sigma_b^2(1-\nu)/2\pi\mu$, $\sigma_b = \varepsilon(C_{11} + C_{44})$. Здесь γ_s и γ_e – поверхностная свободная энергия на единицу площади для нормальной ориентации и косоугольной грани, соответственно, $\varepsilon = \Delta a/a$ – коэффициент рассогласования решетки (деформационное напряжение), d_{wet} – толщина смачивающего слоя, $\nu = \lambda/2(\lambda + \mu)$ коэффициент Пуассона, μ , λ , и C_{ij} – модули сдвига (коэффициенты Ламме) и упругости подложки.

Чтобы получить аналитическое выражение для зависимости толщины смачивающего слоя от деформации для трехкомпонентной системы SiGeC, мы провели математическую аппроксимацию экспериментальных данных. В расчетах мы использовали следующие выражения для d_{wet} : (i) если деформационное напряжение положительно, то $d_{wet} = 0.05\varepsilon^{-3/2}$ при $\varepsilon > 0.03$ [12] и $d_{wet} = 24.181e^{-31.034\varepsilon}$ при $0 < \varepsilon < 0.03$ (точность приближения $R^2 = 0.9635$), (ii) если деформационное напряжение отрицательно, то $d_{wet} = 0.15|\varepsilon|^{-3/2}$ при $|\varepsilon| > 0.035$ [12] и $d_{wet} = 45.162e^{-23.03|\varepsilon|}$ при $0 < |\varepsilon| < 0.035$ (точность приближения $R^2 = 0.9934$).

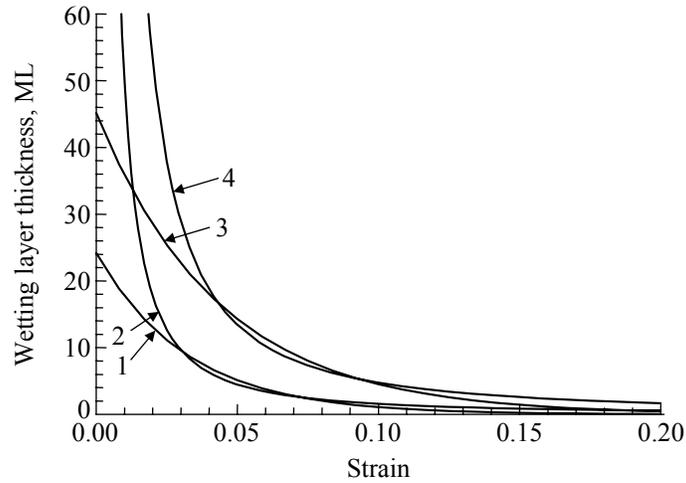


Рис.2. Зависимость толщины смачивающего слоя от деформации: (1) $d_{wet} = 24.181e^{-31.034\varepsilon}$ мс, $\varepsilon > 0$; (2) $d_{wet} = 0.05\varepsilon^{-3/2}$ мс, $\varepsilon > 0$; (3) $d_{wet} = 45.162e^{-23.03|\varepsilon|}$ мс, $\varepsilon < 0$; (4) $d_{wet} = 0.15|\varepsilon|^{-3/2}$ мс, $\varepsilon < 0$.

Зависимость толщины смачивающего слоя (в монослоях) от деформации графически показана на рис.2 для положительных и отрицательных деформационных напряжений, которые мы использовали в расчетах. Учитывая вышеупомянутую зависимость толщины смачивающего слоя от деформации, выражение для полной энергии окончательно можно представить в следующем виде:

$$E = 4 \left(\gamma_e \operatorname{cosec} \theta - \frac{1}{2} \varepsilon^2 (C_{11} + C_{44}) d_{wet} \cot \theta \right) V^{\frac{2}{3}} \tan^{\frac{2}{3}} \theta - 3\varepsilon^2 (C_{11} + C_{44})^2 \frac{(1-\nu)}{\pi\mu} V \tan \theta \quad (2)$$

Численные значения C_{11} и C_{44} , используемые для островков SiGeC, были вычислены линейным приближением соответствующих параметров, извест-

ных для отдельных компонентов. Формирование островка или нанопоры снижает энергию, когда структура относительно велика. Для достижения стабильной геометрии островков сначала должен преодолеть энергетический барьер E^* , при достижении критического объема V^* . Критическая энергия и критический объем выражаются в виде

$$E^* = \frac{1}{3} \left(4\gamma_e \operatorname{cosec} \theta - 2\varepsilon^2 (C_{11} + C_{44}) d_{wet} \cot \theta \right)^3 \frac{4\pi^2 \mu^2}{\left(9\varepsilon^2 (C_{11} + C_{44})^2 (1-\nu) \right)^2} \cot \theta, \quad (3)$$

$$V^* = \left(\frac{8}{9} \frac{\gamma_e \pi \mu}{\varepsilon^2 (C_{11} + C_{44})^2 (1-\nu) \sin \theta} - \frac{4}{9} \frac{\pi \mu d_{wet} \cot \theta}{(C_{11} + C_{44}) (1-\nu)} \right)^3 \cot^2 \theta. \quad (4)$$

3. Результаты и обсуждение

Выражения (3) и (4) показывают зависимости полной критической энергии островка от объема, и критического объема от деформационного напряжения или состава твердого раствора, соответственно. Результаты расчетов для бинарной системы SiGe представлены на рис.3 при $\gamma_e = 8 \times 10^{-6}$ Дж/см² [13], $\mu = 7.14 \times 10^4$ Дж/см³, $\nu = 0.342$, $C_{11} = 15.31 \times 10^4$ Дж/см³, $C_{44} = 7.71 \times 10^4$ Дж/см³ и $\theta = 0.192$ рад (11°).

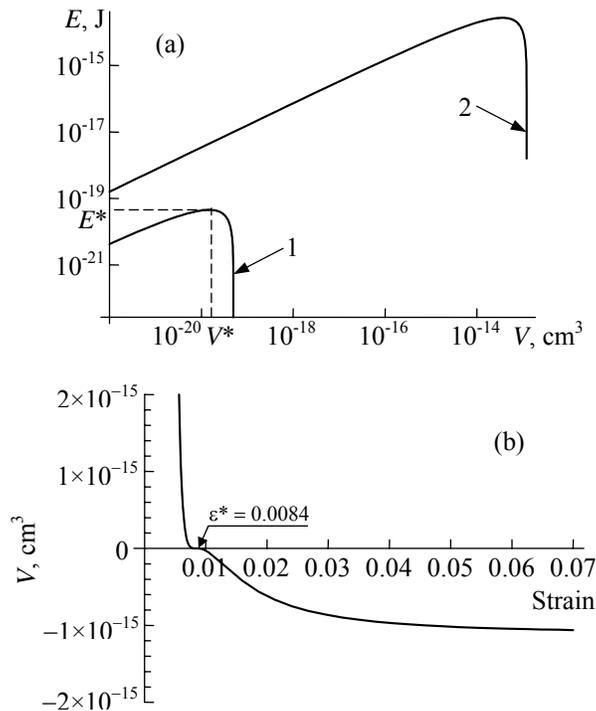


Рис.3. Зависимости общей энергии от объема при концентрации Ge (1) $x = 0.2$ и (2) $x = 0.1$ (а) и б) критического объема от деформационного напряжения для наноструктур $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$.

Зависимости полной энергии от объема для КТ и нанопор в системах SiC и SiGeC при разных значениях концентрации углерода, рассчитанные при $\gamma_e = 1.74 \times 10^{-4}$ Дж/см² [14], $\mu = 7.73 \times 10^4$ Дж/см³, $\nu = 0.34$, $C_{11} = 16.53 \times 10^4$ Дж/см³, $C_{44} = 8.32 \times 10^4$ Дж/см³, $\theta = 0.785$ рад (45°) и $\gamma_e = 8 \times 10^{-6}$ Дж/см², $\mu = 7.25 \times 10^4$ Дж/см³, $\nu = 0.33$, $C_{11} = 15.09 \times 10^4$ Дж/см³, $C_{44} = 7.84 \times 10^4$ Дж/см³, $\theta = 0.192$ рад (11°), представлены на рис.4. Заметим, что расчеты осуществлены для модификации 3С–SiC.

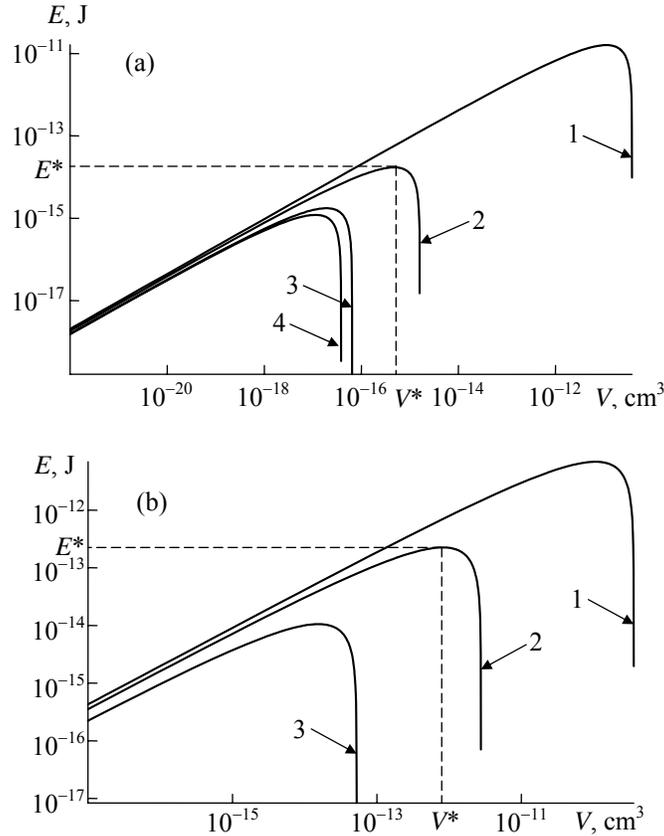


Рис.4. Зависимости энергий наноструктур в системах $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ и $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ от объема при разных концентрациях углерода: (а) 1) $x = 0.01$, 2) $x = 0.05$, 3) $x = 0.08$, 4) $x = 0.085$; (б) 1) $y = 0.05$, 2) $y = 0.045$, 3) $y = 0.04$.

Зависимости критического объема от концентрации углерода для систем SiC и SiGeC приведены на рис.5а и б, соответственно. Отметим также, что зависимости критической энергии от концентрации углерода имеет аналогичное качественное поведение. Как видно из рис.5, знак V^* изменяется при определенной критической концентрации. Это означает, что при деформации $\varepsilon = \varepsilon^*$, которая соответствует некой критической концентрации углерода, режим роста меняется от зародышеобразования КТ к образованию нанопор. Очевидно, что

при малых несоответствиях кристаллических решеток, т.е. при малых концентрациях твердого раствора ($\varepsilon < \varepsilon^*$, $V^* > 0$), преобладает механизм объемного зародышеобразования кристалла. Однако, при $\varepsilon > \varepsilon^*$, когда энергетический барьер (и критический объем) становится отрицательным, большое несоответствие приводит к формированию дислокаций, и зародышеобразование нанопор становится энергетически выгодным.

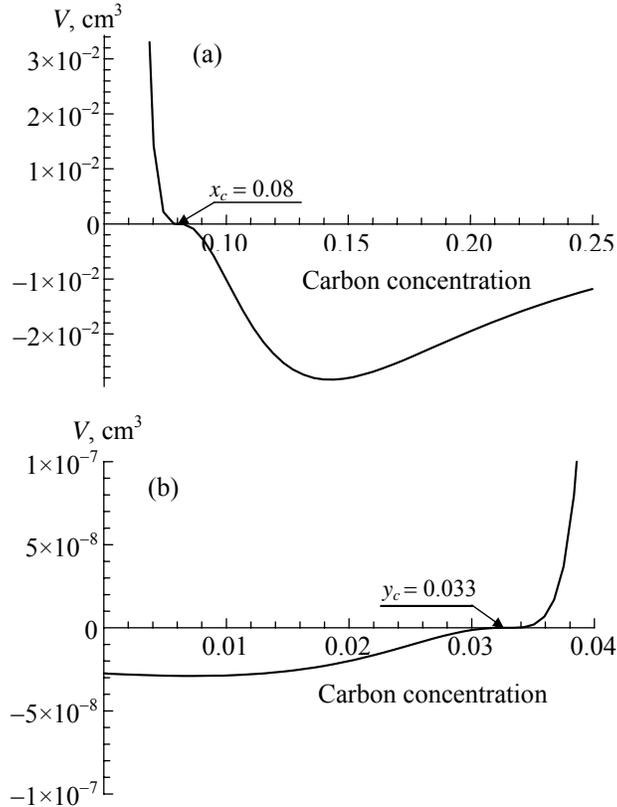


Рис.5. Зависимости критического объема от концентрации для углерода систем (а) $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ и (б) $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$.

Мы рассчитали критическую концентрацию углерода $x = 0.08$ для $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ и $y = 0.033$ для $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ при концентрации германия $x = 0.467$. Противоположный вид зависимостей на рис.5а) и 5б) возникает из-за различных зависимостей деформационного напряжения от концентрации для выпуклых и вогнутых слоев смачивания.

Далее, мы вычислили свободную энергию смешения трехкомпонентной системы $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$, используя следующее соотношение:

$$\Delta F(x, y) = \Delta H - T\Delta S, \quad (5)$$

где T – абсолютная температура, ΔH и ΔS – энтальпия и энтропия смешения, соответственно, которые определяются следующими выражениями [15]:

$$\begin{aligned}
\Delta H(x, y) &= \omega_{\text{Si}}(1-x-y) + \omega_{\text{Ge}}x + \omega_{\text{C}}y + \\
&+ \alpha_{\text{SiGe}}(1-x-y)x + \alpha_{\text{GeC}}xy + \alpha_{\text{SiC}}(1-x-y)y, \\
\Delta S(x, y) &= R\{(1-x-y)\ln(1-x-y) + x\ln x + y\ln y\}
\end{aligned} \tag{6}$$

Здесь ω является суммой энергий взаимодействия первого и второго ближайших соседних атомов, α является параметром псевдобинарного взаимодействия, R – универсальная газовая постоянная [15,16]. Параметр взаимодействия α является характеристическим индексом напряженности несмешиваемости. Согласно модели “дельта-параметра решетки” (DLP), параметр взаимодействия представляется в виде

$$\alpha_{AB} = 4k \left[\frac{1}{2} (a_A^{-2.5} + a_B^{-2.5}) - \left(\frac{a_A + a_B}{2} \right)^{-2.5} \right], \tag{7}$$

где a_A и a_B – постоянные решеток компонентов А и В, а k – некоторая постоянная. Для соединений с кубической симметрией и при относительно малых рассогласованиях параметров решеток k принимается равным 1.15×10^7 кал/(моль $\times\text{\AA}^{2.5}$) [16-18]. Поэтому это значение k нами было использовано только для системы SiGe. Для бинарных систем SiC и GeC, где различие в постоянных решеток компонент твердых растворов существенно большее, мы нашли, что $k = 1.98 \times 10^6$ кал/(моль $\times\text{\AA}^{2.5}$). Зависимости свободной энергии от концентрации для одного моля, при разных температурах в области $T = 700\text{--}1500\text{K}$ для бинарных систем SiGe, SiC и GeC, соответственно, представлены на рис.6. При построении графиков было использовано уравнение (5) с ΔH и ΔS из (6).

Как видно из рис.6, в отличие от системы SiGe, для систем SiC и GeC возникает область несмешиваемости, обусловленная увеличением свободной энергии при увеличении концентрации углерода в твердом растворе. Для систем с большой разницей постоянных решеток большая положительная энтальпия смешения может преодолеть отрицательную энтропию смешения для температур ниже критической, приводя к увеличению свободной энергии. Это означает, что при равновесии неупорядоченный твердый раствор с составом между бимодальными точками, показанными на рис.7, будет распадаться на две отдельные твердые фазы [18].

Из рис.7 очевидно, что внедрение углерода в Si и Ge до фоновой примесной концентрации энергетически предпочтительно (свободная энергия уменьшается), что и объясняет экспериментально обнаруженное “загрязнение” кремния и германия углеродом при выращивании кристаллов из графитового контейнера.

Трехмерный (3D) схематический вид молярной свободной энергии в зависимости от состава трехкомпонентной системы SiGeC при $T = 1500\text{ K}$ и соответствующие изоэнергетические срезы при $T = 1500\text{ K}$ и $T = 1600\text{ K}$ представлены на рис.8 и 9, соответственно.

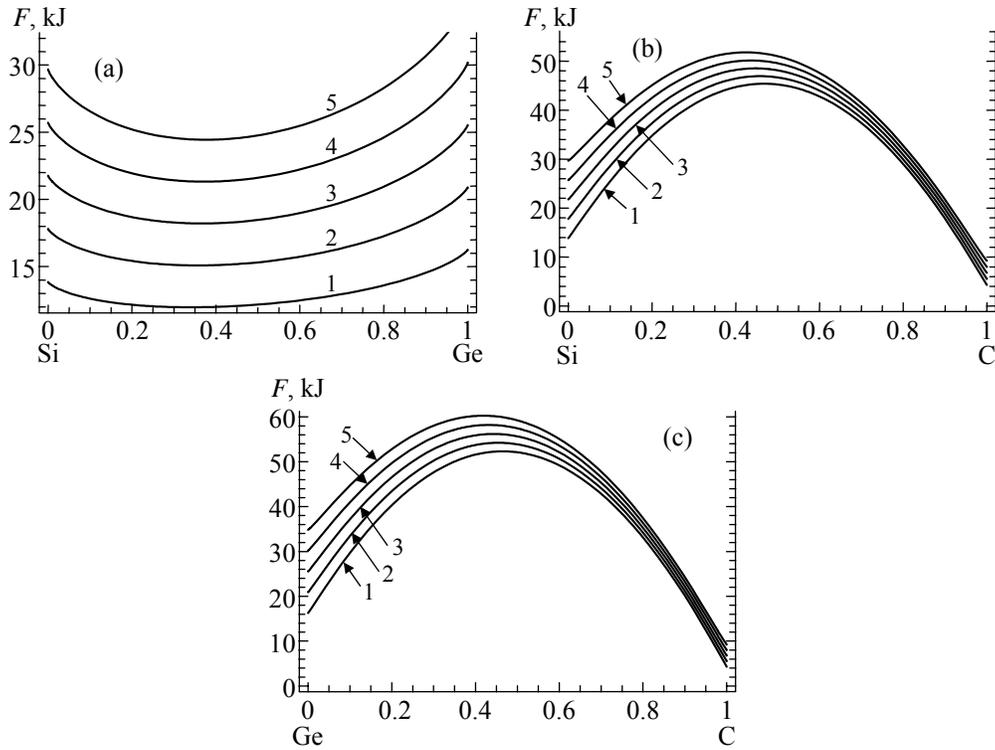


Рис.6. Зависимости свободной энергии от концентрации для одного моля бинарных соединений: а) Si-Ge, б) Si-C и в) Ge-C при (1) $T = 700$ К, (2) $T = 900$ К, (3) $T = 1100$ К, (4) $T = 1300$ К, (5) $T = 1500$ К.

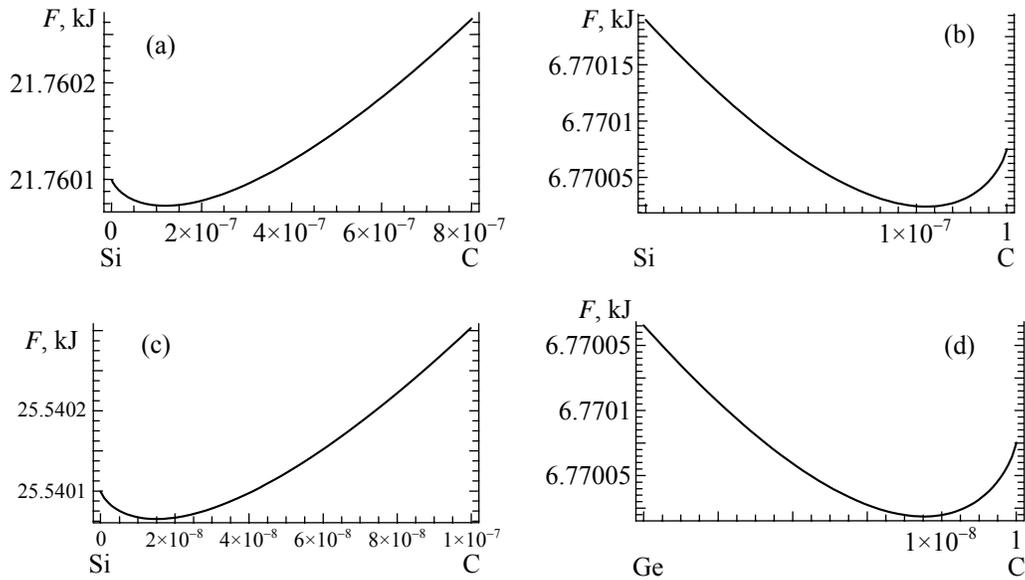


Рис.7. Бинодальные точки (увеличенные в области минимумов) кривых молярной свободной энергии, показанных на рис.6, для систем SiC и GeC вблизи Si (а) и Ge (с) и вблизи C (b, d), при $T = 1100$ К.

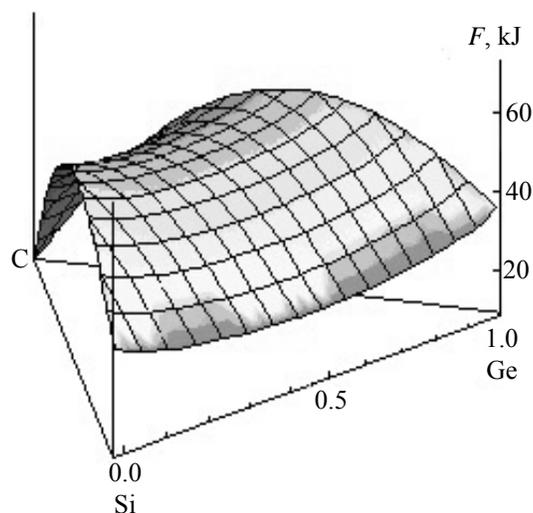


Рис.8. 3D схематический вид молярной свободной энергии трехкомпонентной системы SiGeC при $T = 1500$ К.

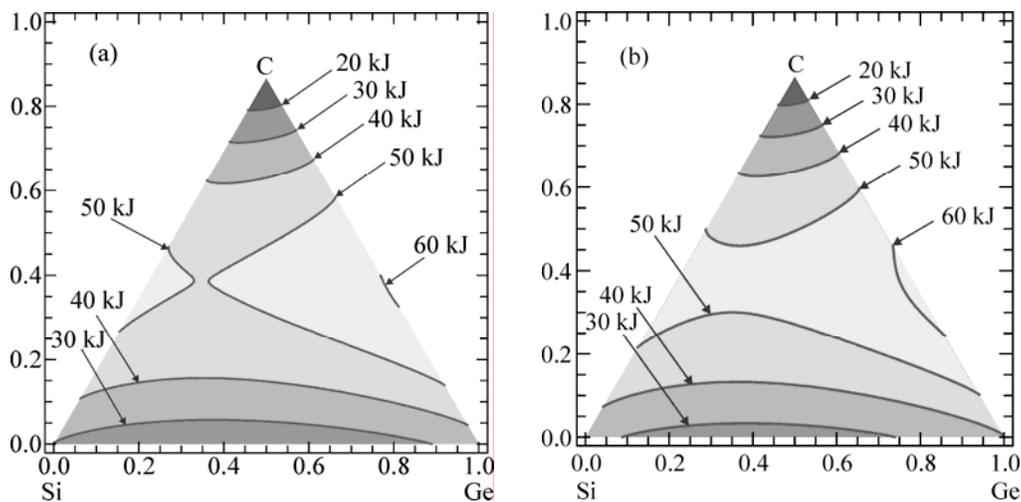


Рис.9. Изоэнергетические срезы молярной свободной энергии трехкомпонентной системы SiGeC при (a) $T = 1500$ К и (b) $T = 1600$ К.

Схематический вид концентрационного треугольника для одного моля трехкомпонентной материальной системы SiGeC приведен на рис.10. Твердые растворы SiGeC с составом вдоль сплошной линии M_4N_4 решеточно согласованы с подложкой Si. Эллипсоидами отмечены области концентраций с положительными и отрицательными знаками несоответствия постоянных решеток. Составы с постоянными значениями несоответствия решеток обозначены линиями, а соответствующие значения деформационного напряжения для каждой линии представлены в приложенной таблице.

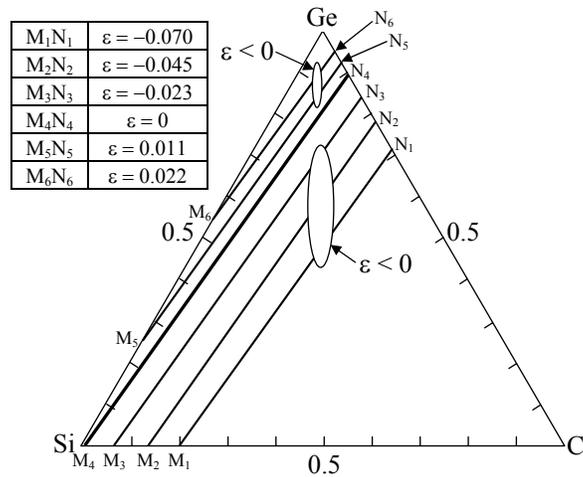


Рис.10. Концентрационный треугольник для трехкомпонентной системы SiGeC.

4. Заключение

Таким образом, континуальная модель эластичности применена для количественного изучения свойств роста и механизма зародышеобразования КТ и нанопор в трехкомпонентной материальной системе SiGeC. Вычисления показали, что знак и величина коэффициента решеточного рассогласования играют важную роль при росте этих напряженных нанообъектов. Показано, что увеличение концентрации углерода в бинарной системе SiC и концентрации германия в трехкомпонентной системе SiGeC приводит к уменьшению критического размера квантовых точек. Вычислены критические значения для деформационного напряжения (состава) в бинарной системе SiC и трехкомпонентной системе SiGeC, когда режим роста меняется от зародышеобразования КТ к формированию нанопор. Вычислена и изучена свободная энергия смешения для трехкомпонентной системы $Si_{1-x-y}Ge_xC_y$. Показано, что внедрение углерода в Si и Ge до фоновой примесной концентрации энергетически предпочтительно, что объясняет экспериментально обнаруженное “загрязнение” углеродом кристаллов кремния и германия во время роста из графитного контейнера. Представленные результаты могут быть использованы при выборе технологических режимов выращивания не только наноструктур, но и эпитаксиальных слоев и объемных монокристаллов в системе Si-Ge-C.

Работа выполнена в рамках исследовательского гранта Армянского Национального Фонда Науки и Образования (ANSEF-2011, Condmatex-2425).

ЛИТЕРАТУРА

1. J.Tersoff, F.K. Le Goues. Phys. Rev. Lett., **72**, 3570 (1994).
2. K.M.Gambaryan, V.M.Aroutiounian, V.G.Harutyunyan. Infrared Phys. Techn., **54**, 114 (2011).
3. K.M.Gambaryan. Nanoscale Res. Lett., **5**, 587 (2010).

4. **V.M.Aroutiounian, K.M.Gambaryan, P.G.Soukiassian.** Surf. Sci., **604**, 1127 (2010).
5. **M.G.Silly, F.Charra, P.G.Soukiassian.** Appl. Phys. Lett., **91**, 223111 (2007).
6. **K.Nishi, H.Saito, S.Sugou, J.S.Lee.** Appl. Phys. Lett., **74**, 1111 (1999).
7. **D.Haft, R.J.Warburton, K.Karrai, et al.** Appl. Phys. Lett., **78**, 2946 (2001).
8. **K.M.Gambaryan, V.M.Aroutiounian, T.Boeck, M.Schulze, P.Soukiassian.** J. Phys. D: Appl. Phys., **41**, 162004 (2008).
9. **H.J.Li, S.C.Moss, B.S.Han, Z.H.Mai.** J. Appl. Phys., **89**, 3700 (2001).
10. **Y.Wakayama, L.V.Sokolov, N.Zakharov, P.Werner, U.Gösele.** App. Surf. Sci., **216**, 419 (2003).
11. **O.G.Schmidt, C.Lange, K.Eberl.** Appl. Phys. Lett., **71**, 16 (1997).
12. **M.Biehl, F.Much, C.Vey.** Int. Series of Numerical Mathematics, **149**, 41 (2005).
13. **K.L.Safonov, V.G.Dubrovskii, N.V.Sibirev, Yu.V.Trushin.** Techn. Phys. Lett., **33**, 490 (2007).
14. **A.Fissel.** J. Crys. Growth, **212**, 438 (2000).
15. **K.Onabe.** NEC Res. Develop., **72**, 1 (1984).
16. **O.S.Emeljanova, S.S.Strelchenko, M.P.Usacheva.** Semiconductors, **43**, 135 (2009).
17. **A.Wakahara, T.Tokuda, X.-Z.Dang, S.Noda, A.Sasaki.** Appl. Phys. Lett., **71**, 906 (1997).
18. **G.B.Stringfellow.** Organometallic Vapor-Phase Epitaxy: Theory and Practice. San Diego, Elsevier, 1999.

GROWTH FEATURES AT COMPETING NUCLEATION OF QUANTUM DOTS AND NANOPITS IN Si-Ge-C TERNARY SYSTEM

K.M. GAMBARYAN, V.M. AROUTIOUNIAN, A.K. SIMONYAN, L.G. MOVSESYAN

The continuum elasticity model is applied to quantitatively investigate the growth features and nucleation mechanism of quantum dots (QDs), nanopits and QDs-nanopits cooperative structures in SiGeC ternary material system. We found the critical carbon concentration of $x = 0.08$ for $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ and $y = 0.033$ for $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$, at germanium concentration $x = 0.467$, respectively, when the growth mode is changed from dot nucleation to nanopit formation. It is shown that the increase of carbon concentration in SiC binary system and germanium concentration in SiGeC ternary system leads to the decrease of QDs critical size. The free energy of mixing for the $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ ternary alloy system is calculated and investigated, and a 3D sketch is plotted. It is demonstrated that incorporation of carbon into Si and Ge up to background impurity concentration is energetically preferable, which explains the experimentally detected “contamination” of silicon and germanium crystals by carbon during the growth from the graphite crucible.