

Thesen zur Dissertation A

Untersuchungen zur Zinkdiffusion in Indiumphosphid

dem wissenschaftlichem Rat der Universität Leipzig
eingereicht von

Diplom-Kristallograph Michael Lux

angefertigt an der Universität Leipzig / Fachbereich Chemie

August 1992

InP ist ein Halbleitermaterial, dessen spezielle physikalischen Eigenschaften seinen Einsatz in der Kommunikationstechnik, insbesondere in opto-elektronischen und informationsverarbeitenden Bauelementen ermöglichen. Mit der zunehmenden Bedeutung, die dem Fortschritt auf diesem Gebiet beigemessen wird, wächst die Notwendigkeit, die verwendeten Materialsysteme bis in die Ebene der atomaren Wechselwirkungen umfassend zu charakterisieren.

InP liegt als Substratmaterial oder Epitaxieschicht vor. Als Verfahren zur Herstellung von p-leitenden Kontaktschichten oder p-n-Übergängen spielt die Diffusion mit Zink eine besondere Rolle. Während aber, z.B. bei der Zinkdiffusion in GaAs, die Konzentration der freien p-Ladungsträger der Zinkkonzentration im GaAs entspricht, zeigt sich bei der Diffusion in InP eine deutliche Diskrepanz zwischen der Zinkkonzentration und der bis zu zwei Größenordnungen niedrigeren freien Ladungsträgerkonzentration. Ein tieferes Verständnis der Vorgänge während der Zinkdiffusion, soll die Grundlage für die Interpretation der niedrigen elektrischen Effizienz des Zinkeinbaus bilden und Möglichkeiten eröffnen, die vorgefundenen Verhältnisse gezielt zu beeinflussen.

1. Die Diffusion erfolgt mit einem halboffenen Verfahren. Damit werden, bei einer Temperatur von 700°C , Zinkkonzentrationen bis zu $1.5 \cdot 10^{20} \text{cm}^{-3}$ im InP erreicht.
2. Als Quellenmaterial wird ein Gemisch aus Zn_3P_2 , ZnP_2 und InP eingesetzt. Alle drei Substanzen liegen bei Diffusionstemperatur (700°C) als feste Stoffe vor und bilden im Phasendiagramm In-P-Zn die Randkomponenten eines Stabilitätsgebietes. Damit werden während der Diffusion, auch bei Fluktuationen der Quellenzusammensetzung, konstante Partialdampfdruckverhältnisse über der Probe erreicht.
3. An InP-Proben, die mit Zink im Konzentrationsbereich von $1 \dots 1.5 \cdot 10^{20} \text{cm}^{-3}$ dotiert sind, wird bei Raumtemperatur eine freie p-Ladungsträgerkonzentration von $1 \dots 2 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$ gemessen.
4. Die Aktivierungsenergie für die Zinkdiffusion mit dem halboffenen Verfahren beträgt $1.68 \mp 0.15 \text{ eV}$.
5. Die Zinkkonzentrationsprofile nach der Diffusion zeigen einen Verlauf, der mit der Lösung der komplementären Fehlerfunktion allein, als Mittel der mathematischen Modellierung, nicht zu beschreiben ist. Die Zinkkonzentration zeigt einen stetigen, leichten Rückgang über die gesamte Eindringtiefe und fällt an der Diffusionsfront steil ab.
6. Ein zweiter, flacher Konzentrationsausläufer tritt bei der Zinkdiffusion in InP:Fe auf. Seine Eindringtiefe ist größer als die der steilen Diffusionsfront, die Zinkkonzentration in diesem Bereich liegt bei $5 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$. Es entsteht ein p⁻-Substrat-Übergang. Die Aktivierungsenergie für die Diffusion in diesem flachen Konzentrationsbereich beträgt $1.65 \mp 0.15 \text{ eV}$.

7. Die Eindringtiefe des flachen Konzentrationsausläufers verhält sich entsprechend der Addition der Diffusionszeiten, wenn eine zinkdiffundierte Probe in zinkfreier Atmosphäre getempert und anschließend erneut Zink eindiffundiert wird, während die steile Diffusionsfront nach der zweiten Diffusion wieder die gleiche Eindringtiefe zeigt, wie sie nach der ersten Diffusion gefunden wird.

8. Durch Temperaturnachbehandlung können in InP-Proben, in die Zink eindiffundiert wurde, die Konzentrationsverhältnisse und die elektrischen Parameter gezielt verändert werden. Proben, die nach der Diffusion in einer zinkfreien Atmosphäre getempert werden, ($T_{\text{Temp}} = T_{\text{Diff}}$; $t_{\text{Temp}} = 3 * t_{\text{Diff}}$) weisen noch Zinkkonzentrationen von etwa 10 % des Ausgangswertes auf. Die freie p- Ladungsträgerkonzentration hat sich erhöht und entspricht der Zinkkonzentration. Das nach dem Tempern im InP-Gitter verbliebene Zink ist vollständig aktiv als freier Akzeptor.

9. Konzentrationsprofile, die sich nach dem Tempern einstellen, zeigen Kastenform und sind gegenüber einer weiteren Temperaturbehandlung stabil.

10. Ausdiffusionseffekte durch Tempern treten schon bei kürzeren Zeiten als den Diffusionszeiten und niedrigeren Temperaturen als den Diffusionstemperaturen auf.

11. Das eindiffundierte Zink im InP existiert in zwei Fraktionen. Ein Teil des Zinks ist als Akzeptor fest auf Indiumgitterplätzen eingebaut (substitutioneller Einbau), der größere Teil relativ leicht beweglich im Zwischengitter (interstitieller Einbau). Auf die Größe dieses interstitiellen Anteiles wird durch die Temperbehandlung Einfluß genommen .

12. In einer mit Zink diffundierte Probe befinden sich etwa 90 % des eingebauten Zinks auf Zwischengitterplätzen, ca

10 % ist substitutionell eingebaut. Die Zahl der freien p-Ladungsträger entspricht 20 % der substitutionellen Konzentration (Akzeptorkonzentration).

13. Ein Teil der Akzeptoren (Zn_{In}^-) wird durch geladene Zinkinterstitiells (Zn_i^+) kompensiert, wobei die Ionisierung der Zinkinterstitiells durch die unmittelbare Nachbarschaft von Zinkakzeptoren induziert und stabilisiert würde. Es kommt offenbar zur Bildung elektrisch neutraler Akzeptor-Donator-Komplexe: $(Zn_{In}^- - Zn_i^+)^0$. Da die Akzeptoren mitverantwortlich für diese Komplexbildung sind, begrenzen sie gleichzeitig deren Zahl. Es tritt keine vollständige Kompensation auf.

14. Die Zinkatome, welche als Zwischengitteratome im InP eingebaut sind, befinden sich in den tetraedrisch koordinierten Lücken des InP-Gitters (Zinkblendestruktur).

15. Die Donator-Akzeptor-Komplexe, die nach der Diffusion für die niedrige freie Ladungsträgerkonzentration verantwortlich sind, dissoziieren während der Temperung, das interstitielle Zink diffundiert aus dem Kristall und alle Zinkakzeptoren können zur Konzentration der freien Ladungsträger beitragen.

16. Die Konzentration der Zwischengitteratome nach der Temperung beträgt noch etwa 1 % des Wertes nach der Diffusion, die Konzentration des substitutionell eingebauten Zinks bleibt fast unverändert.

17. Eine phänomenologische Beschreibung der Zinkdiffusion ist auf Basis der Annahme möglich, daß sich die gesamte, im InP gelöste Zinkmenge, aus einem substitutionell und einem interstitutionell gelösten Anteil zusammensetzt. Im Bereich der Diffusionsfront erfolgt der Zinkeinbau bevorzugt auf Indiumvakanzten, also substitutionell. Die Grenze der substitutionellen Löslichkeit im InP wird dann erreicht, wenn

aufgrund defektchemischer Zusammenhänge die Neubildung von Indiumvakanzten gehemmt wird. Überschreitet die Zinkkonzentration diesen Wert, wird alles weitere Zink im Zwischengitter eingebaut und diffundiert dort ohne Platzwechsellvorgänge über reguläre Gitterplätze.

18. Die numerische Modellierung der erhaltenen Profile trägt dem Wechsel in der Dominanz des Einbaumechanismus Rechnung. Das geschieht, indem neben der komplementären Fehlerfunktion, mit der die Diffusion im Zwischengitter beschrieben werden kann, noch eine Exponentialfunktion eingeführt wird, die die energetischen Wechselwirkungen an der Diffusionsfront einbezieht.