

Abschlussbericht

InP-Elektronik und Substrate

Vorhaben:

“Grundlagen der InP-Kristallzüchtung nach dem Vertical-Gradient-Freeze (VGF) Verfahren“

Förderkennzeichen

01BM163

Berichtszeitraum

01.01.2002 – 31.12.2005

Ausführende Stelle

Institut für Werkstoffwissenschaften
Lehrstuhl der Werkstoffe der Elektrotechnik (WW6)
Kristalllabor (Prof. Dr. Dr. h.c. G. Müller)
Universität Erlangen-Nürnberg

Industriepartner

Freiberger Compound Materials GmbH
Am Junger Löwe Schacht 5
09599 Freiberg

Das in diesem Bericht zugrunde liegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) unter dem Förderkennzeichen 01BM163 gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Autor.

Inhaltsverzeichnis

<u>1. Zusammenfassung</u>	<u>4</u>
<u>2. Einleitung</u>	<u>6</u>
2.1 Motivation.....	6
2.2 Stand der Literatur und Technik.....	7
2.3 Aufgabenstellung.....	10
2.4 Gliederung des Berichts.....	11
<u>3. Modellierung der VGF-Kristallzucht von InP unter Berücksichtigung der Hochdruckbedingungen</u>	<u>13</u>
3.1 Einleitung und Übersicht.....	13
3.2 Beschreibung des numerischen Modells.....	14
3.3 Prozessentwicklung und Optimierung für unterschiedliche Zuchtungsprozesse.....	17
3.4 Verifizierung des numerischen Modells.....	22
3.4.1 Verifizierung durch Temperaturmessungen.....	22
3.4.2 Verifizierung der Ergebnisse der numerischen Simulation durch Dotierstoffstreifenexperimente.....	23
3.5 Einfluss zeitabhängiger Magnetfelder auf die Zucht von InP nach dem VGF-Verfahren.....	27
3.5.1 Das numerische Modell.....	28
3.5.2 Einfluss rotierender Magnetfelder.....	29
3.5.3 Einfluss wandernder Magnetfelder.....	31
3.5.4 Vergleich zum Einfluss rotierender und wandernder Magnetfelder auf die Zucht von InP nach dem VGF-Verfahren.....	33
3.6 3-D Modellierung der industriellen Hochdruckanlage „Kronos“.....	36
<u>4. Anlagenkonzept und Durchführung der Zuchtungsprozesse</u>	<u>38</u>
4.1 Beschreibung charakteristischer Eigenschaften der Zuchtungsanlage und durchgeführter Modifikationen.....	38
4.2 Durchführung der Zuchtungsexperimente.....	44
<u>5. Charakterisierung der gezüchteten Kristalle</u>	<u>51</u>
5.1 Strukturelle Charakterisierung und Bestimmung der mittleren Versetzungsdichte (EPD).....	51
5.2 Charakterisierung der elektrischen Eigenschaften.....	54
5.3 Charakterisierung der Keimkristalle aus eigener Herstellung.....	59
5.4 Diskussion.....	62

<u>6. Auftreten von Kristalldefekten in InP in Abhängigkeit von Züchtungsparametern</u>	<u>64</u>
6.1 Zwillingsbildung und Facettenwachstum	65
6.1.1 Einfluss des axialen Temperaturgradienten	69
6.1.2 Einfluss der Tiegelgeometrie	73
6.1.3 Einfluss des Dotierstoffes auf die Facettenbildung und das Zwillingswachstum	80
6.1.4 Diskussion.....	83
6.2 Versetzungsbildung und polykristallines Wachstum in InP-Kristallen	87
6.2.1 Grundlagen der Versetzungstheorie.....	87
6.2.2 Versetzungstypen in dem Strukturtyp der Zinkblende.....	90
6.2.3 Experimentelle Befunde zur Versetzungsbildung in InP-Kristallen	91
6.2.3.1 Verteilung der Versetzungen auf Testscheiben	92
6.2.3.2 Versetzungsdichte und polykristallines Wachstum	95
6.2.3.3 Versetzungsbildung an der Ankeimposition	97
6.2.3.4. Züchtung versetzungsarmer InP-Kristalle	99
6.2.3.5 Versetzungstypen in InP-Kristallen mit niedriger Versetzungsdichte.....	102
6.2.4 Versetzungsmodellierung	107
6.2.5 Diskussion.....	113
<u>7. Zusammenfassende Diskussion und Ausblick</u>	<u>116</u>
<u>8. Literaturverzeichnis</u>	<u>118</u>

1. Zusammenfassung

Auf Grund der stetig wachsenden Bedeutung der Nachrichten- und Kommunikationstechnik in der modernen Informationsgesellschaft, sowie der ständigen Forderung nach höheren Datenübertragungsraten, steigt der weltweite Bedarf an qualitativ hochwertigen InP Substratkristallen kontinuierlich an.

Nach allgemeiner Einschätzung stellen das vertikale Gradient Freeze (VGF) Verfahren und verwandte Züchtungstechniken die einzige Möglichkeit dar die wachsenden Anforderungen an qualitativ hochwertige Substrate bei einer weiteren Steigerung des Kristalldurchmessers zu erfüllen.

Um den Einfluss der Züchtungsbedingungen auf das Auftreten von Defekten (polykristallines Wachstum, Versetzungen, Zwillinge) zu untersuchen und mit den so gewonnenen Erkenntnissen die Züchtungsprozesse zu optimieren, wurde unter intensiver Nutzung der numerischen Simulation ein umfangreiches Züchtungsprogramm durchgeführt. So wurden folgenden Einflussgrößen in den Züchtungsprozessen variiert:

- strukturelle Qualität der Keimkristalle
- Geometrie des Tiegels (Tiegel mit flachem Boden, herkömmliche Tiegel mit einem Öffnungswinkel von 120° bzw. 160°)
- Art und Konzentration des Dotierstoffes
- axialer Temperaturgradient in Kristall und Schmelze

Bei Untersuchungen zum Einfluss der Qualität der Keimkristalle auf das Auftreten von polykristallinem Wachstum konnte gezeigt werden, dass bei der Verwendung von Tiegeln mit flachem Boden das polykristalline Wachstum nur vermieden werden kann, wenn die Versetzungsdichte (Etch Pit Density) einen kritischen Wert ($EPD < 3000 \text{ cm}^{-2}$) unterschreitet. Bei der Verwendung herkömmlicher konusförmiger Tiegel war die Abhängigkeit von der Qualität der Keime deutlich geringer. Dennoch wurde ein Züchtungsprogramm zur Herstellung hochwertiger Keime ($EPD < 6000 \text{ cm}^{-2}$) für die Züchtung in herkömmlichen Tiegeln durchgeführt.

Bei Untersuchungen zum Facettenwachstum und der Zwillingsbildung in konusförmigen Tiegeln konnte gezeigt werden, dass die, in InP ausgeprägte, Neigung zur Zwillingsbildung auf Facettenflächen stark von der Art und Konzentration des Dotierstoffes abhängt. So steigen die Länge der Facetten und die Neigung zur Zwillingsbildung in folgender Reihenfolge an:

undotiert < Fe-dotiert < S-dotiert.

Für Züchtungsexperimente mit S-dotierter Ausgangsschmelze konnte eine eindeutige Korrelation zwischen Facettenwachstum im Konus und der verwendeten Geometrie des Tiegels festgestellt werden. Für Fe-dotierte Kristalle lassen sich auf Basis der gewonnenen Daten keine eindeutigen Aussagen treffen. Zwar konnte die Länge der kritischen Randfacetten durch eine Erhöhung des axialen Temperaturgradienten reduziert werden, doch war kein Einfluss auf die Neigung zur Zwillingsbildung festzustellen.

Unabhängig von der Dotierung, des axialen Temperaturgradienten oder der verwendeten Geometrie des Tiegels trat die Zwillingsbildung in dem Übergangsbereich von Keimkanal zu Konus auf, was durch die gängige Theorie zur Zwillingsbildung in III-V-Halbleitern erklärt werden kann.

Durch eine geeignete Wahl der Prozessbedingungen konnten einkristalline Scheiben von Fe-dotiertem InP mit einer mittleren EPD $< 1800 \text{ cm}^{-2}$, einem spezifischen Widerstand von $\rho > 10^{-6} \Omega\text{cm}$ und einer homogenen lateralen Dotierstoffverteilung hergestellt werden. Durch eine weitere Modifizierung des Züchtungsaufbaus gelang auch die Herstellung von semiisolierendem Material mit einer mittleren EPD $< 200 \text{ cm}^{-2}$.

Durch den Einsatz der Röntgentopographie (XRT) konnte gezeigt werden, dass in versetzungsarmen InP spannungsinduzierte 60° -Versetzungen nur einen kleinen Anteil an der Gesamtversetzungsdichte stellen. Hingegen konnten mehrere in der Literatur für VGF-InP noch nicht beschriebene Versetzungstypen identifiziert werden.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde auch eine numerische Studie zum Einfluss zeitlich veränderlicher Magnetfelder auf die Züchtung von InP nach dem VGF-Verfahren durchgeführt. Bei dem Vergleich zwischen dem Einfluss rotierender und wandernder Magnetfelder (RMF und TMF) auf die Form der Phasengrenze und die resultierende von Mises Spannung an der Phasengrenze können klare Vorteile für die Anwendung wandernder Magnetfelder festgestellt werden.

Die Vorhersagen zur Versetzungsdichte durch numerische Modellierung, mithilfe eines neu entwickelten Moduls im Softwarepaket CrysVUn, konnten an Testscheiben von InP-Kristallen bestätigt werden.