

Mikroskopische und spektroskopische Untersuchungen zur Wechselwirkung von Punktdefekten und ausgedehnten Baufehlern in Halbleitern

H. S. Leipner

Punktdefekte und ausgedehnte Baufehler in Halbleitern sind keine unabhängig im Kristall vorkommenden Störungen, sondern beeinflussen sich gegenseitig in Struktur, Dynamik und elektrischer Wirksamkeit. Besonders interessant erscheint der Einfluss von Versetzungen auf die Punktdefektpopulation in Halbleitereinkristallen. Zum einen untersuchen wir die Generation von intrinsischen Punktdefekten während der plastischen Verformung von Element- und Verbindungshalbleitern untersucht, zum anderen geht es um die Beeinflussung der Verteilung von Fremdatomen durch die Anwesenheit von Versetzungen. Ein direkter Zusammenhang konnte zwischen dem Mechanismus der Versetzungsbewegung und der Bildung von strukturellen Punktdefekten hergestellt werden. Verschiedene Typen der im Zuge der Versetzungsbewegung emittierten Punktdefekte wurden in Abhängigkeit von den Deformationsparametern spektroskopisch erfasst. Gemessene Spannungs–Dehnungs-Kurven wurden mit empirischen Modellen ausgewertet, um die Aktivierungsparameter der Versetzungsbewegung im Zusammenhang mit der Punktdefektgeneration zu bestimmen. Neben der Generation von intrinsischen Punktdefekten bei der Versetzungsbewegung wurden Prozesse der Aggregation von Fremdatomen an Versetzungen behandelt. Ein ausgedehnter Bereich mit geänderten Materialeigenschaften um die Versetzungen steht zum einen mit der Bildung von Ausscheidungen, zum anderen mit der Wechselwirkung mit intrinsischen Punktdefekten und deren Reaktionen zu Defektkomplexen und Mikrodefekten im Zusammenhang.

Die Emission von Punktdefekten bei der Versetzungsbewegung wurde bereits bei geringsten Verformungsgraden gemessen, d. h. in einem Bereich, wo noch keine makroskopische Abgleitung messbar ist. Aus bisherigen Studien war zwar bekannt, dass das reine Versetzungsgleiten mit einer Punktdefektbildung im Zusammenhang steht, aber der Mechanismus war unklar. Wir konnten eindeutig nachweisen, dass der dominante Prozess der Punktdefektgeneration bei niedrigen Temperaturen, wo Versetzungsklettern keine Rolle spielt, das *Jog dragging* an Schraubenversetzungen ist. Er steht mit dem Schneiden von Versetzungen unterschiedlicher Gleitsysteme in Beziehung, wo nichtgleitfähige *Jogs* (Versetzungssprünge) gebildet werden, die letztendlich zur Emission von Leerstellen bzw. Zwischengitteratomen führen. Diese Punktdefektbildung kann Konsequenzen für elektronische Bauelemente haben: Anpassungsversetzungen zum Substrat können ggf. aus dem aktiven Gebiet ferngehalten werden, aber im Zuge der Versetzungsbewegung erzeugte Punktdefekte können diffundieren und die Bauelementeeigenschaften negativ beeinflussen.

Neben der Anwendung verschiedener elektronenmikroskopischer Methoden ist insbesondere die Positronenannihilation als eine Technik sensitiv für Leerstellen und andere Defekte mit offenem Volumen sehr interessant. Bisher war kaum bekannt, welche Wechselwirkungen eigentlich Positronen mit Versetzungen haben – im einfachsten Falle wurden sie als simple Kette von Leerstellen betrachtet. Wir

konnten ableiten, dass Versetzungen in Halbleitern eine komplexe Positronenfalle darstellen, die einen zweistufigen Positroneneinfang hervorrufen. Die reguläre Versetzungslinie ist aufgrund des Deformationspotentials eine flache Falle mit Positronenbindungsenergien von einigen zehn Millielektronenvolt. Dieser Wert ist kleiner als bei negativ geladenen Fremdatomen in Halbleitern, die aufgrund der Ausbildung von flachen Rydbergzuständen ebenfalls als flache Positronenfallen wirken. Das flache Versetzungsniveau wirkt als *Precursor* für den Einfang in versetzungsgebundene tiefe Fallen, die assoziierten Leerstellen zuzuordnen sind. Als zukünftige Entwicklungsmöglichkeit zeichnet sich ab, dass eine genauere Spektroskopie des Annihilationsorts auf der Versetzung (bzw. in Defektbereichen überhaupt) möglich ist. Das kann nicht mehr über Positronenlebensdauermessungen erfolgen, sondern erfordert den Einsatz der Doppler-Koinzidenzspektroskopie, bei der im Zusammenhang mit theoretischen Rechnungen zur Impulsdichteverteilung der Elektronen empfindliche Informationen zur chemischen Umgebung des Annihilationsorts abgeleitet werden können. In aktuell eingereichten Projekten soll diesen neuen spektroskopischen Möglichkeiten nachgegangen werden.

Die dominante Eigenheit der gemessenen Positronenlebensdauern bestand darin, dass praktisch immer eine sehr lange Lebensdauerkomponente gemessen wurde, die nur mit Leerstellenagglomeraten in Verbindung stehen kann. Um die experimentellen Ergebnisse interpretieren zu können, wurden theoretische Rechnungen mit Dichtefunktionalmethoden angestellt. Es konnte abgeleitet werden, dass es für Silicium bestimmte magische Zahlen für besonders stabile Konfigurationen gibt. Für GaAs wurden erstmals Rechnungen zur Stabilität von Leerstellenclustern vorgelegt. Während sich für Si in Übereinstimmung mit der früheren einfachen *Bond-counting rule* eine stabile Clustergröße von $4j + 2$ ($j = 1, 2, 3, \dots$) ergibt, erhält man für GaAs eine stabile Clustergröße von V_{12} .

Die angestellten theoretischen Rechnungen stellen eindeutig heraus, dass beim *Jog dragging* gebildete Leerstellenketten energetisch instabil sind. Die Bildung von stabilen Leerstellenclustern stellt vielmehr einen Primärmechanismus dar, der selbst bei Raumtemperatur unmittelbar am Sprung ohne die Diffusion von Leerstellen abläuft. Der Einbau von Leerstellen in thermisch stabile Leerstellencluster stellt offenbar genau so einen Energiegewinn dar wie die Inkorporation in den Versetzungskern.

Das Problem gleitfähiger Versetzungen in Halbleitern ist eine langandauernde theoretische Diskussion. Experimentell findet man aufgespaltene Versetzungen im *Glide set*, während theoretische Rechnungen auf geringere Gitterreibung im *Shuffle set* verweisen. Ein postulierter Übergang zwischen der Bewegung von Versetzung im *Glide* und *Shuffle set* bei tiefen Temperaturen ist im Experiment schwierig zugänglich aufgrund der Sprödigkeit der Halbleiter und aufgrund von Phasenübergängen bei plastischer Deformation im Hochlastbereich. Wir verfolgten den Ansatz der Nanoindentierung und konnten das Auftreten des sogenannten *Pop-in*-Sprungs in der Last–Eindringtiefen-Kurve als die homogene Generation von Versetzungen im Falle des GaAs und über Phasenübergänge bei Si interpretieren. Erstmals gelang ein direkter Nachweis der Versetzungen im Transmissionselektronenmikroskop, wobei es sich zeigte, dass die gebildeten Versetzungsschleifen nicht aufgespalten und immobil bei thermischer Aktivierung sind und höchstwahrscheinlich im *Shuffle set* vorliegen.