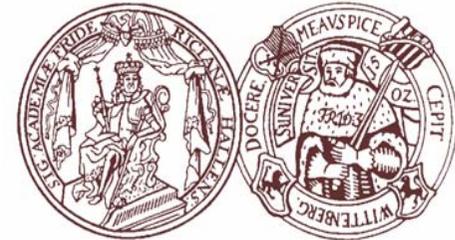


# Das Studium von Kristalldefekten in Halbleitern mit Hilfe der Positronenannihilation

## R. Krause-Rehberg

Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

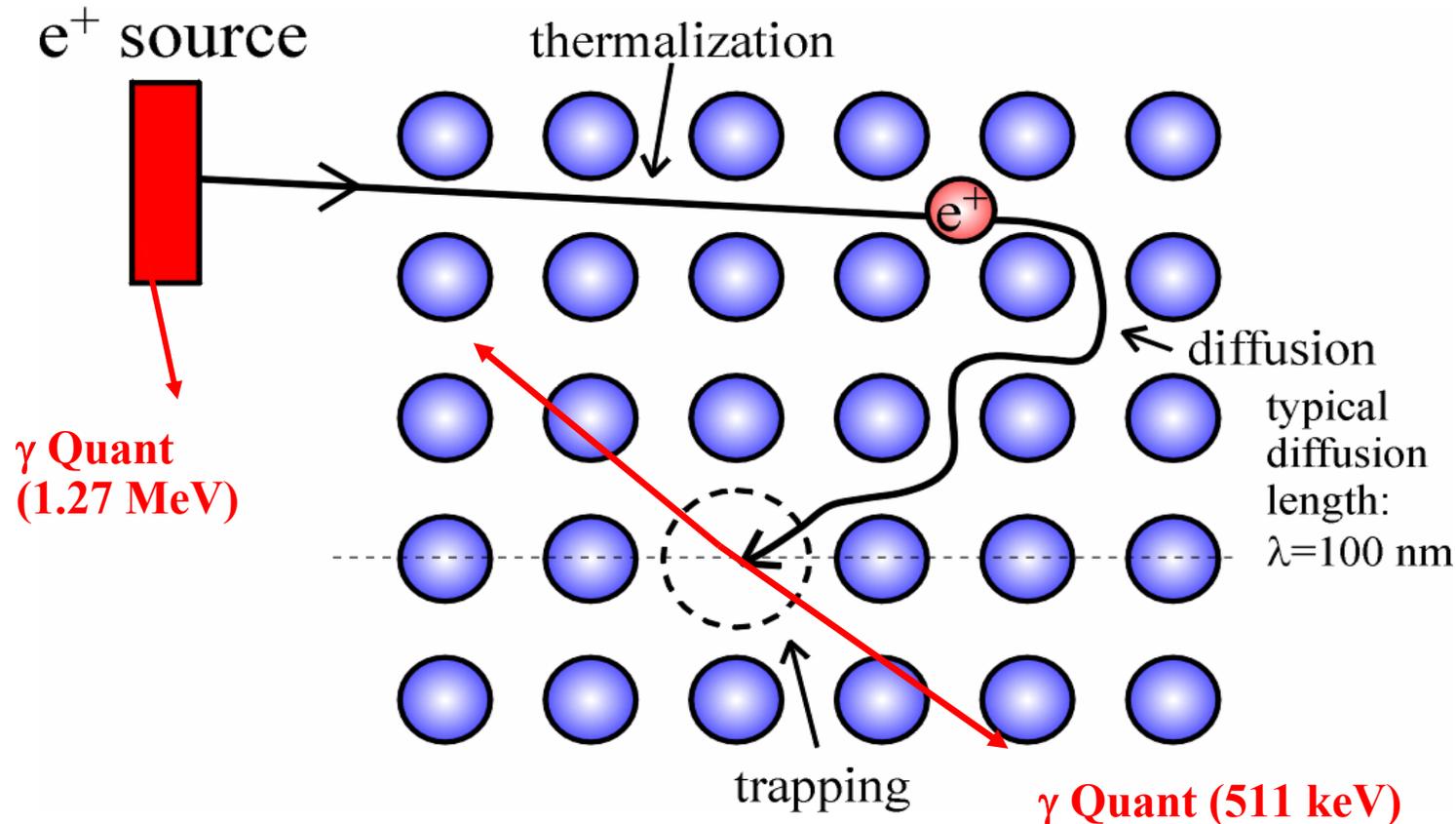
Martin-Luther-Universität



Halle-Wittenberg

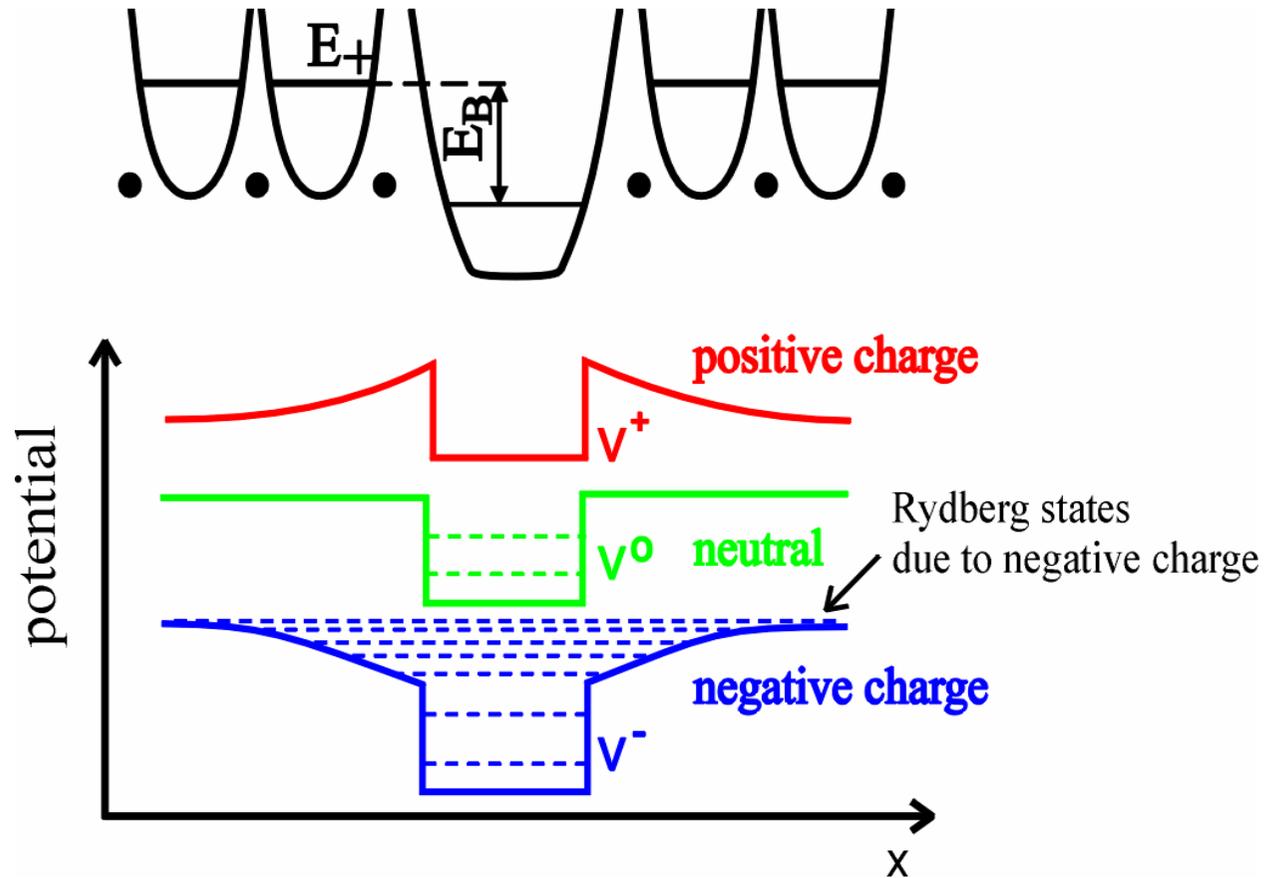
- Defektnachweis mit Positronen
- Charakterisierung nach Kristallzucht
  - EL2-Defekt in semiisolierendem LEC-GaAs
  - Kompensierende Defekte in hochdotiertem GaAs:Si
  - B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-abdeckfreie GaAs-Zucht mittels modifiziertem Cz-Verfahren
  - Defekte in LT-GaAs-Epitaxie-Schichten
  - Hg-Leerstellen in HgCdTe nach THM-Kristallzucht
- „Defect engineering“
  - Zwei-Zonen-Temperung unter definiertem Dampfdruck von HgCdTe und GaAs
  - Gettern von Verunreinigungen durch Implantationsdefekte in Si (R<sub>p</sub>/2-Effekt)

# Positroneneinfang durch Kristalldefekte



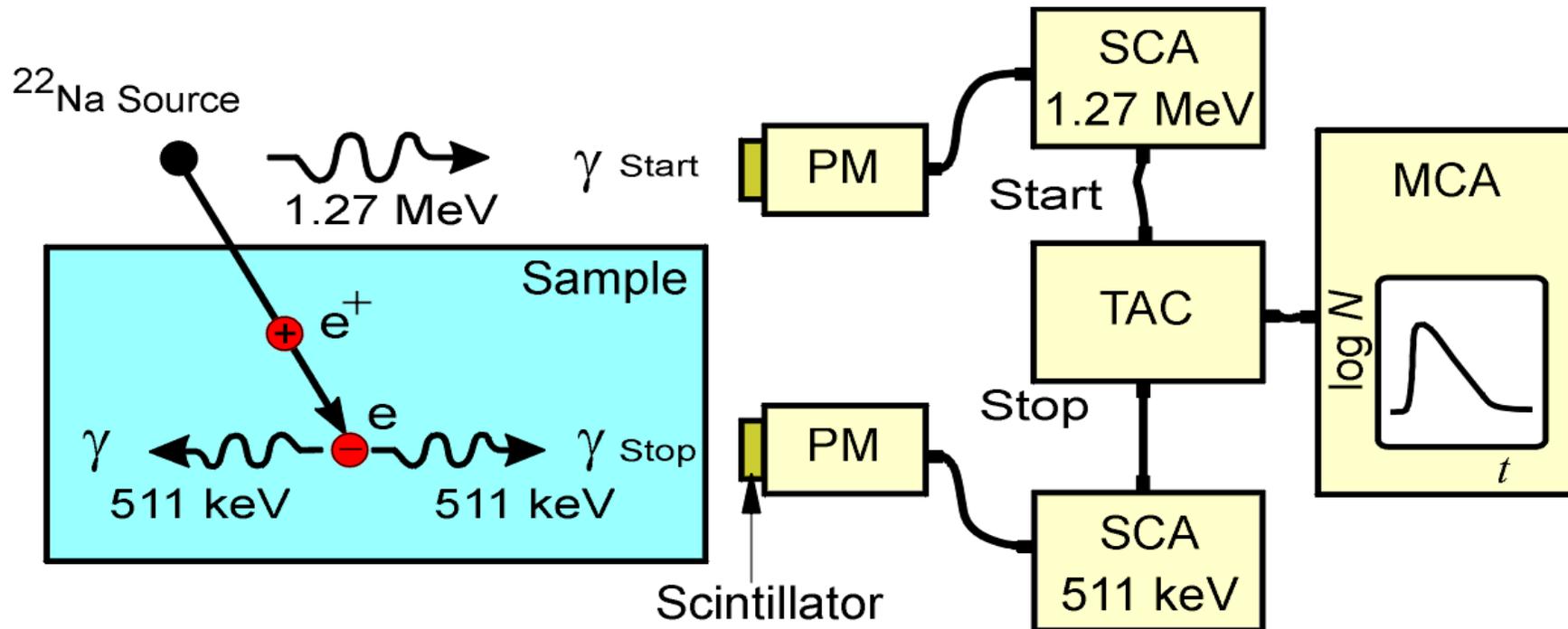
- Positronen-Wellenfunktion wird im Defekt lokalisiert
- Annihilationsparameter ändern sich, wenn Positron im Defekt zerstrahlt
- Defekte können nachgewiesen werden (Identifizierung und Quantifizierung)

# Das Einfangpotential von Leerstellen



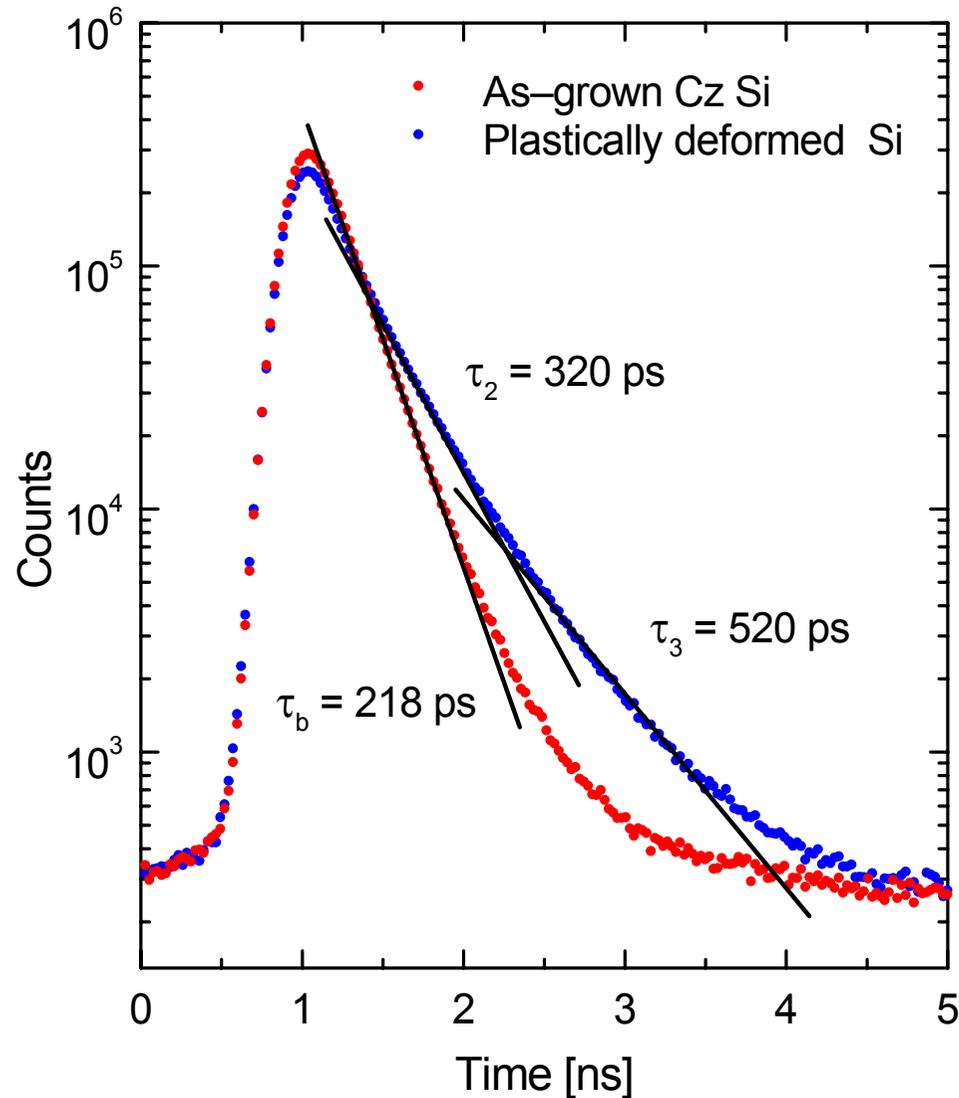
- Attraktives Potential durch fehlendes Atom (abstoßender Kern fehlt)
- in Halbleitern: Zusätzlicher Coulomb-Anteil ( $\propto 1/r \rightarrow$  ist weit ausgedehnt)
- kein Positroneneinfang durch positive Leerstellen

# Die Messung der Positronenlebensdauer



Positronenlebensdauer wird als Zeitdifferenz gemessen zwischen  $1.27\text{ MeV}$  Gammaquant ( $\beta^+$ -Zerfall) und einem  $0.511\text{ MeV}$  Quant (Annihilationsprozess)

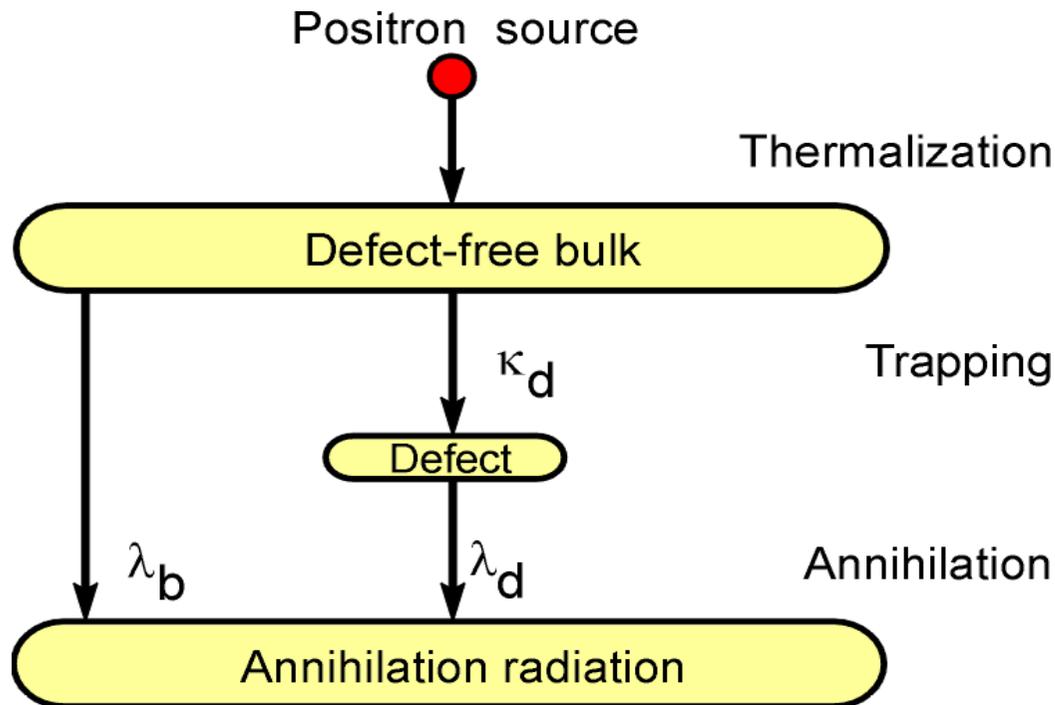
# Positronenlebensdauer-Spektren



- Lebensdauerspektren bestehen aus exponentiellen Zerfallstermen
- Einfang von Positronen in Defekte mit offenem Volumen führt zu langen Komponenten im Spektrum
- Spektrenanalyse wird mittels nicht-linearer Anpassroutinen nach Subtraktion von Untergrund und Quellanteil durchgeführt
- Ergebnis: Lebensdauern  $\tau_i$  und Intensitäten  $I_i$

$$N(t) = \sum_{i=1}^{k+1} \frac{I_i}{\tau_i} \exp\left(-\frac{t}{\tau_i}\right)$$

# Positroneneinfang in einem Defektyp



$$\frac{dn_b(t)}{dt} = -(\lambda_b + \kappa_d)n_b(t)$$

$$\frac{dn_d(t)}{dt} = -\lambda_d n_d(t) + \kappa_d n_b(t)$$

Lösung ist das Zerfallsspektrum der Positronen:

$$D(t) = I_1 \exp\left(-\frac{t}{\tau_1}\right) + I_2 \exp\left(-\frac{t}{\tau_2}\right)$$

Abkürzungen:

$$\tau_1 = \frac{1}{\lambda_b + \kappa_d}, \quad \tau_2 = \frac{1}{\lambda_d},$$

$$I_1 = 1 - I_2, \quad I_2 = \frac{\kappa_d}{\lambda_b - \lambda_d + \kappa_d}$$

Die  $\tau_i$  und  $I_i$  aus Anpassung  $\Rightarrow$  **Ergebnis:** Einfangrate  $\kappa$

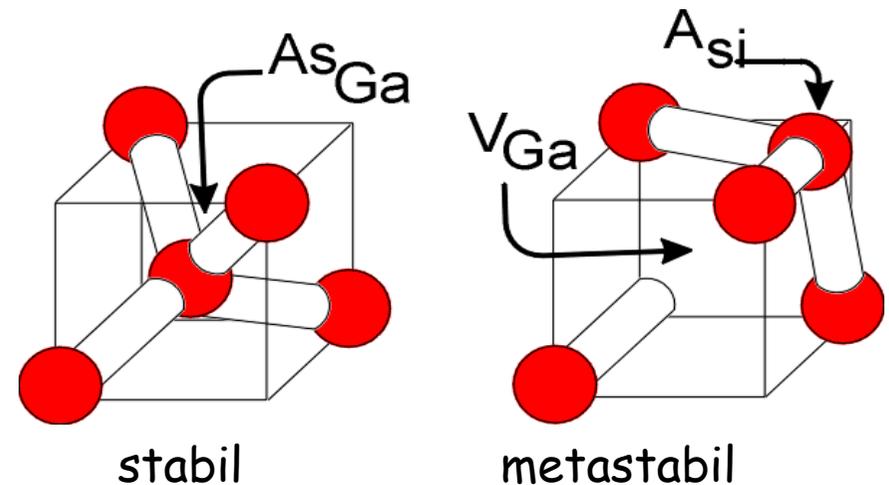
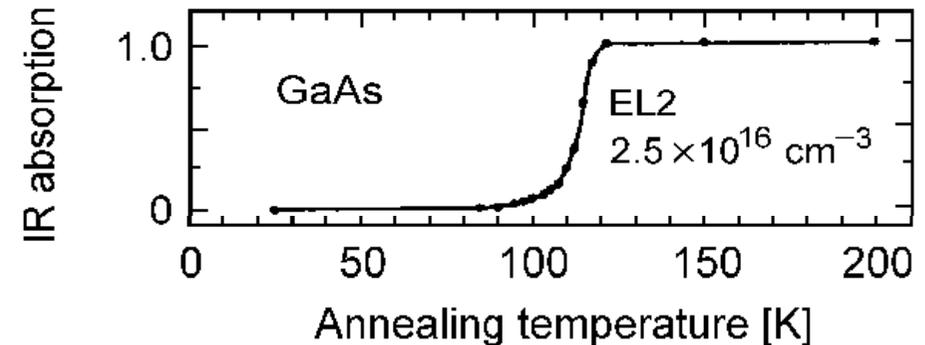
$$\kappa_d = \mu C_d = \frac{I_2}{I_1} \left( \frac{1}{\tau_b} - \frac{1}{\tau_d} \right)$$

gesuchte Defektkonzentration



# Die Natur des EL2-Defektes in GaAs

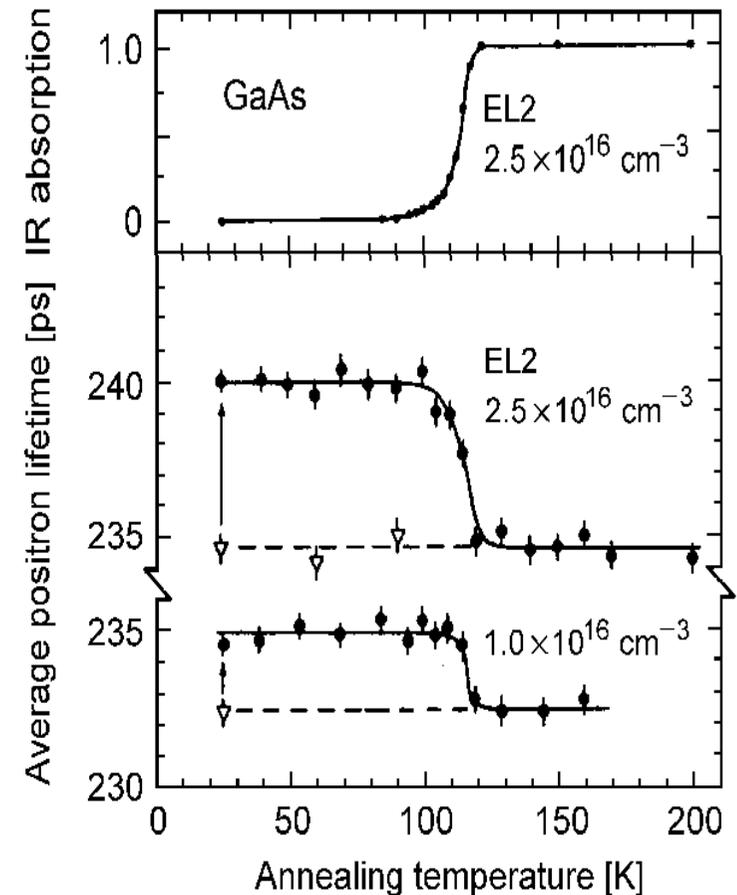
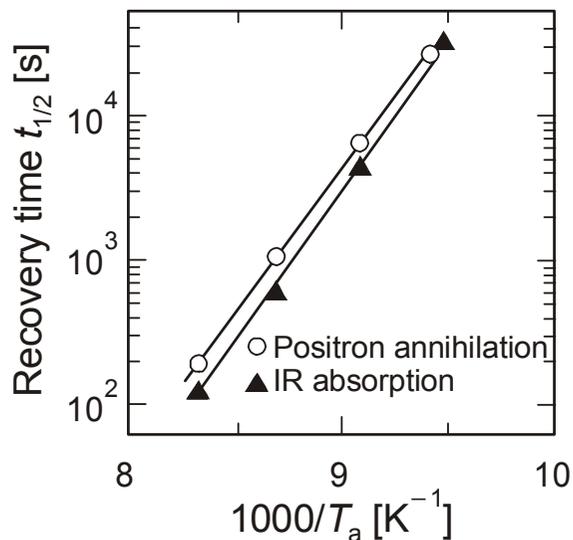
- einer der meist untersuchten Kristalldefekte überhaupt
- verantwortlich für semiisolierende Eigenschaften von GaAs: große technologische Bedeutung
- ist tiefer Donator, kompensiert flache Akzeptoren, z.B. C-Verunreinigungen
- Defekt zeigt Metastabilität bei tiefen T nach Beleuchtung
- IR-Absorption des Defektes verschwindet bei Beleuchtung bei  $T < 100$  K
- erscheint wieder bei Erwärmung auf ca. 110 K
- es existierten viele Strukturmodelle
- Dabrowski, Scheffler bzw. Chadi, Chang schlugen 1988  $As_{Ga}$ -Antisite vor, der strukturelle Umwandlung zur Metastabilität erfahren soll



(Dabrowski 1988, Chadi 1988)

# Die Natur des EL2-Defektes in GaAs

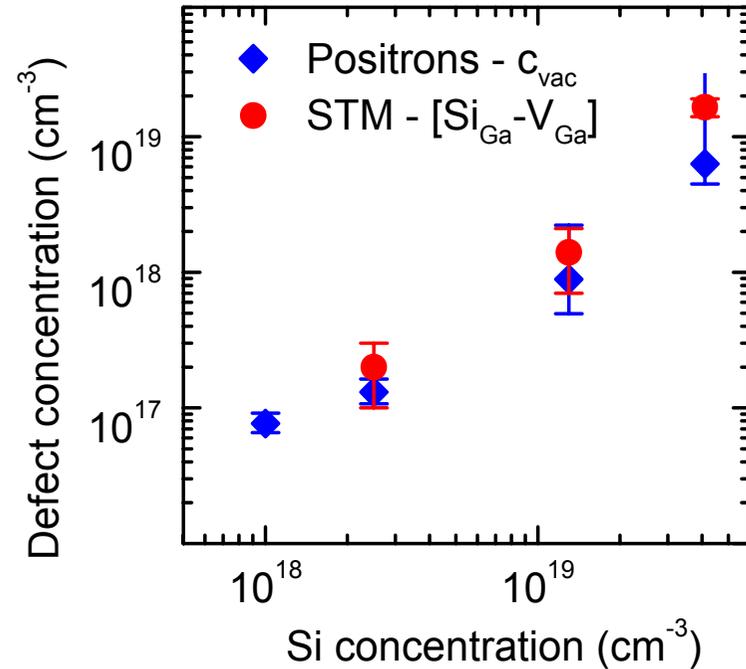
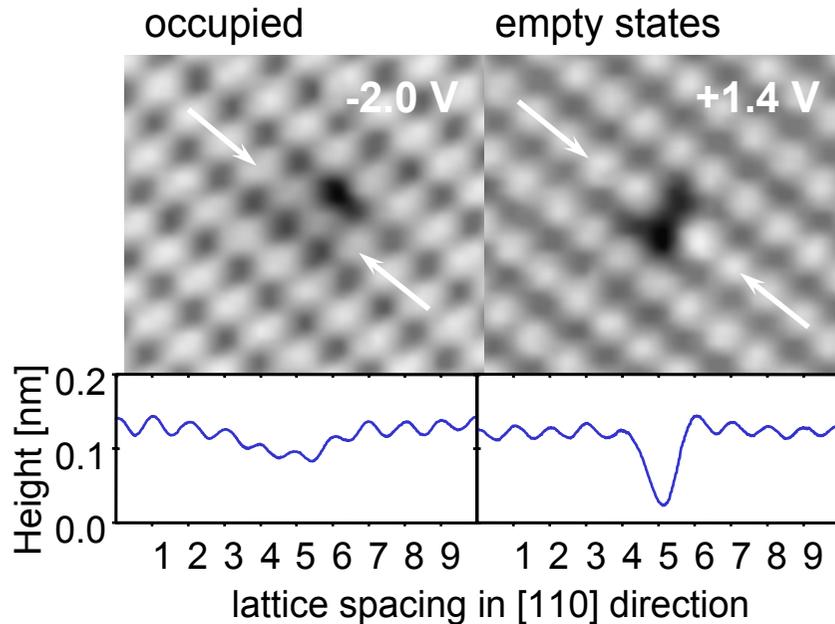
- im metastabilen Zustand: Ga-Leerstelle
- muss bei Erwärmung wieder verschwinden
- durch Positronen-Lebensdauermessung bestätigt
- Kinetik der Rückumwandlung identisch für IR- und Positronenexperiment:  $E_A = (0.37 \pm 0.02) \text{ eV}$
- Nachweis der Leerstelle im metastabilen Zustand bestätigte Modell



Krause et al., Phys. Rev. Lett. **65** (1990) 3329



# Identifikation von $V_{Ga}$ - $Si_{Ga}$ -Komplexen in GaAs:Si



- Rastertunnelmikroskopie an GaAs (110)-Spaltflächen in Jülich (Ph. Ebert)
- Defekt als  $V_{Ga}$ - $Si_{Ga}$  Komplex identifiziert

- Quantifizierung → Übereinstimmung

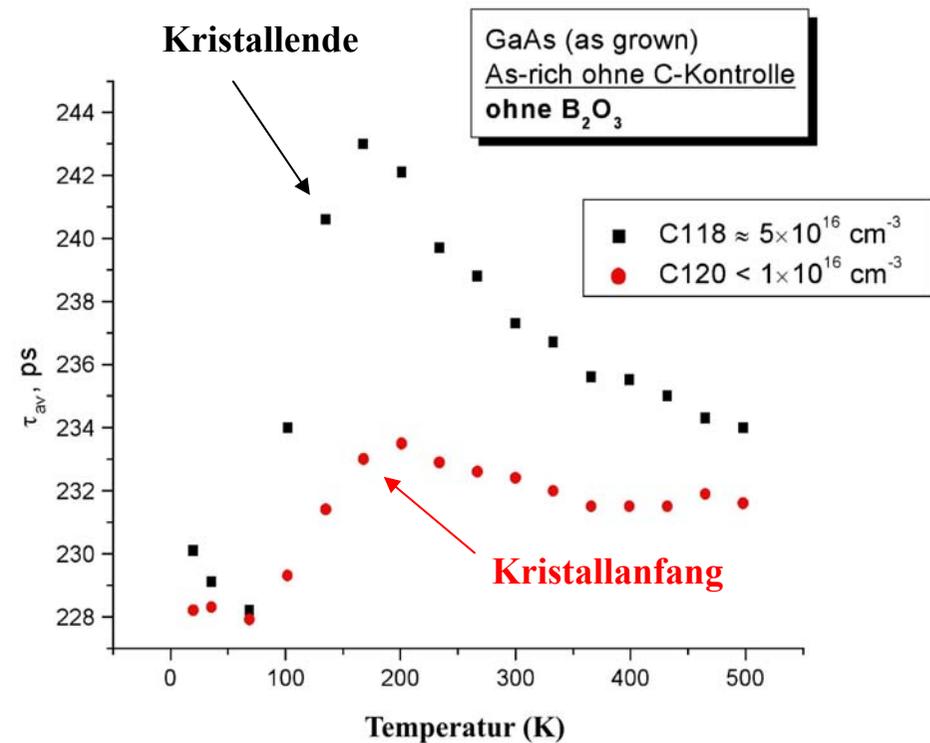
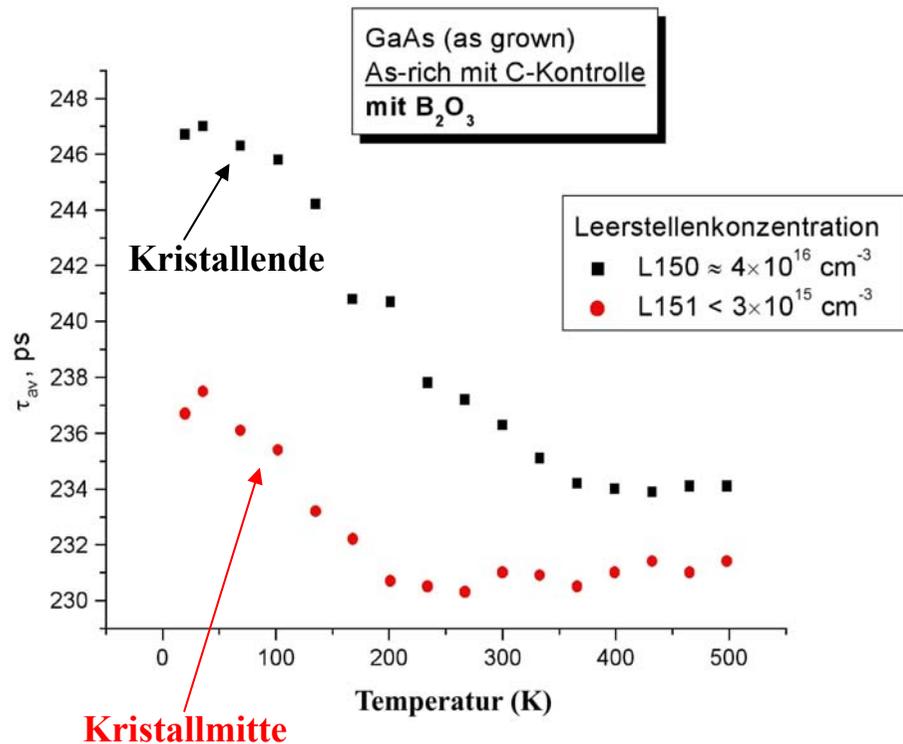
Einfachleerstellen in GaAs:Si sind  $V_{Ga}$ - $Si_{Ga}$ -Komplexe

Gebauer et al., Phys. Rev. Lett. **78**, 3334-3337 (1997)



# B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-abdeckfreie GaAs-Zucht mittels modifiziertem Cz-Verfahren

- B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Deckschicht des üblichen LEC-Verfahrens kann weggelassen werden, wenn As-Partialdruck entsprechend eingestellt wird
- weniger thermische Spannungen; mehr Freiheitsgrade für den Züchter um Punktdefekt-Haushalt zu beeinflussen

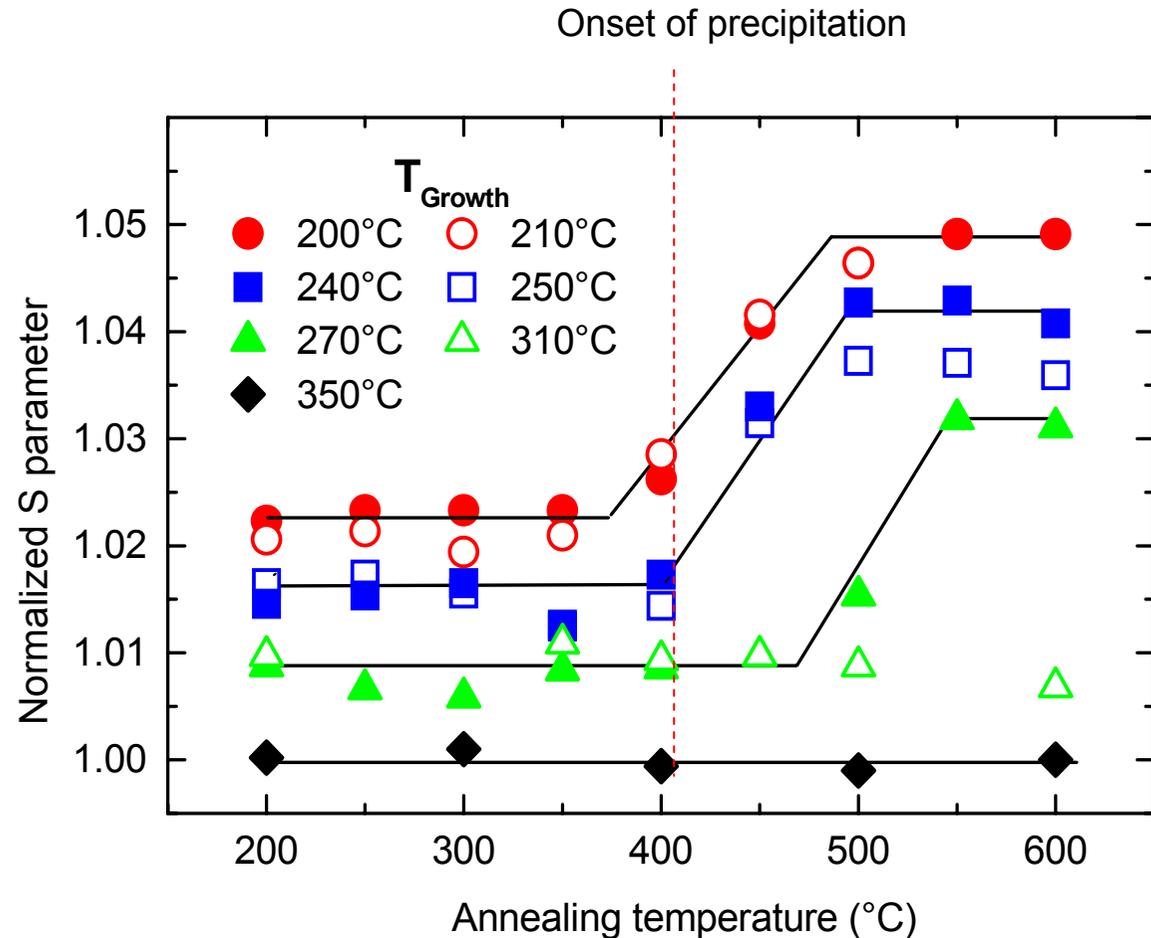


Kooperation mit IKZ (Dr. Neubert, Prof. Rudolph, Dr. Kiessling)



# Defekte in epitaktischen LT-GaAs-Schichten

- MBE-Wachstum von GaAs kann bei 200°C erfolgen
- Schichten ca. 1  $\mu\text{m}$  dick
- Schichten sind dann extrem defektreich
- bis 1% As-Überschuss wird durch  $\text{As}_{\text{Ga}}$  und  $\text{V}_{\text{Ga}}$  kompensiert
- bei Temperung setzt As-Ausscheidung bei ca. 400°C ein
- Positronen detektieren kleine Leerstellencluster
- sind wahrscheinlich mit Ausscheidungen verbunden

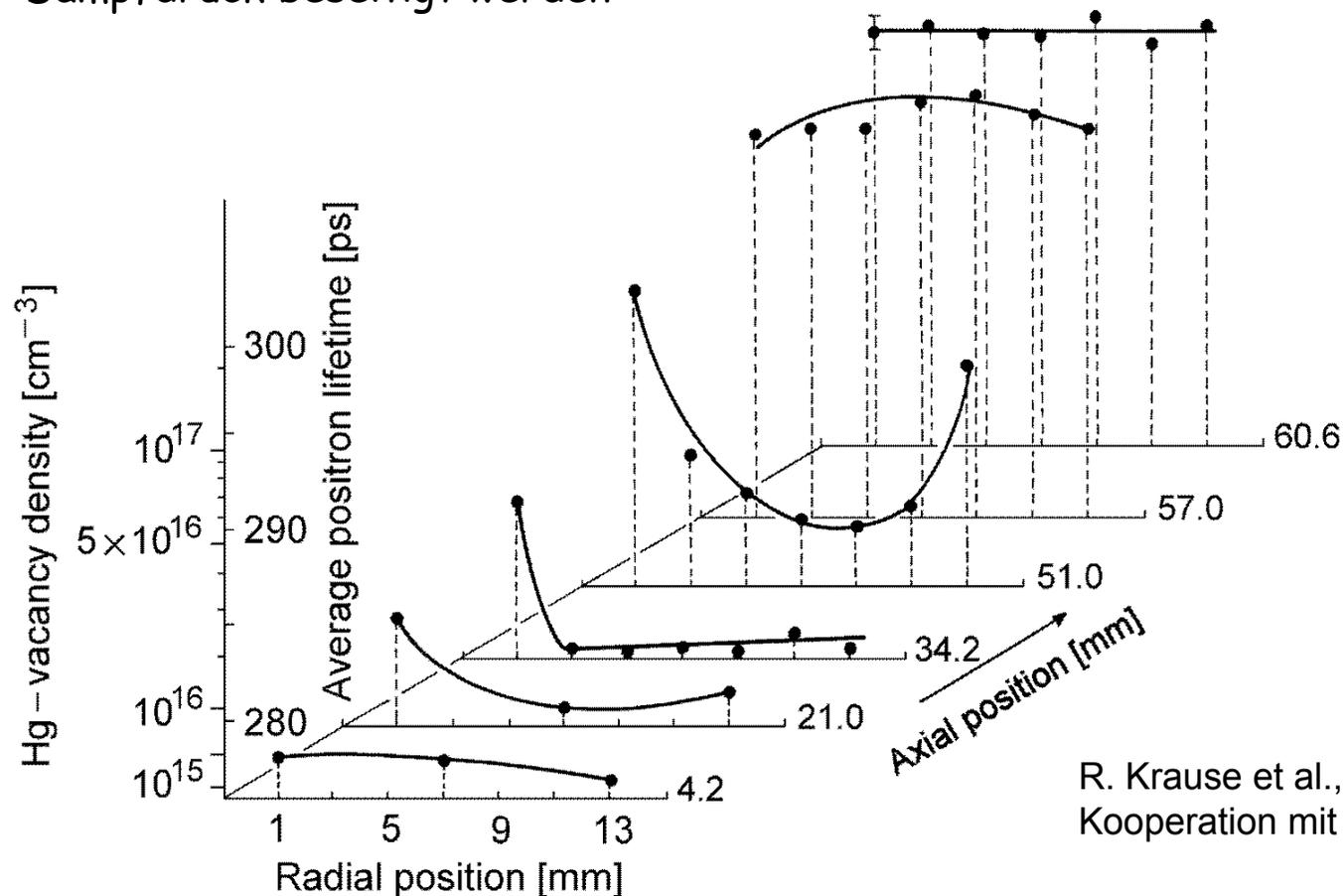


Gebauer et al., Appl. Phys. Lett. **71**, 638 (1997)



# Hg-Leerstellen in HgCdTe nach THM-Kristallzucht

- kompletter  $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ -Kristall wurde aufgeschnitten und Profil der  $V_{\text{Hg}}$  vermessen
- starker Anstieg von  $[V_{\text{Hg}}]$  am Ende des Kristalls durch Abschalten des Ringheizers verursacht
- Leerstellen können aber nachträglich durch 2-Zonen-Temperung unter definiertem Hg-Dampfdruck beseitigt werden

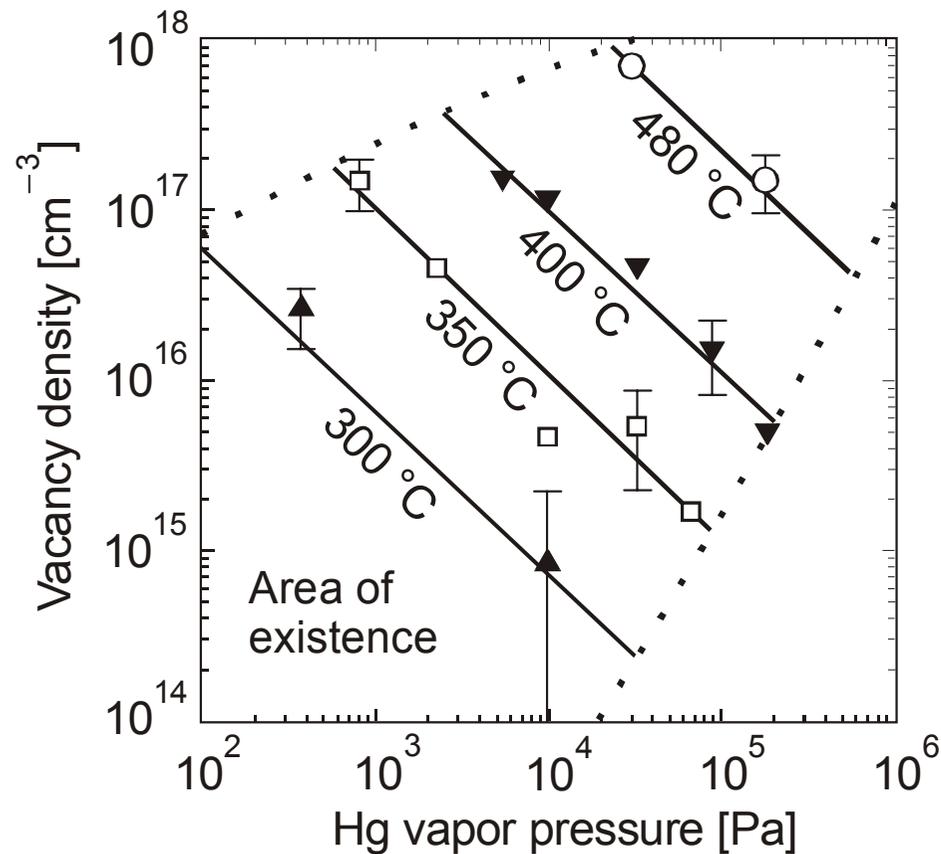
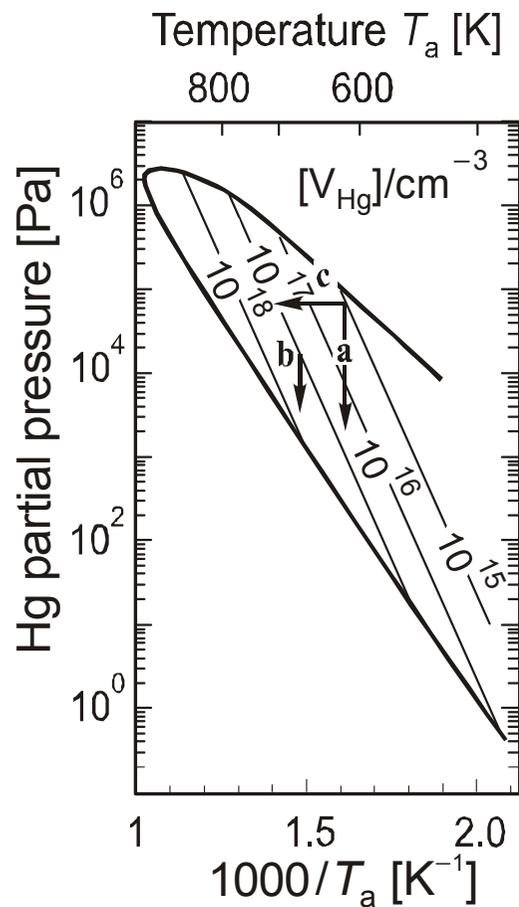


R. Krause et al., J. Cryst. Growth **101** (1990) 512  
 Kooperation mit HUB (Prof. Schenk, Dr. Kiessling)

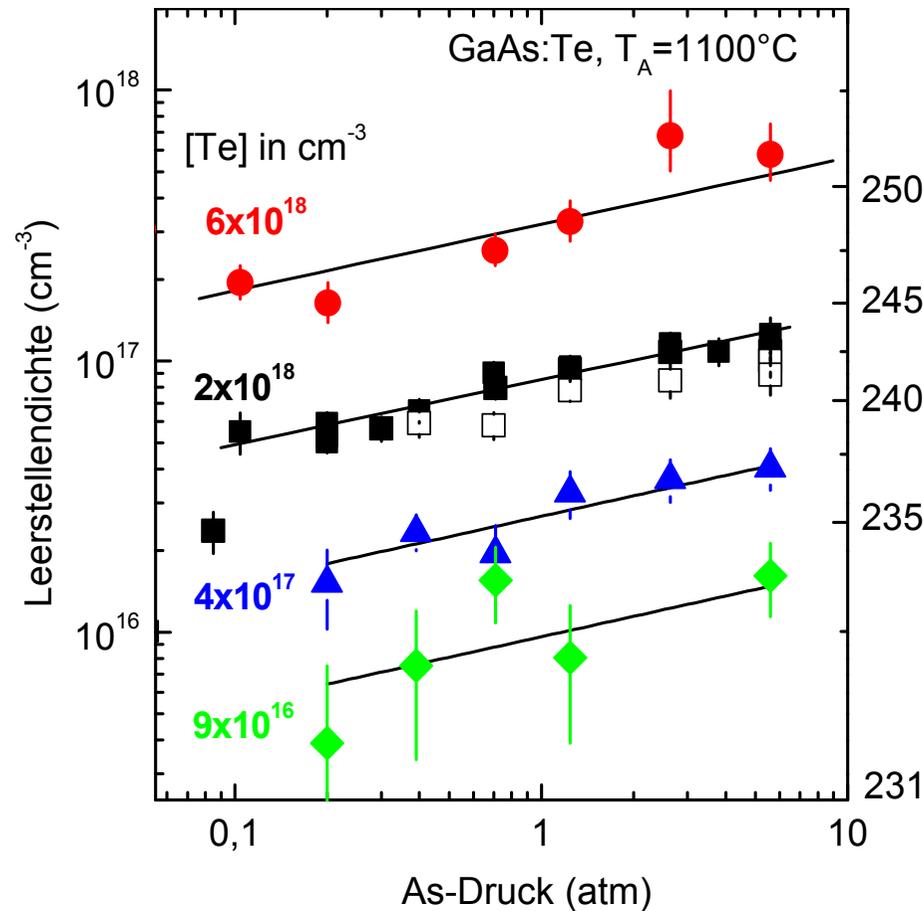


# Zwei-Zonen-Temperierung von HgCdTe

- systematische Temperungen im gesamten Existenzgebiet für  $[V_{\text{Hg}}] > 10^{15} \text{ cm}^{-3}$
- gefundene Leerstellenkonzentrationen in guter Übereinstimmung mit einfachem thermodynamischen Modell nach Vydyanath J. Electrochem. Soc. 128 (1981) 2609



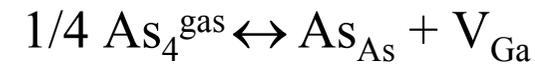
# Zwei-Zonen-Temperperung von GaAs: Abhängigkeit der Leerstellendichte vom As-Druck



Fit:  $[V_{\text{Ga}} - \text{Te}_{\text{As}}] \sim p_{\text{As}}^n$

$\rightarrow n = 1/4$

Einbaureaktion:



↓  
Massenwirkungsgesetz

$$[V_{\text{Ga}}] = K_v \times p_{\text{As}}^{1/4}$$

Fit ergibt  $K_v = c_{\text{Te}}^{0,93}$

J. Gebauer et al., Physica B **273-274** (1999) 705

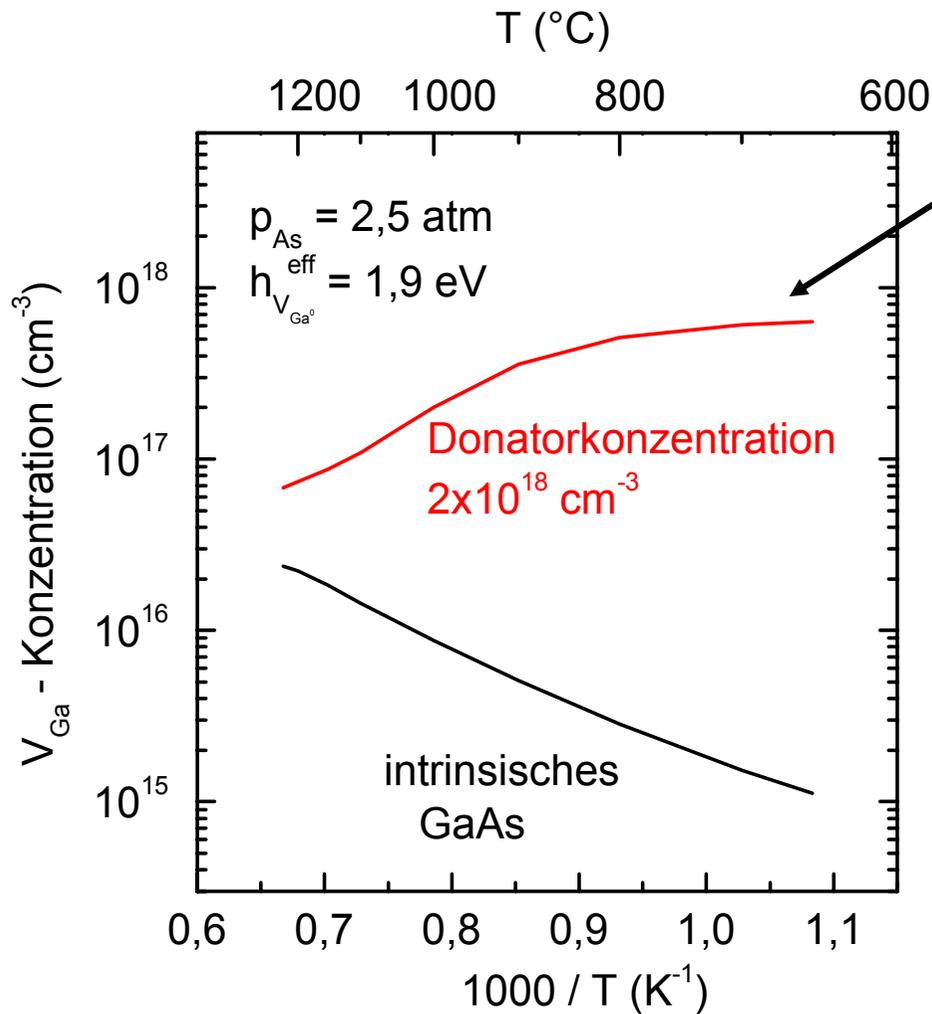


# negative Temperaturabhängigkeit der $V_{Ga}$ - Dichte

- negative Temperaturabhängigkeit von  $[V_{Ga}]$  wurde vorhergesagt in n-dotiertem GaAs

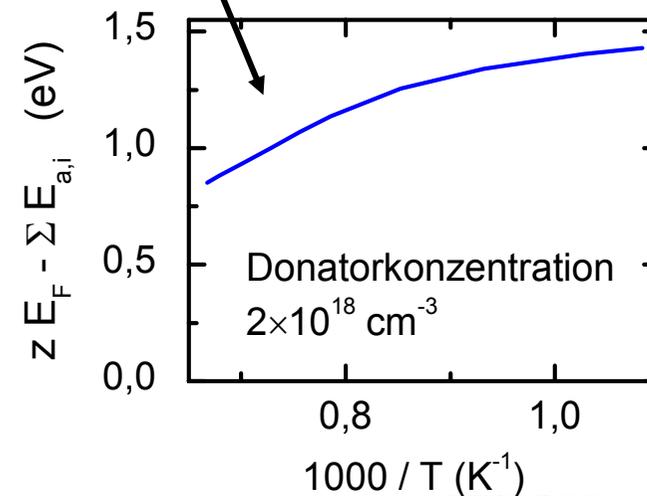
T.Y. Tan et al., Appl. Phys. A **56** (1993) 249

- berechnet: „negative“ Temperaturabhängigkeit der  $V_{Ga}$ - Dichte in n-GaAs

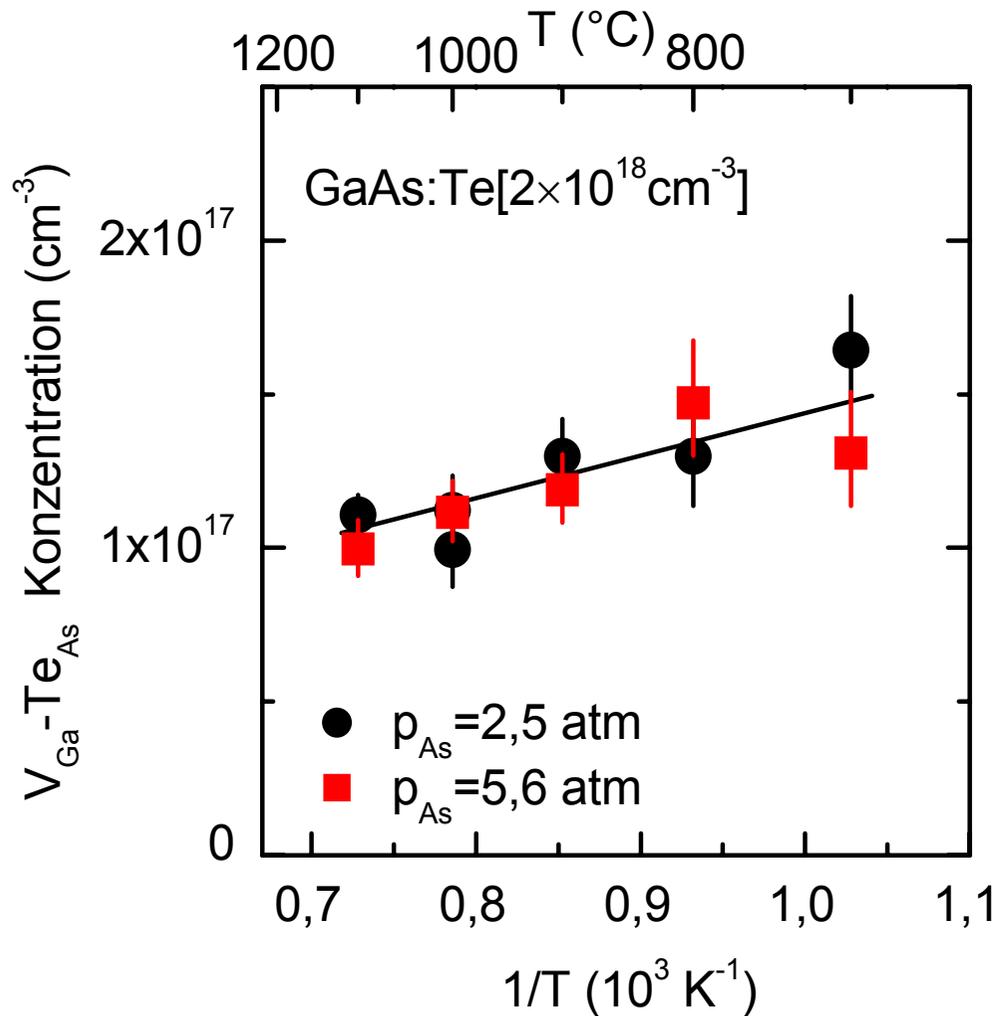


Ursache:

Gewinn an elektronischer Energie bei Bildung von  $V_{Ga}$  sinkt mit T



# negative Temperaturabhängigkeit der $V_{Ga}$ - Dichte



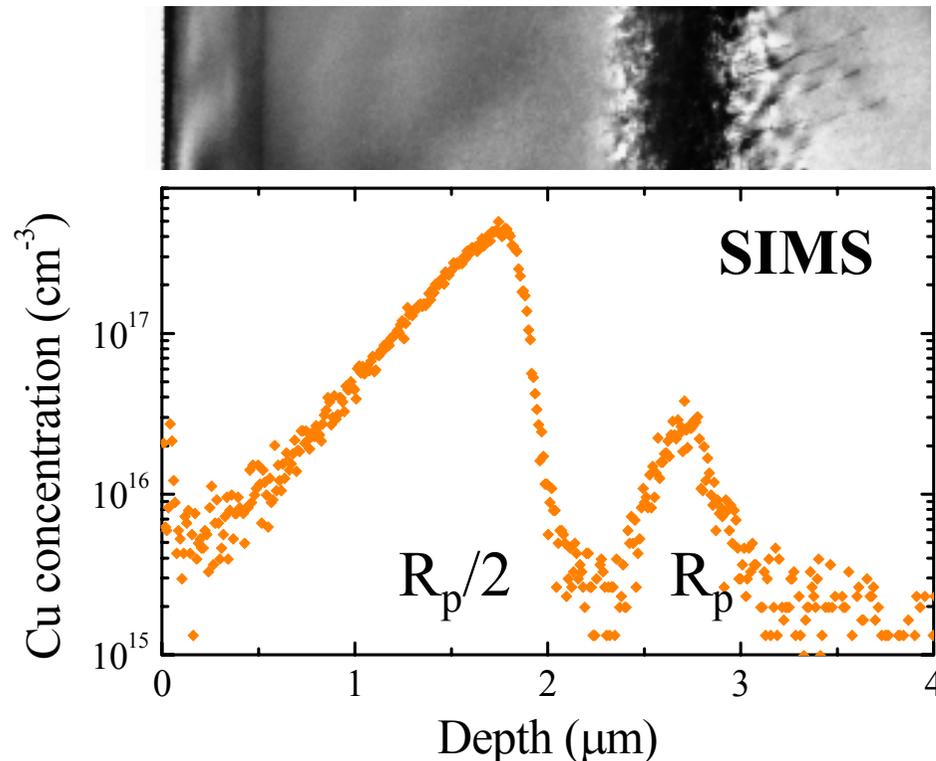
- es wurden Umtemperaturen vorgenommen,  $T = 700 \dots 1150^\circ\text{C}$
- vorhergesagter Trend wurde bestätigt
- detaillierte Auswertung zeigt, dass  $V_{Ga}$  dreifach negativ geladen ist



# Defekte nach Selbstimplantation in Si – der $R_p/2$ Effekt

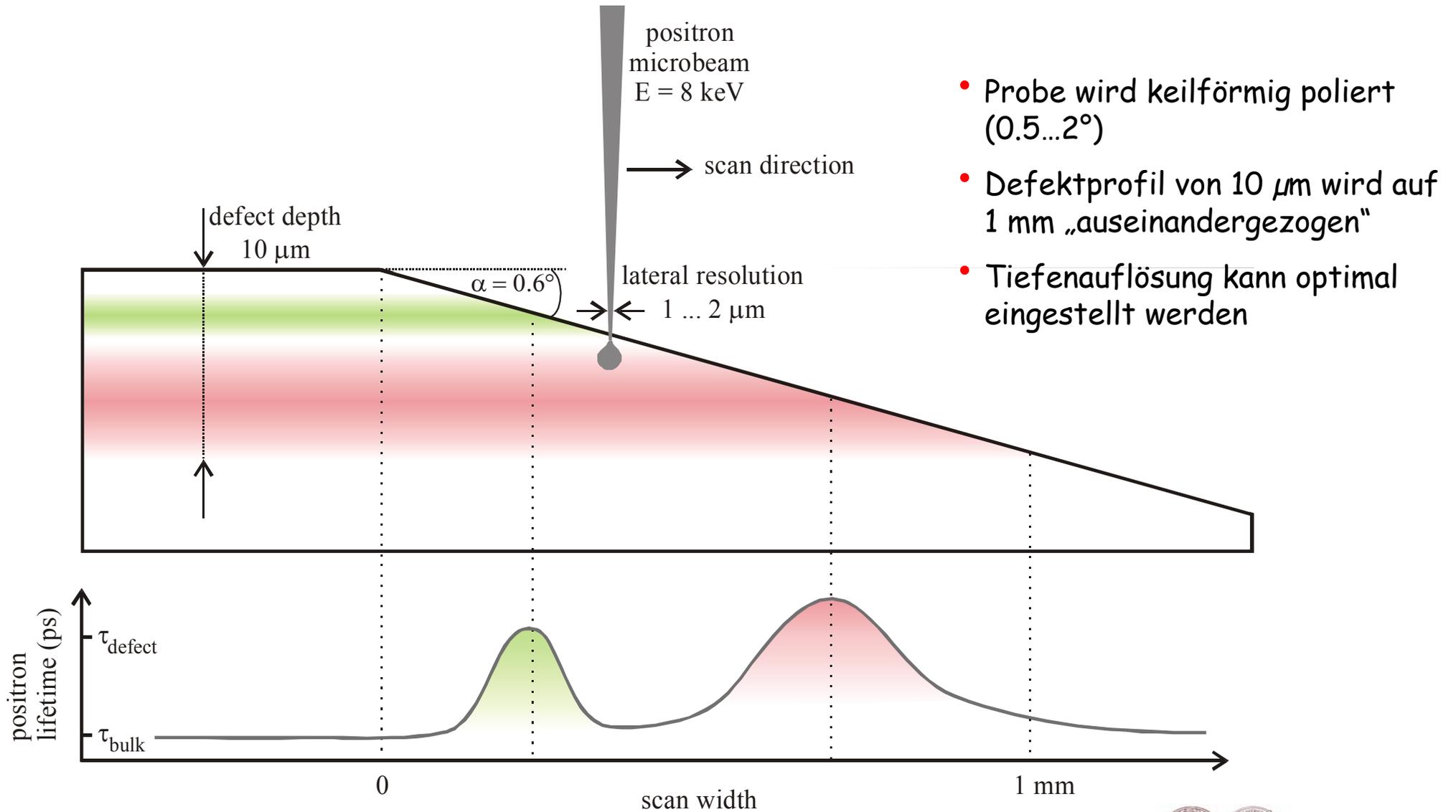
- nach Hochenergie-Selbstimplantation von Si (3.5 MeV;  $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ ) und RTA Ausheilung (900°C, 30s): zwei neue Getterzonen bei  $R_p$  und  $R_p/2$  ( $R_p$  = projected range of  $\text{Si}^+$ )
- findet man mit SIMS nach Cu-Kontamination von der Rückseite und Diffusions-Temperaturung

TEM image by P. Werner, MPI Halle



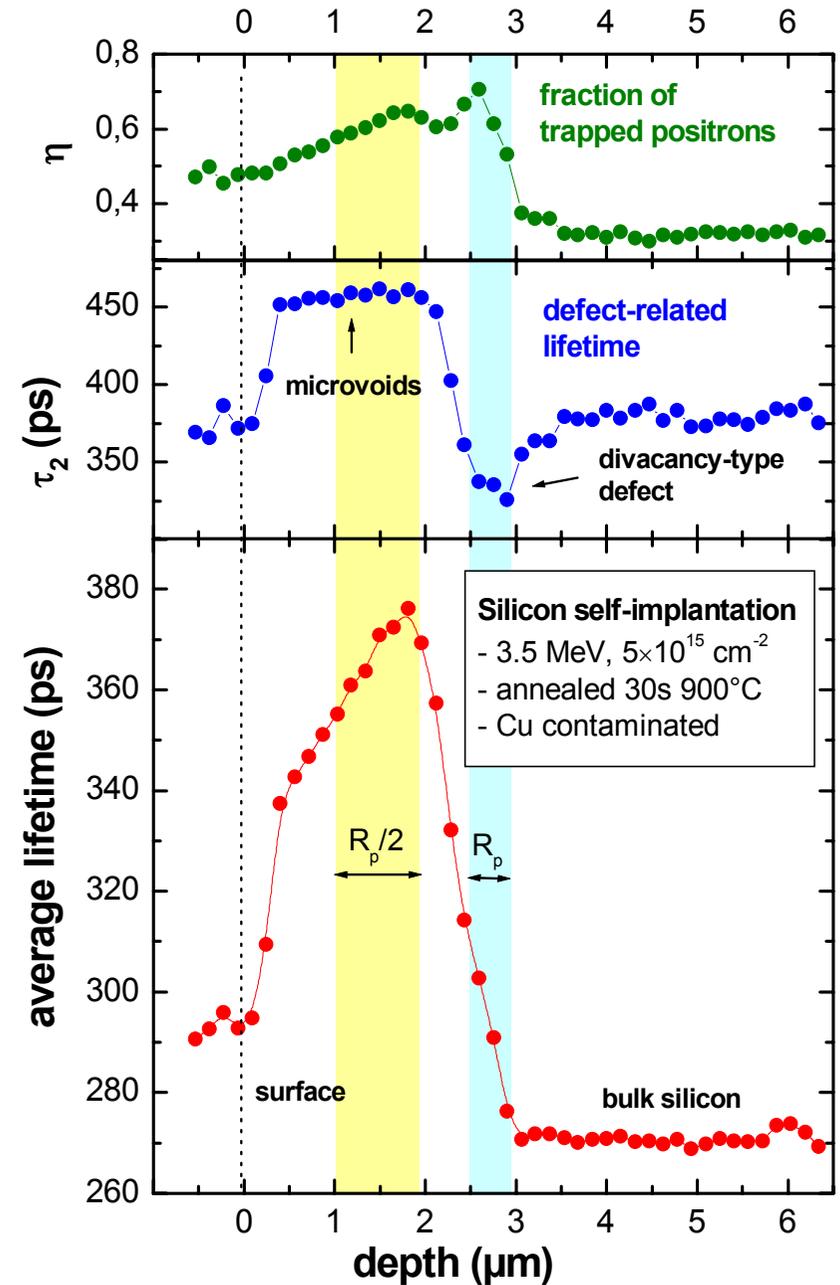
- bei  $R_p$ : gettern durch interstitielle Versetzungsringe (gebildet durch Überschuss-Si während RTA-Ausheilung)
- aber keine Defekte mit TEM bei  $R_p/2$  sichtbar
- **Welcher Natur sind diese Defekte?**

# Verbesserte Tiefenauflösung mit dem Münchener Positronen-Raster-Mikroskop



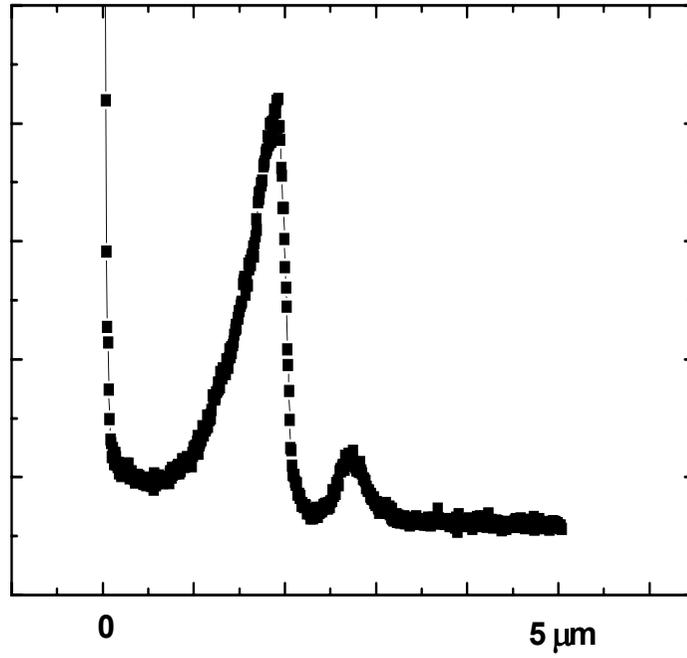
# Erstes Defekt-Tiefenprofil mit einem Positronenmikroskop

- 45 Lebensdauer-Spektren entlang Keil entsprechen Tiefenauflösung von 155 nm ( $\alpha = 0.81^\circ$ )
- Positronenenergie 8 keV  $\Rightarrow$  mittlere Eindringtiefe 400 nm
- ergibt optimale Tiefenauflösung
- beide Defekt-Regionen gut sichtbar:
  - Leerstellencluster mit ansteigender Dichte bis 2  $\mu\text{m}$  ( $R_p/2$  region)
  - in  $R_p$  Region: Lebensdauer  $\tau_2 = 330$  ps; offenes Volumen entspricht dem einer Doppelleerstelle; muss durch Versetzungsringe stabilisiert werden



R. Krause-Rehberg et al., Appl. Phys. Lett. **77** (2000) 3932





SIMS-Profil von Cu

## Zusammenfassung

- Positronen eignen sich als Sonde zum Nachweis von leerstellenartigen Punktdefekten in kristallinen Festkörpern
- geeignet für Volumenkristallen aber auch für dünne Schichten
- jetzt auch: hohe laterale Auflösung mit Positronen-Raster-Mikroskop

Dieser Vortrag ist als PDF-File auf unserer Homepage:  
<http://PositronAnnihilation.net>

Kontakt: [mail@KrauseRehberg.de](mailto:mail@KrauseRehberg.de)

