

## Fehlpassung bei der Homo- und Heteroepitaxie

#### **Birgit Kallinger**

Fraunhofer Institute for Integrated Systems and Device Technology (IISB) Department Crystal Growth / Group Epitaxy

Schottkystr. 10 91058 Erlangen, Germany









## **Gliederung des Vortrags**

- 1. Was ist Epitaxie?
  - 1. Definition, Unterscheidung Homo- und Heteroepitaxie
  - 2. Anwendungen in der Halbleiterindustrie
  - 3. Unterteilung der Epitaxieverfahren
  - 4. Fehlpassung und kritische Schichtdicke
- 2. Heteroepitaxie der Gruppe III-Nitride
  - 1. Gitterfehlpassung
  - 2. Thermische Fehlpassung
  - 3. Resultierende Grenzflächenspannung
- 3. Homoepitaxie von 4H-Siliziumkarbid
  - 1. Dicke 4H-SiC Schichten für Anwendungen in der Leistungselektronik
  - 2. Dotierungsinduzierte Gitterfehlpassung
  - 3. Kritische Schichtdicke
- 4. Zusammenfassung



#### Was ist Epitaxie? Definition und Unterteilung

- Aus dem Griechischen:
  - "epi": auf, über
  - "taxis": ordnen, ausrichten
  - Aufwachsen einer kristallinen Schicht auf einem kristallinen Substrat, wobei mindestens eine kristallographische Orientierung des Substrats durch die Schicht übernommen wird
  - Atterialien von Substrat und Schicht (und damit die Kristallstruktur\*) stimmen überein: Homoepitaxie
  - → Heteroepitaxie: Substrat- und Schichtmaterial stimmen nicht überein





# Was ist Epitaxie?

Anwendungen in der Halbleiterindustrie

- Optoelektronik
  - GaP-System für Leuchtdioden und Laserdioden
  - GaN-System, v.a. für blaue Leuchtdioden
    - → GaN meist als Schichten, als Substrate kaum verfügbar!
- Mikro- und Leistungselektronik
  - Silizium
  - Siliziumkarbid
  - GaN-AIN-Schichten (z.B. HEMT)
- Detektormaterialien
  - CdTe und Mischkristalle





- Chemische Gasphasenabscheidung:
  - Chemical Vapor Deposition (CVD)
  - Metal-Organic Chemical Vapor Deposition (MOCVD)
  - Hydride Vapor Phase Epitaxie (HVPE)
- Physikalische Gasphasenabscheidung (PVD):
  - Molecular Beam Epitaxy (MBE)
  - Ion Beam Assisted Deposition (IBAD)
- Flüssigphasenepitaxie (LPE)





#### Homo- und Heteroepitaxie

Materialeigenschaften und deren Bedeutung für die Epitaxie

Substrat- und Schichtmaterialien können sich u.a. unterscheiden in:

- Kristallstruktur
  - → Entstehung von Mosaizität, Korngrenzen ...
- Gitterkonstanten, wichtig v.a. in-plane Gitterkonstante
  → Gitterfehlpassung
- Thermische Eigenschaften, v.a. thermischer Ausdehnungskoeffizient
   Thermische Fehlmeseurer
  - → Thermische Fehlpassung

### → (temperaturabhängiger) Spannungszustand im Schichtsystem

- Elastische Eigenschaften
  - → Spannungs-/Dehnungsverteilung
  - → Spannungsabbau durch Versetzungsbildung





Gitterfehlpassung und kritische Schichtdicke Pseudomorphes und relaxiertes Schichtwachstum



#### Mit zunehmender Schichtdicke:

- elastische Verspannung des Systems  $\rightarrow$  Waferbiegung
- plastische Deformation → Versetzungsbildung
  - $\rightarrow$  Rissbildung, Bruch



# Crystal Grows

#### Fehlpassung bei der Heteroepitaxie Beispiel III-Nitride: Berechnung der Gitterfehlpassung

alle Gruppe III-Nitride:

- Wurtzit-Struktur
- "lückenlos mischbar"
- Vegard'sche Regel



#### Gitterkonstanten\* der Nitride

	AIN	GaN	InN
a [A]	3,112	3,189	3,545
c [A]	4,982	5,186	5,693



#### Gitterangepasstes Substrat-Schicht-System: Al<sub>0.8</sub>In<sub>0.2</sub>N auf GaN → in allen anderen Kombinationen:

Gitterfehlpassung





#### Fehlpassung bei der Heteroepitaxie Beispiel III-Nitride: Berechnung der thermischen Fehlpassung



#### therm. Ausdehnungskoeffizienten\*

	AIN	GaN	InN
$\alpha_a$ [10 <sup>-6</sup> /K]	4,15	5,59	3,8
$\alpha_{c}$ [10 <sup>-6</sup> /K]	5,27	3,17	2,9

$$\epsilon_{th} = (\alpha_s - \alpha_f) \cdot \Delta T$$

Abkühlung um 1000K: thermische Fehlpassung auf GaN: AIN auf GaN: 1,4 x10<sup>-3</sup> InN auf GaN: 1,8 x10<sup>-3</sup>

thermische Fehlpassung auf AIN: GaN auf AIN:  $-1,4 \times 10^{-3}$ InN auf AIN:  $3,5 \times 10^{-4}$ 





# Fehlpassung bei der Heteroepitaxie

Beispiel III-Nitride: Berechnung der Grenzflächenspannung σ



 $\sigma = \epsilon \cdot M$ 

Elastische Konstanten in [GPa]				
	AIN	GaN	InN	
c_11	410	390	190	
c_12	149	145	104	
c_13	99	106	121	
c_33	389	398	182	
M**	508	478	133	

Electicobo Konstanton in [CPa]\*

- thermische Fehlpassung\*\*\*: ullet
  - AIN auf GaN: 0,7 GPa
  - InN auf GaN: 0,2 GPa
  - GaN auf AIN: -0,7 GPa
  - InN auf AIN: 0,5 GPa
- Gitterfehlpassung: ۲
  - AIN auf GaN: 12 GPa
  - InN auf GaN: -13 GPa
  - GaN auf AIN: -11 GPa
  - InN auf AIN: -16 GPa
- $\rightarrow$  Tensile u/o kompressive Verspannung → Geeignete Pufferschichten



Folie 10 **Birgit Kallinger**  \* von loffe-Homepage/Levinshtein

\*\* biaxialer Modul, abhängig von Spannungszustand

\*\*\* bei 1000 K Abkühlung

#### Fehlpassung bei der III-Nitrid Heteroepitaxie Zusammenfassung

Substrat- und Schichtmaterialien können sich unterscheiden in:

- Kristallstruktur
  → Alle Gruppe III-Nitride: Wurtzit-Struktur
- Gitterkonstanten, in Abhängigkeit der Schichtzusammensetzung
  → Gitterfehlpassung im Bereich 10<sup>-2</sup> bis 10<sup>-1</sup>
- Thermische Eigenschaften, v.a. thermischerAusdehnungskoeffizient  $\rightarrow$  Thermische Fehlpassung im Bereich 10<sup>-4</sup> bis 10<sup>-3</sup> ( $\Delta$ T = 1000K)
- → temperaturabhängiger Spannungszustand im Schichtsystem

... und bei der Homoepitaxie?





#### Anwendung von 4H-SiC in der Leistungselektronik Beispiel PiN-Diode

Vorteile gegenüber Si:

- Bandlücke  $E_g (4H-SiC) = 3,23 \text{ eV}$  $E_g (Si) = 1,12 \text{ eV}$
- geringere elektrische Verluste
  → höhere Energieeffizienz
- hohe thermische Leitfähigkeit und höhere Betriebstemperaturen
   → geringere Kühlung
  - → kleinere und leichtere Leistungsmodule möglich
- für Sperrspannungen > 2 kV: Bipolare Bauelemente

Schematischer Aufbau PiN-Diode (ausgelegt für  $V_{br} = 6,5 \text{ kV}$ ):



- → Aktives Bauelementvolumen nur epitaktisch herstellbar
- → Dicke, homoepitaktische Schichten





#### Anwendungen von 4H-SiC in der Leistungselektronik Bipolardegradation in 4H-SiC: Drift der Vorwärtskennlinie



Flusskennlinien von PiN-Dioden (Sperrspannung 6,5 kV) vor und nach der elektrischen Belastung mit 100 A/cm<sup>2</sup> für 1h.

Im aktiven Bauelementvolumen (= Epitaxieschichten):

- Bildung und Ausbreitung von Stapelfehlern durch "Rekombinations-verstärktes Versetzungsgleiten (REDG)<sup>1</sup>"
- Ausgangspunkt der Stapelfehler: Basalflächenversetzungen in Epitaxieschicht

#### → Unterdrückung der Bipolardegradation: BPD-freie Epischichten

#### → BPDs als misfit dislocations?





#### Homoepitaxie von 4H-SiC Chemical Vapor Deposition: Prozess

#### 4H-SiC Homoepitaxie

- Auf 4H-SiC Substrat, 360 µm dick
- Verkippte Substrate f
   ür Stufenwachstum (Polytypie!)
- Für Anwendungen in der Leistungselektronik
- Dicke Schichten bis 100 µm (etwa 1/4 der Substratdicke)



#### CVD-Prozess:

- Horizontaler hot-wall Reaktor
- Wachstumstemperaturen im Bereich 1450 ℃ bis 1700 ℃
- Wasserstoff als Trägergas
- Silan (SiH<sub>4</sub>) und Propan (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>) als Reaktanden
- Stickstoff (N<sub>2</sub>) und Aluminium (TMA) als Dotierstoffe
- Typische Wachstumsraten\*:
  5 15 μm/h, max. 50 μm/h



## Gitterfehlpassung bei der 4H-SiC Homoepitaxie Bestimmung der Fehlpassung ε<sub>rsm</sub> mittels HRXRD



Reziproke Gitterkarten (RSM)

- Intensitätsverteilung im reziproken Raum um Basisreflexe
- Peakaufspaltung wegen unterschiedlicher Gitterkonstanten von Substrat und Schicht

konventionelle Methode
 ungeeignet f
 r N-dotierte
 Schichten auf n-Substrat



#### Gitterfehlpassung bei der 4H-SiC Homoepitaxie Bestimmung der Fehlpassung durch Biegungsmessungen



- Bestimmung der
  - Schichtdicke h<sub>f</sub>,
  - Substratdicke h<sub>s</sub>,
  - Biegungsdaten (x, h)

$$\varepsilon_{bow} \approx \frac{8h}{x^2} \cdot \frac{h_s^2}{h_f}$$

- Berechnung der Fehlpassung ε<sub>bow</sub>
  nach dem Stoney Modell<sup>1</sup>
  - Voraussetzungen erfüllt
  - Übereinstimmende elastische Eigenschaften von Substrat und Schicht angenommen



vstal Grow



#### Gitterfehlpassung bei der 4H-SiC Homoepitaxie Ursache der Gitterfehlpassung: Dotierungsunterschied?

Wirtsatom/	Kovalenz-	$\Delta r^3$
Dollersloll	radius r	[4 0 25
	[pm]	$[10^{-23} \text{ Cm}^3]$
С	77	
N auf C Platz	70 75	-1,135
Si	117	
Al auf Si Platz	125	+3,515

r: Kovalenzradius des Wirts-/Dotierstoffatoms<sup>2</sup>

- c: Dotierstoffkonzentration [cm<sup>-3</sup>]
- K: Kompressionsmodul, K = 220 GPa
- G: Schermodul, G = 159 GPa

Modell von Jacobson<sup>1</sup>:

- Substitution von Wirtsatomen durch
  Dotierstoffatome mit unterschiedlichen
  Kovalenzradien
- Änderung des Elementarzellvolumens f<sub>s</sub>

$$f_s = 4\pi \cdot c \cdot \Delta r^3 \cdot \frac{3K + 4G}{27K}$$

Berechnung der Fehlpassung  $\epsilon_{ ext{theory}}$ 

$$\mathcal{E}_{theory} = 1 + \frac{1}{f_s - 1}$$



Folie 17 Birgit Kallinger <sup>1</sup> Jacobson et al., APL 82 (2003) 3689.
 <sup>2</sup> S. Hauptmann, G. Mann; Stereochemie. Spektrum Akadem. Verlag, Heidelberg, 1996.

#### Gitterfehlpassung bei der 4H-SiC Homoepitaxie Vergleich von Experiment und Theorie (Jacobson-Modell)



- Kovalenzradius von Stickstoff:
  - Literaturwerte streuen:70 pm bis 75 pm
  - r(N) als Fitparameter
    für Jacobson-Modell:
    → r\* = 66 pm

→ quantitative Übereinstimmung bei N-dotierten Schichten mit effektivem Kovalenzradius

#### →quantitative Übereinstimmung bei Al-dotierten Schichten





#### Kritische Schichtdicke bei der 4H-SiC Homoepitaxie Modell von Matthews und Blakeslee<sup>1</sup>

## $\mathbf{h}_{\mathbf{f}}(\varepsilon) < \mathbf{h}_{\mathbf{krit}}$

- elastische Verspannung
- keine Fehlpassungsversetzungen
- Versetzungen aus Substrat pflanzen sich fort

## $h_{f}(\varepsilon) > h_{krit} (MB)$

- plastische Verformung
- Gleiten des TED-Segments in der Schicht
- BPD-Segment in Grenzfläche
  - = Fehlpassungsversetzung
- an Oberfläche nicht nachweisbar







#### Kritische Schichtdicke bei der 4H-SiC Homoepitaxie Vergleich von Experiment und Theorie (MB-Modell)





Folie 20 Birgit Kallinger



- Epitaxie ist ein Verfahren von großer technologischer Bedeutung
- Fehlpassung ist ein grundlegendes Thema bei der Epitaxie
- Fehlpassung bei der Heteroepitaxie (III-Nitride auf GaN):
  - Gitterfehlpassung im Prozentbereich
  - Thermische Fehlpassung ~ 100x geringer
  - Temperaturabhängiger Spannungszustand
- Fehlpassung bei der Homoepitaxie (4H-SiC):
  - Dotierungsinduzierte Fehlpassung
  - Kritische Schichtdicke bei dicken Schichten!



© Fraunhofer IISB / Kurt Fuchs

