

Teil I: Kurzbericht

Projekt: Halbleiter-Quantenprozessor mit shuttlingbasierter skalierbarer Architektur (QUASAR)

Teilvorhaben: Mikroskopische materialwissenschaftliche Charakterisierung von Heterostrukturen und Quanten-Bauteilen

Zuwendungsempfänger: Leibniz-Institut für Kristallzüchtung (IKZ)

Förderkennzeichen: 13N15659

Laufzeit: 01.02.2021 – 31.01.2025

Projektziel und Ausgangslage

Das BMBF-Verbundprojekt QUASAR hatte das Ziel, eine skalierbare Quantenprozessor-Architektur auf Basis von Silizium-Spin-Qubits zu entwickeln.

Im Rahmen des Forschungsprojekts QUASAR („Halbleiter-Quantenprozessor mit shuttlingbasierter skalierbarer Architektur“) untersuchte das Leibniz-Institut für Kristallzüchtung (IKZ) die strukturellen Grundlagen von Silizium-basierten Quantenbauelementen. Ziel war es, durch mikroskopische Materialanalysen die physikalischen Ursachen für Defekte und Inhomogenitäten in Si/SiGe-Heterostrukturen zu identifizieren, welche die Funktionalität von Quantenbits (Qubits) negativ beeinflussen können. Die Funktionalität solcher Quantenbauteile hängt entscheidend von der strukturellen Qualität der Materialien ab. Fehlpassungsversetzungen, Gitterverzerrungen oder Unschärfen an den Grenzflächen können die sogenannte „Valley-Aufspaltung“ und damit die Steuerbarkeit und Kohärenz der Qubits beeinträchtigen. Ziel des Projekts war es daher, die Ursachen solcher strukturellen Inhomogenitäten zu identifizieren, bildgebend darzustellen und besser zu kontrollieren. Damit wurde an den aktuellen wissenschaftlich-technischen Stand angeknüpft, wonach die strukturelle Qualität auf atomarer Skala entscheidend für Kohärenz und Fehlerfreiheit in Quantenprozessoren ist.

Projektverlauf

Das Projekt gliederte sich in mehrere Arbeitspakete, in denen unterschiedliche Aspekte der Materialqualität untersucht wurden. Zunächst wurde die Qualität der epitaktisch gewachsenen Si/SiGe-Schichten mithilfe hochauflösender Mikroskopie untersucht. Hier kamen unter anderem Transmissionselektronenmikroskopie (TEM), Electron Channeling Contrast Imaging (ECCI) und Röntgenbeugungsverfahren wie XRR und SXDM zum Einsatz.

Im weiteren Verlauf wurde auch der Einfluss späterer Prozessschritte – insbesondere der elektrischen Gate-Metallisierung – auf die strukturelle Qualität analysiert. Diese Metalllagen können mikroskopische Spannungsfelder erzeugen, die sich negativ auf die Funktionsweise der Qubits auswirken. Zur hochpräzisen Untersuchung dieser Effekte wurde unter anderem Scanning X-ray Diffraction Microscopy (SXDM) an Synchrotronquellen eingesetzt. In einem späteren Projektabschnitt kamen ergänzend STEM und Bragg Coherent Diffraction Imaging (Bragg-CDI) zum Einsatz, um Gitterverzerrungen in funktionsfähigen Bauteilen mit noch höherer räumlicher Auflösung zu untersuchen. In enger Zusammenarbeit mit Partnern wie dem Leibniz-Institut für innovative Mikroelektronik (IHP), der Jülich Aachen Research Alliance (JARA), Infineon Dresden und dem Europäischen Synchrotron (ESRF) wurde die strukturelle Entwicklung der Quantenmaterialien von der Epitaxie bis zum fertigen Bauteil begleitet und systematisch analysiert.

Die Charakterisierung gliederte sich in vier Hauptbereiche:

1. **Strukturelle Optimierung während des Wachstums** (z. B. durch Reduktion von Versetzungsdichten)
2. **Einfluss späterer Verarbeitungsschritte** (z. B. Wärmebehandlung, Gate-Metallisierungen)

3. **Zusammenhang zwischen Struktur und Funktion der Bauteile**
4. **Weiterentwicklung der Messtechnik zur schnellen Defekterkennung**

Wesentliche Ergebnisse

1. **Optimierung der Heterostrukturen**

Durch gezielte Anpassung der Schichtdicken, des Germaniumgradienten sowie der Wachstumstemperatur konnte die Versetzungsdichte signifikant reduziert werden. Insbesondere die kritische Dicke der Silizium-Quantentopfschicht, ab der plastische Relaxation auftritt, wurde auf etwa 8 nm bestimmt – deutlich niedriger als bisher angenommen. Damit konnte ein wesentlicher Beitrag zur Stabilisierung der elektronischen Eigenschaften geleistet werden.

2. **Prozessbedingte Veränderungen identifiziert**

Es zeigte sich, dass spätere Verarbeitungsschritte wie das Tempern oder das Aufbringen von Metallelektroden zu Grenzflächenverbreiterung und mechanischem Stress führen können. Diese Effekte beeinflussen maßgeblich die Kohärenzeigenschaften der Qubits. So konnten lokale Gitterverzerrungen unterhalb von Gatterstrukturen nachgewiesen werden, die sich auf die elektrische Tunnelkopplung und Valley-Aufspaltung auswirken – zentrale Parameter für die Funktion von Qubit-Ketten („Shuttling“).

3. **Struktur-Funktions-Korrelation nachgewiesen**

In funktionalen Bauteilen wurde nachgewiesen, dass spezifische strukturelle Defekte (z. B. Versetzungen) direkt mit Störungen im elektrischen Verhalten der Qubits korrelieren. Dadurch wurde ein direkter Nachweis der funktionalen Relevanz solcher Defekte möglich.

4. **Metrologie-Innovationen**

Das IKZ konnte mit ECCI ein robustes Verfahren zur schnellen, zerstörungsfreien Defekterkennung etablieren – ideal für großflächige Serienanalysen. Auch SXDM wurde erfolgreich eingesetzt, um mechanische Spannungen auf Nanoskala sichtbar zu machen. Diese Methoden stehen nun für weiterführende Forschungs- und Entwicklungsarbeiten zur Verfügung.

Das Teilvorhaben hat damit entscheidende Beiträge zum strukturbasierten Verständnis und zur technologischen Verbesserung von Si/SiGe-basierten Quantenbauelementen geliefert. Die entwickelten Charakterisierungsverfahren und Erkenntnisse zu kritischen Material- und Prozessparametern leisten einen wichtigen Beitrag zur Skalierung und industriellen Reife zukünftiger Quantenprozessoren. Besonders hervorzuheben ist die enge Kooperation mit den Projektpartnern, die eine direkte Anwendung der Ergebnisse auf reale Bauteile ermöglichte und eine realistische Perspektive auf technologische Verwertung ergibt.

Teil II: Eingehende Darstellung

Projekt: Halbleiter-Quantenprozessor mit shuttlingbasierter skalierbarer Architektur (QUASAR)

Teilvorhaben: Mikroskopische materialwissenschaftliche Charakterisierung von Heterostrukturen und Quanten-Bauteilen

Zuwendungsempfänger: Leibniz-Institut für Kristallzüchtung (IKZ)

Förderkennzeichen: 13N15659

Laufzeit: 01.02.2021 – 31.01.2025

II-1. Verwendung der Zuwendung und erzielte Ergebnisse im Vergleich zum ursprünglichen Vorhaben

Das Teilvorhaben orientierte sich eng an der ursprünglichen Planung und Zielsetzung. Im Antrag wurde die Notwendigkeit einer tiefgehenden strukturellen Charakterisierung von Si/SiGe-Heterostrukturen für Qubit-Anwendungen hervorgehoben. Ziel war es insbesondere, Defekte und Inhomogenitäten in epitaktisch gewachsenen Quantentopfstrukturen zu identifizieren und quantifizieren, sowie deren Einfluss auf elektronische und quantendynamische Eigenschaften zu verstehen. Einzelne Teilaspekte, etwa zur Grenzflächenschärfe oder Versetzungsbildung, wurden auf Basis neuer Erkenntnisse vertieft. Der Aufbau und die Weiterentwicklung komplexer Röntgen- und Elektronenmikroskopiemethoden wurden dabei erfolgreich verfolgt.

Die Zuwendung umfasste hauptsächlich Personalmittel, welche die Umsetzung des Arbeitsplans ermöglichte. Dieser wurde von den IKZ Wissenschaftlern Dr. Carsten Richter und MSc. Chen-Hsun Lu bearbeitet. Unterstützung kam dabei von anderen IKZ Gruppen, von Konsortialpartnern realisiert sowie von Wissenschaftlern des Europäischen Synchrotrons (ESRF).

Im Folgenden werden die Ergebnisse des Vorhabens im Rahmen der einzelnen Arbeitspakete (AP) und im Kontext der zu erfüllenden Meilensteine dargelegt. Relevant für dieses Teilprojekt sind dabei die Arbeitspakete und 1.3 und 1.4 der Gesamtvorhabensbeschreibung und deren Unterpunkte.

II-1.1: Strukturelle Charakterisierung zur Optimierung der Epitaxie

Eine zentrale Aufgabe in diesem Teilprojekt war die detaillierte Charakterisierung von strukturellen Inhomogenitäten im epitaktischen Schichtsystem und jeglichen Abweichungen von der idealen Heterostruktur welche als Basis für die Herstellung von Quanten-Bits (Qubits) dienen. Abbildung 1a veranschaulicht graphisch verschiedene auftretende strukturelle Inhomogenitäten welche signifikanten Herausforderungen für die Anwendung von Halbleiter-Heterostrukturen in Q-Bit-Bauelementen darstellen. Dazu zählen:

- **Fehlpassungsversetzungen**, die durch Relaxation von elastischem Stress an der Grenzfläche zwischen Schichten mit unterschiedlicher Zusammensetzung (hier Ge-Konzentration) entstehen und Streufelder erzeugen können,
- **Cross-Hatch-Muster** infolge der plastischen Relaxation, die großflächige Modulationen von Zusammensetzung und elastischem Stress verursachen,
- **Lokale Gitterverzerrungen und Fluktuationen der Ge-Konzentration**, die zu Inhomogenitäten der elektronischen Eigenschaften (der Bandstruktur) und damit zu einer reduzierten Kohärenzzeit führen,
- **thermisch getriebene Interdiffusion an Grenzflächen**, die die Schärfe und Symmetrie des Quantentopfes (QW, s. Abb. 1) beeinträchtigt,

- **lokaler mechanischer Stress durch Gatterelektroden**, der zusätzliche Gitterverzerrungen hervorrufen,
- **Oxidation der Barrierschicht**, insbesondere an Grenzflächen zu den Dielektrika,
- **Durchstoßversetzungen**, die aus unteren Schichten bis in die aktive Zone vordringen und dort die elektronische Kohärenz beeinträchtigen.

Da sich diese strukturellen Merkmale auf zentrale Kennzahlen der Qubit-Bauteile, wie zB Valley-Aufspaltung, Ladungseinschluss und Dekohärenzmechanismen, auswirken, wurden sie im Projekt systematisch untersucht.

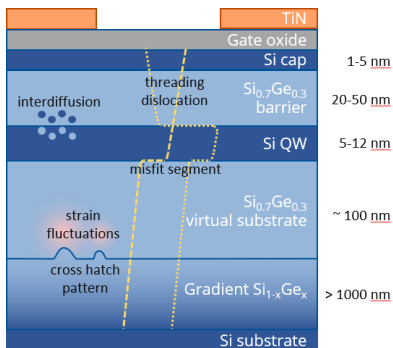


Abb. 1: Veranschaulichung der Hauptmerkmale, Defekte und Inhomogenitäten in Si/SiGe Spin-Qubit Halbleiter Bauteilen.

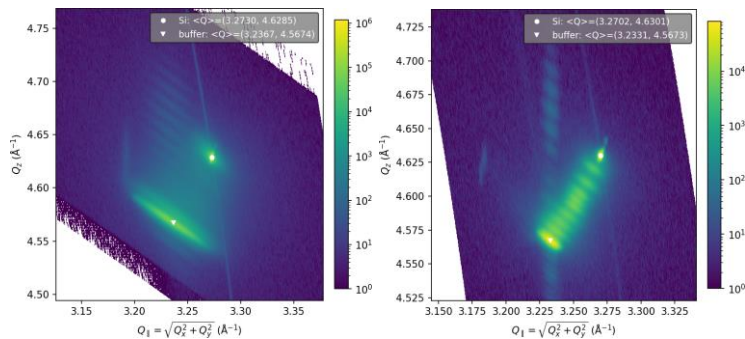


Abb. 2: Typische 2D-Röntgenbeugungsdaten einer Silizium Quantentopf-Schicht auf relaxiertem $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ Puffer mit abgestuftem Germaniumanteil x . Links: ein hoher Grad der Gittermosaizität ist aus der Verbreiterung des Signals der Pufferschicht zu erkennen. Rechts: Nach Optimierung der Heterostruktur.

Im AP 1.3 „*Makroskopische strukturelle Charakterisierung*“ des Verbundprojekts wurde im Schulterchluss mit dem Leibniz-Institut für innovative Mikroelektronik („Innovations for High Performance“, IHP) eine kontinuierliche Verbesserung der Materialhomogenität und -eigenschaften bei der Herstellung der Quantentopf-Heterostrukturen angestrebt. Das IKZ übernahm dabei einen Teil der Materialcharakterisierung. „*Makroskopische Charakterisierung*“ verweist in diesem Zusammenhang auf laborbasierte Analysemethoden mit hohem Durchsatz, wie hochauflösende Röntgenbeugung (HR-XRD), Röntgenreflektometrie (XRR), Rasterelektronenmikroskopie (REM), Energiedispersive Röntgenspektroskopie (EDX). Insbesondere die REM-basierte Methode „Electron Channeling Contrast Imaging (ECCI)“ hat sich als wirksames Mittel zur Charakterisierung von Gitterdefekten in den Quanten-Topf Schichtstapeln herausgestellt. Im engen Austausch mit IHP wurden darauf aufbauend die Wachstumsparameter kontinuierlich optimiert.

Im AP 1.4.1 „*Mikroskopische strukturelle Charakterisierung*“ wurden aufwändigere Untersuchungen durchgeführt um gezielt spezifische wissenschaftliche Fragen zu untersuchen, die im Zusammenhang mit Gitterinhomogenitäten auf Längenskalen der Qubits stehen. Dies betraf unter anderem die Ursachen für die Bildung von Fehlpassungsversetzungen im Quantentopf, für die Verbreiterung von Quantentopf-Grenzflächen oder den Einfluss der Bauteilfabrikation im Anschluss an die Epitaxie. In diesem AP kommen zusätzlich Methoden wie Transmissionselektronenmikroskopie (TEM), (Raster-)Röntgenmikroskopie (SXDM) und ähnliche zum Einsatz.

Ergebnisse:

A. Design des relaxierten SiGe Buffers: Um einen definierten Verspannungszustand in den funktionellen Schichten zu realisieren wird ein $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ Substrat mit einer bestimmten Germaniumkonzentration x benötigt. Diese werden mittels Pufferschichten aus Silizium-Substraten realisiert, in denen die Germaniumkonzentration graduell gesteigert wird. Die Pufferschichten werden am IHP,

wie der gesamte Schichtstapel, mit metallorganischer Gasphasenepitaxie (MOVPE) gewachsen. Verschiedene Designs dieser Gradienten wurden in Betracht gezogen und getestet und die Auswirkungen auf die Gitterqualität charakterisiert. Beste Ergebnisse wurden mit stufenweisem Erhöhen der Germaniumkonzentration erreicht, wobei die Dicke der (5 bis 10) Stufen von 50 nm auf 500 nm erhöht wurde. Die Versetzungsdichte sowie die Mosaizität der Pufferschicht konnte so reduziert werden (s. Abb. 2). Der Einfluss des chemomechanischen Polierens (CMP) der Pufferschicht vor dem Wachstum der Heterostruktur wurde untersucht, da dadurch eine Erhöhung der Versetzungsdichte vermutet wurde. Letzteres konnte jedoch mit systematischen ECCL- und TEM-Untersuchungen ausgeschlossen werden (s. Abb. 3), wodurch der CMP Schritt jetzt standardmäßig Teil des Schichtwachstums ist. Die Dichte der Durchstoßversetzungen konnte hier von $1 \times 10^7/\text{cm}^2$ auf $3 \times 10^5/\text{cm}^2$ verringert werden.

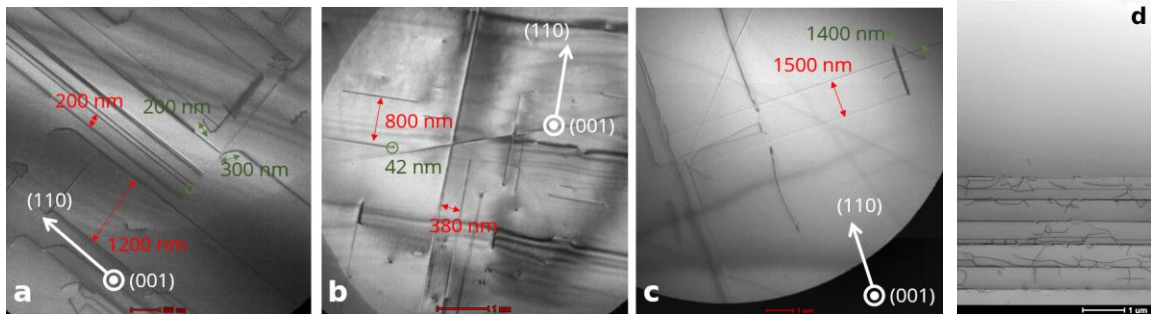


Abb. 3: Plastische Relaxation der Pufferschicht erfordert den Einbau von Fehlpassungsversetzungen (s. Querschnitt in d). Ein Teil der Versetzungen folgt der Wachstumsrichtung und erreicht die Quantentopfschicht (s. Draufsicht a-c). In a-c sind diese Durchstoßversetzungs-Segmente beispielhaft grün markiert. Durchstoßversetzungen in der Quantentopfschicht neigen zum Abbau des elastischen Stresses über Gleiten, und hinterlassen so Fehlpassungsversetzungen in der Quantentopfschicht (Linien in a-c, rote Markierungen). Das Weglassen der chemo-mechanischen Politur in b führte nicht zu einer signifikanten Verringerung der Versetzungsdichte (vgl. a). Das Wachstum einer Pufferschicht mit flacheren Konzentrationsgradienten (c) führte jedoch zum gewünschten Ergebnis einer Verringerung der Versetzungsdichte um den Faktor ~ 30 .

- B. Oberflächenmodulationen (“Cross-Hatch-Pattern”):** Beim Wachstum des Schichtstapels entstehen Höhenmodulationen an der Oberfläche, welche durch lokale Unterschiede in der Wachstumsrate entstehen. Ursache dafür sind Versetzungen die im Zuge der Plastischen Relaxation der Pufferschicht entstehen und weitreichende Variationen der Gitterparameter verursachen [1]. Diese Variationen finden auf einer Längenskala entsprechend der Dicke der plastisch relaxierten Schicht („virtual substrate“ in Abb. 1, bzw. „constant composition buffer“) statt und nimmt in Amplitude mit zunehmender Dicke ab. Beste Ergebnisse werden daher mit einer möglichst hohen Dicke der relaxierten Schicht von mehreren Mikrometern erreicht. Die Höhenmodulationen an der Oberfläche werden anschließend per CMP Schritt planarisiert. Jedoch bleiben Gitterparameter-Variationen und der damit verbundene Stress im Material zurück [2]. Diese führen wiederum zu unterschiedlichen Wachstumsraten nach dem CMP Schritt [3], weshalb es sich empfiehlt, die Gesamtdicke nach der CMP gering (etwa 100 nm) zu halten.
- C. Plastische Relaxation der Aktiven Quantentopf-Schicht:** Zentrale Voraussetzung der Qubit-Funktion ist das Aufheben der Entartung der Leitungsband-Minima (sogenannte Δ -Täler) der **Siliziumschicht**, welche als Quantentopf fungiert und das Qubit beherbergt. Im QUASAR Projekt wird diese Siliziumschicht durch das Wachstum auf dem virtuellen $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ Substrat lateral epitaktisch

verspannt. Die Verspannung verschieb die Bandminima entlang der 6 $\langle 100 \rangle$ -Richtungen und senkt die $\pm k_z$ -Täler (senkrecht zur Schichtebene) energetisch ab. Die verbleibende Zwei-Täler-Entartung ($\pm k_z$) wird durch Grenzflächeneffekte, atomare Stufen oder elektrische Felder weiter aufgespalten. Ein wesentliches Ergebnis des Projekts ist, dass eine plastische Relaxation einer der Gitterverspannung der $\text{Si}/\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$ Quantentopf-Schichten bereits ab einer Dicke von 8 nm einsetzt. Die kritische Dicke der plastischen Relaxation wurde zuvor mit etwa 15 nm überschätzt, da der grundlegende Mechanismus der Relaxation über Gleiten vorhandener Durchstoßversetzungen anstatt über Nukleation von Fehlpassungsversetzungen stattfindet. Die gefundene kritische Dicke passt zur Vorhersage über den kritischen Stress zur Mobilisierung von Durchstoßversetzungen in $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, wie sie in der Theorie von Matthews&Blakeslee beschrieben ist [4]. Die durch Gleiten entstandenen Fehlpassungssegmente von zuvor vorliegenden Durchstoßversetzungen sind in Draufsicht-TEM oder ECCI aufnahmen als gerade Linien entlang der Kristallografischen $\langle 100 \rangle$ -Richtungen zu erkennen (s. Abb. 3 und Abb. 4). Da die Fehlpassungssegmente an der unteren Grenzfläche der Quantentopf-Schicht verlaufen, wo sie die Gitterverspannung lokal relaxieren, Störung sie lokal die Bandstruktur [5]. Aufgrund der makroskopischen Ausdehnungen der 1D Fehlpassungssegmente in der 2D Grenzfläche ist eine Störung von Qubit oder QuBus Bauteilen sehr Wahrscheinlich. Verlaufs Das Wachstum von Quantentopf-Schichten mit einer Dicke von 7 nm erlaubt jedoch eine komplette Unterdrückung der Fehlpassungssegmente (s. Abb. 4). Ein alternativer Ansatz besteht darin, das Gleiten kinetisch durch eine abgesenkte Wachstumstemperatur zu hemmen [6]. Dieser Ansatz ist vorrangig eine Option für Molekularstrahlepitaxie (MBE), die optimalen Wachstumstemperaturen für MOVPE liegen jedoch schon über der kritischen Temperatur (etwa 400°C-500°C) zur Aktivierung des Gleitprozess.

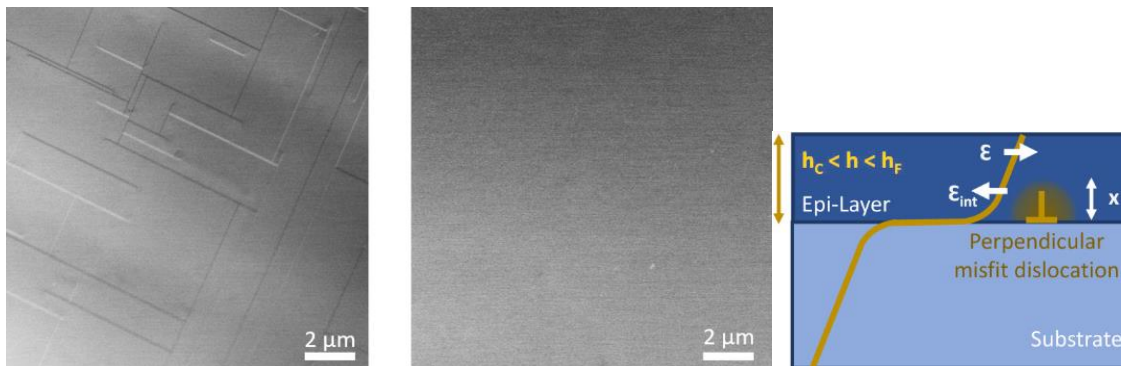


Abb 4. Electron-Channeling Kontrast Bilder der Silizium-Quantentopfschicht mit 10 nm Dicke (links), was dem Ursprünglichen Design im Projekt entsprach, im Vergleich zu einer 5 nm dicken Schicht (Mitte). Unterhalb einer kritischen Dicke von etwa 7.5 nm ist plastische Relaxation über die Bildung der Fehlpassungsversetzungen energetisch ungünstig. Über der kritischen Dicke ist der integrale Stress auf die Versetzung ausreichend um Gleiten anzuregen (rechts), jedoch kommt der Gleitprozess zum Stehen, sobald die Versetzung mit einer anderen interagiert, da letztere den Stress lokal abbaut („Blocking“, [4]).

- D. Optimierung der Silizium-Deckschicht:** Ein relevanter Parameter bei der Herstellung von Qubit-Bauteilen auf $\text{SiGe}/\text{Si}/\text{SiGe}$ Quantentöpfen ist die **Dicke der obersten epitaktischen Schicht** aus Silizium („Si cap“, s. Abb. 1). Da im Zuge der Prozessierung von Bauteilen ein gewisser Teil der Schicht (abhängig vom Prozess) konsumiert wird, muss diese Deckschicht eine angepasste Mindestdicke aufweisen. Andererseits führen zu hohe Schichtdicken ab etwa 5 nm im finalen Bauteil zur Ausbildung eines zweiten Quantentopfs und zu damit verbundenen Interferenzen der eigentlichen elektrischen Signale. Im Projekt wurde daher eine möglichst genaue Bestimmung der Schichtdicken mit sub-Nanometer-Präzision angestrebt und verschiedene Methoden zur Bestimmung der Dicken gegeneinander kalibriert. Am IHP wird standardmäßig und prozessbegleitend

Ellipsometrie eingesetzt. Die Ergebnisse einer Probenserie mit steigender Schichtdicke der Deckschicht wurden am IKZ mit Röntgenreflektometrie (XRR) verglichen. Um routinemäßig genaue Werte von realistischen Heterostrukturen zu bekommen, wurden beide jeweils komplette Schichtstapel (s. Abb. 1) vermessen, anstatt ausschließlich einzelne Deckschichten zu untersuchen. Einzelne Proben wurden anschließend mit TEM Daten verglichen um die absolute Präzision einzuschätzen (s. Abb. 5). Abb. 6 zeigt die so gewonnene Kalibrierkurve. Die Kurve zeigt einen linearen Zusammenhang zwischen Ergebnissen der Ellipsometrie bzw. XRR. Allerdings ergibt sich ein konstanter Offset von 1.3 nm. TEM Ergebnisse liegen etwa in der Mitte der Werte von Ellipsometrie und XRR. Zentrales Ergebnis hier ist eine robuste, routinemäßige Bestimmung der Relevanten Schichtdicken der Quantentopf-Heterostrukturen mit einer Genauigkeit von etwa 0.5 nm und eine genauere Kalibrierung der Ellipsometriedaten speziell für solche Schichtstapel.

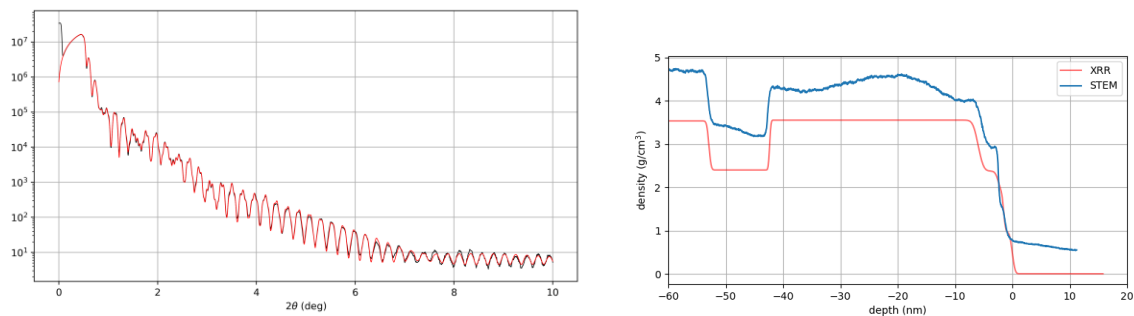


Abb. 5: Robuste Metrologie der Dicken, Grenzflächen und Dichten im Schichtstapel. Links: XRR Rohdaten (schwarz) überlagert mit der Simulation (rot). Rechts: Vergleich der Dichteprofile aus XRR und Querschnitt-TEM.

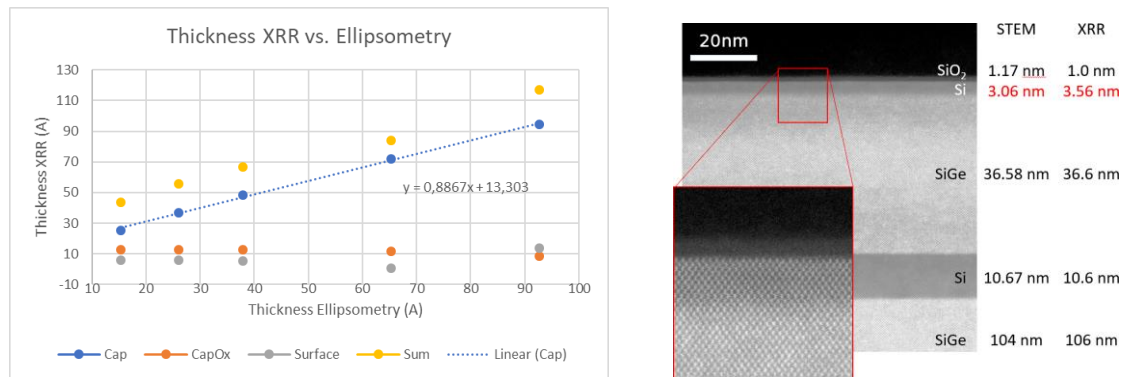


Abb. 6: Links: Ergebnisse der Kalibrierung der In-Line Ellipsometrie mit XRR und TEM. Rechts: Abgleich der Schichtdicken aus XRR und Querschnitt-TEM.

- E. Grenzflächenschärfe der Epitaktischen Schichten:** Die Entartung der $\pm k_z$ -Täler in Silizium-Quantentöpfen (Si-QWs) ist ein zentrales Problem für die Realisierung robuster **Elektronenspin-Qubits**, da ein nicht-entarteter Grundzustand notwendig ist. Die Aufhebung („Splitting“) der sogenannten **"Valley-Entartung"** (Valley degeneracy) zwischen den beiden z-Achsen-Tälern ist ein zentraler Performance-Parameter im Bereich der SiGe-Halbleiterqubits. Neben dem Anlegen magnetischer oder elektrischer Felder gelten auch bestimmte strukturelle Parameter als Hebel um das „**Valley-Splitting**“ (Δ_v) zu erhöhen. Diese umfassen im Wesentlichen das Germanium-Profil in Wachstumsrichtung. **Atomar glatte Grenzflächen** zwischen der Si-Schicht und dem SiGe-

Barrierematerial führen zu konstruktiver oder destruktiver Interferenz der Elektronenwellenfunktionen in $\pm k_z$ -Tälern. Eine ideal scharfe Grenzfläche liefert das größte Δ_v , jedoch erschienen im Projektzeitraum theoretische Arbeiten, die positiven Einfluss von Grenzflächenverbreiterung auf Δ_v vorhersagen [7], sofern die Grenzflächen eine Breite von etwa 4 Monolagen überschreiten. In weiteren Arbeiten wurden komplexe Germaniumprofile zur Erhöhung des Valley-Aufspaltung vorgeschlagen [8].

Essentiell für dieses Teilprojekt ist die hohe Relevanz von Grenzflächenbreite und Germaniumprofil für die Verbesserung der Valley-Aufspaltung. In diesem Arbeitspaket wurde deshalb der Einfluss der Wachstumsbedingungen auf die Durchmischung von Silizium und Germanium an den Grenzflächen mittels Rasterkraftmikroskopie (AFM), TEM und XRR eingehend untersucht. Der Fokus lag dabei auf den Grenzflächen des Quantentopfs, wobei die obere Qubit-Wellenfunktion sensibler auf die obere Grenzfläche ist. Die untere Grenzfläche ist beim Wachstum sowohl mit MBE als auch mit MOVPE stets weniger scharf als die obere Grenzfläche. Als Grund dafür wurde die Tendenz von Germanium, in die verspannte Siliziumschicht zu segregieren, identifiziert, was auch zu einem Abbau von elastischem Stress führt. Die Segregation kann bei niedrigen Temperaturen thermisch gehemmt werden. Als optimaler Kompromiss mit anderen thermisch getriebenen Prozessen beim MOVPE Wachstum (IHP) wurde im Teilprojekt eine Wachstumstemperatur von 600 °C bestimmt, die beste strukturelle Eigenschaften ergab. Im Vergleich zu den ursprünglich eingesetzten 700°C wird eine um etwa den Faktor 2 geringere Grenzflächenbreite erzielt (s. Abb. 7), wobei der Effekt in der unteren Grenzfläche stärker ausgeprägt ist.

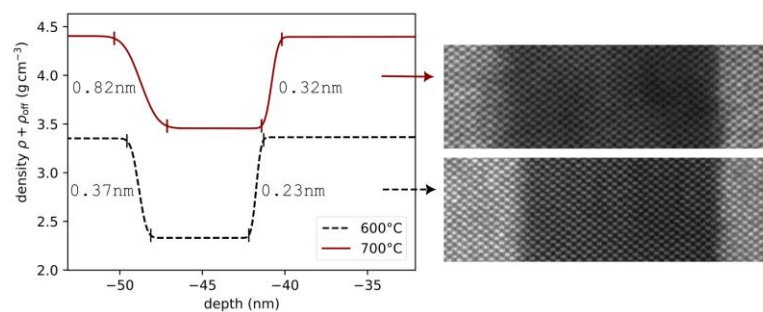


Abb. 7: Einfluss der Wachstumstemperatur im MOVPE-Prozess auf die Grenzflächenschärfe. Insbesondere die untere Grenzfläche der Quantentopf-Schicht reagiert empfindlich auf die Wachstumstemperatur (oben), was durch erhöhte Segregation der SiGe-Legierung begründet ist.

Mit den hier beschriebenen Ergebnissen möchten wir das Erreichen des Meilenstein [M1.4.1: „Identifikation eines optimierten Konzepts zur Vorbehandlung des relaxierten Buffers hinsichtlich Minimierung Versetzungsdichte \(Vermeidung zusätzlicher Versetzungen beim Aufwachsen der Heterostruktur\) und Homogenität der Legierung auf Basis struktureller“](#) belegen und die Arbeitspakete 1.4.1 und 1.3 erfolgreich abschließen.

II-1.2: Einfluss der Prozesse der Bauteilfabrikation auf die strukturelle Qualität

Die strukturelle Integrität von Si/SiGe-Heterostrukturen ist entscheidend für die Funktionalität von Spin-Qubits. Die einzelnen Fertigungsschritte nach der Epitaxie, wie Nachbehandlung und Nanostrukturierung, beeinflussen die Gitterstruktur, Defektdichte und Grenzflächenqualität. Hier wurden die Hauptprozesse und deren strukturelle Auswirkungen untersucht.

Ein zentraler Einflussfaktor ist die thermische Nachbehandlung (Temperung), wie sie zur Aktivierung oder Rekristallisation eingesetzt wird. Temperaturen oberhalb von ca. 700 °C können Interdiffusion an

den Si/SiGe-Grenzflächen auslösen, wodurch die quantenmechanisch relevante Symmetrie und Schärfe des Potenzials verloren geht. Gleichzeitig steigt das Risiko plastischer Relaxation durch Versetzungswachstum, insbesondere bei nicht vollständig entspannten Pufferschichten. Oxidation, z. B. beim Aufwachsen von Gate-Dielektrika, oder die Deposition von Gate-Materialien wirken sich ebenfalls strukturell aus. Abweichende thermische Ausdehnungskoeffizienten führen zu lokalen mechanischen Stress durch die Metall- oder Oxidschichten, und dadurch zu Bandkantenverschiebungen oder lokalem elektrischen Rauschen.

Prinzipiell ist jeder nachgelagerte Prozessschritt ein potenzielles Risiko für strukturelle Degradationen. Die systematische Charakterisierung dieser Einflüsse und die Optimierung der Prozessparameter sind daher essenziell, um eine hohe Qubit-Ausbeute und Reproduzierbarkeit zu gewährleisten. Dies ist zentraler Bestandteil von AP 1.4.2: „Einfluss verschiedener Prozessschritte bis zum Bauteil“. Dabei standen vor allem thermische, chemische und mechanische Belastungen im Fokus, wie sie durch Temperung, Oxidation, Gate-Stack-Aufbau oder Strukturierung entstehen. Ziel war es, deren Einfluss auf Grenzflächenschärfe, Gitterverzerrung, Interdiffusion und Defektbildung systematisch zu erfassen. Hierzu kamen kombinierte Analysemethoden wie XRR, ECCI, TEM und SXDM zum Einsatz. Die Erkenntnisse dienten dazu, kritische Prozessschritte zu identifizieren und durch gezielte Anpassungen im Herstellungsprozess zu vermeiden.

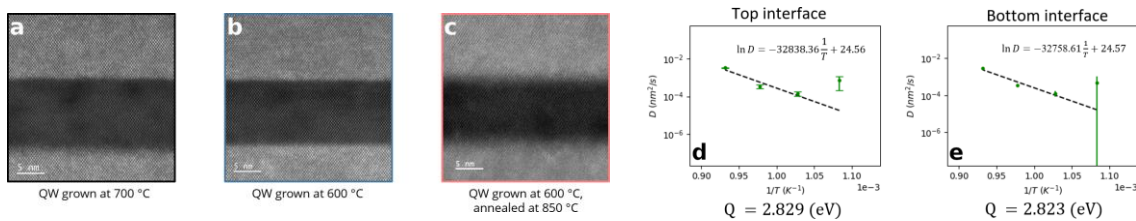


Abb. 8: Einfluss des Temperns auf Grenzflächen der Quantentopf-Sicht. Während die Wachstumstemperatur sich vorrangig auf die untere Grenzfläche auswirkt (a,b), verursacht anschließendes Tempern eine symmetrische Verbreiterung beider Grenzflächen (c). Zeit- und Temperaturabhängigkeit der Grenzflächenverbreiterung wurde mittels XRR systematisch vermessen. Die sich ergebenden Diffusionsraten und Aktivierungsenergien sind in (d) und (e) aufgetragen.

Ergebnisse:

- A. Rate und Aktivierungsenergie der Grenzflächeninterdiffusion:** Wie in Abschnitt 1.1 beschrieben, ist die Schärfe der Grenzfläche ein relevanter Parameter für die Qubit-Funktion. Es wurden hier Temperserien an verschiedenen Schichtstapeln untersucht um die Kinetik der Grenzflächenverbreiterung zu beschreiben. Die Proben wurden entweder im IHP Reinraum oder im IKZ in-situ am Röntgendiffraktometer getempert, und die Grenzflächeneigenschaften per XRR (und stichprobenartig über TEM, s. Abb. 8a-c) gestützt, analysiert. Signifikante Diffusion und daher eine Degradation der Grenzflächen ist bei Tempern mit Temperaturen über der Wachstumstemperatur – ab etwa 700°C – für 30 min zu beobachten. Relevant für die elektrischen Eigenschaften wird die Interdiffusion nach Tempern bei 850°C. Zeitabhängige Messungen ergaben Diffusionskoeffizienten wie in Abb. 8d-e dargestellt. Daraus ergeben sich Aktivierungsenergien von etwa 2.8 eV für die Interdiffusion bei $\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}/\text{Si}/\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$ Stapeln.
- B. Kinetik der plastischen Relaxation:** Ebenfalls in Abschnitt 1.1 beschrieben, neigen die verspannten Silizium Quantentopfschichten (QW) zum Abbau des elastischen Stresses über Nukleation oder Ausdehnung von Fehlpassungsversetzungen. Unter einer kritischen Dicke von 8 nm ist die Relaxation energetisch gehemmt, da die Eigenenergie der Versetzungen den Energiegewinn

der Relaxation überwiegt. Falls eine entsprechende Anpassung der QW-Dicke nicht möglich ist, wie z. B. bei Germanium Loch-Quantentöpfen, kann die Relaxation thermisch gehemmt oder angeregt werden. In diesem Arbeitspaket wurden daher die Raten der Relaxation in Abhängigkeit der Temperatur charakterisiert. Per MBE gewachsene Silizium-Schichten eignen sich optimal als Plattform für diese Untersuchung, da die Relaxation bei den niedrigen Wachstumstemperaturen der MBE nicht einsetzt und nachträglich untersucht werden kann. Abb. 9b-e zeigen ECCI Aufnahmen der graduell fortlaufenden plastischen Relaxation in Abhängigkeit der Temperatur der Wärmebehandlung nach dem Wachstum. Als Temperzeitraum wurden 10 min gewählt. Plastische Relaxation ist hier über die Bildung von Fehlpassungs-Segmenten ersichtlich, welche bei Nachbehandlung bei 500°C beginnt [9]. Nach Tempern bei 600°C kommt es zur Sättigung der plastischen Relaxation. Dies ist jedoch nicht mit Abbau des elastischen Stresses in der Quantentopfschicht zu erklären, sondern mit der gegenseitigen Behinderung des Gleitprozesses durch Interaktion der Fehlpassungsverzerrung („Blocking“). Bei ausreichend hohen Schichtdicken überschreitet die Kraft auf die Versetzungen einen kritischen Wert, sodass sie sich gegenseitig überwinden und so den vorliegenden Stress weiter abbauen können. Aus der Zunahme der Versetzungsdichte für die jeweiligen 10-minütigen Temperschritte ergab sich für verspannte Si/Si_{0.7}Ge_{0.3} Schichten eine Aktivierungsenergie von 0.5 eV.

Ein Alternativer Ansatz, der im Projekt für die Quantifizierung der einsetzenden Relaxation genutzt wurde, ist Röntgenbeugung im streifenden Einfall („Grazing Incidence X-ray Diffraction“). Hier muss betont werden, dass bei dem vorliegenden geringen Grad der Relaxation der Verspannungszustand global quasi unverändert bleibt und nur lokal reduziert ist. Klassische Messung der Relaxation der Schicht aus der Position von Bragg-Reflexen mittels Röntgenbeugung ist daher nicht anwendbar. Jedoch verursachen selbst geringe Dichten von Versetzungen einen schwachen, diffusen Untergrund in den Röntgenmessungen (s. Abb. 9a), welcher mithilfe von Synchrotronstrahlungsexperimenten detektiert werden kann. Der Vorteil hier ist die Möglichkeit des Nachverfolgens der Relaxation während der Wärmebehandlung.

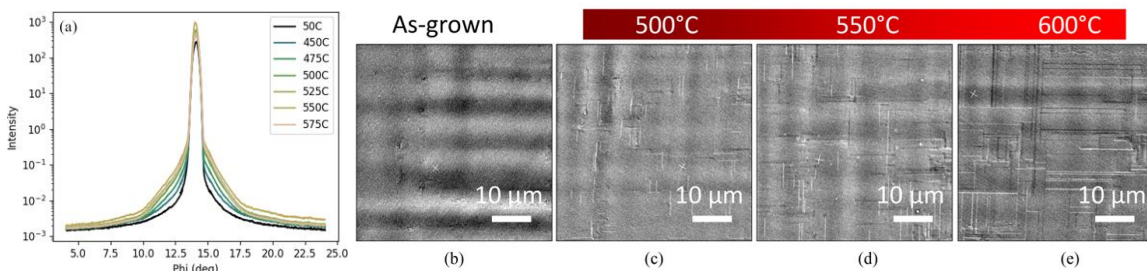


Fig. 9: Thermisch aktivierte Gitterrelaxation in der Quantentopf-Schicht. Falls die Dicke der Quantentopf-Schicht die kritische Dicke nach Matthews-Blakeslee überschreitet, ist es energetisch günstig den Stress per Einbau von Versetzungen abzubauen [9]. Der Prozess ist jedoch kinetisch gehemmt (b) und kommt erst ab Temperaturen über 450°C in Gang (c-e). Hier gezeigt im Falle einer 10nm Schicht Si auf Si_{0.7}Ge_{0.3}. Die Versetzungsbildung ist auch über ein zunehmen der diffusen Streuung in der Röntgenbeugung sichtbar (a).

- C. Stressfelder der fabrizierten Gatterelektroden:** Im Betrieb von Spin-Qubits in Si/SiGe-Heterostrukturen werden Elektronen über **elektrostatische Gatter** in der aktiven Zone gefangen und gezielt bewegt (Shuttling). Die metallischen Gatterstrukturen erzeugen jedoch lokal starke mechanische Spannungen in der darunterliegenden Halbleiterschicht – insbesondere durch Differenzen im thermischen Ausdehnungsverhalten oder durch Eigenspannung der Metallisierung. Im Projekt wurde gezeigt, wie diese Gatter-induzierten Stressfelder zu lokalen Gitterverzerrungen im Submikrometerbereich selbst in der vergrabenen in der Quantentopf-Schicht führen. Diese Verzerrungen beeinflussen direkt das **elektrische Potenzialprofil** entlang des Qubit-Kanals, was die

Reproduzierbarkeit des Shuttling-Potenzials einschränkt und zu unerwünschten Modulationen der Tunnelkopplung führen kann. Zudem verschieben sich durch die Gitterdeformation lokal die **Valley-Energieniveaus**, was zu variierender Valley-Aufspaltung und zu lokaler Dekohärenz führen kann. Besonders Nachteilhaft ist die resultierende Streuung der Steuersignale, z.B. der „Shuttling“- „Barriere“- und „Plunger“-Gatter, bei großen Qubit-Arrays, da die Spannungsniveaus für jedes Bauteil lokal korrigiert werden müssten, was Skalierung und Fehlerkorrektur voraussichtlich erschwert.

TiN Gatterelektroden wurden im Rahmen der Herstellung von Shuttling-Bauteilen bei Infineon Dresden (IFD) nach Industriestandard hergestellt. Im Projekt wurden dann lokale Gitterdeformationen unterhalb der Gatter zerstörungsfrei mittels SXDM vermessen und mit Fabrikationsparametern korreliert. Dies erlaubt Rückschlüsse auf mechanisch induzierte Gitterfluktuationen und dient der Optimierung von Gatterdesigns und Materialauswahl zur Reduktion struktureller Störungen. Die gemessenen Variationen der Gitterverzerrung traten auf Längenskalen der Qubit-Wellenfunktion (etwa 100 nm) auf und lagen im Bereich von bis zu 0.1% (s. Abb. 10), was Rechnungen zufolge eine Bandverschiebung von mehreren (3-8) meV zur Folge hat, was für Qubit-Shuttling-Anwendung bereits signifikant ist [10, 1]. Außerdem dienen die gewonnenen Daten der Kalibrierung von theoretischen „Finite-Elemente“-Modellen zur Beschreibung der elastischen Interaktion der SiGe-Hetero mit verschiedenen Gatter- und Oxidlagen (s. Abb. 10d).

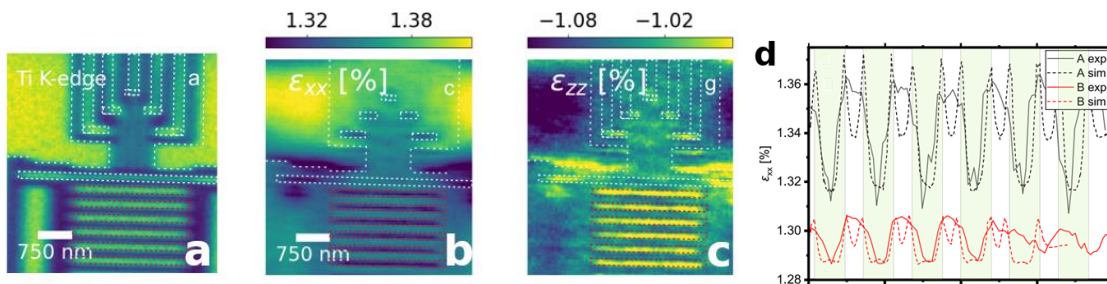


Fig. 10: Stressfelder der Gatterelektroden im Qubit/QuBus-Bauteil. Nach der Epitaxie aufgetragene Schichten führen durch Unterschiede in der thermischen Ausdehnung zu Stress in der aktiven Quantentopfschicht. Die Strukturierung der Bauteile führt daher zu Stressfluktuationen auf der Nanoskala. Diese können mittels bildgebender Röntgenbeugung (SXDM) vollständig und zerstörungsfrei quantifiziert werden: (a) Ti-Fluoreszenz der bei Infineon Dresden gefertigten TiN Gatterelektroden; Verspannungsfluktuationen in vertikaler Richtung (b), sowie in Blickrichtung (c); Finite-Elemente-Simulation zur Modellierung der resultierenden Gitterfluktuationen (d). [10]

Mit den hier präsentierten Ergebnissen der Charakterisierung des Einfluss der Prozessierungsschritte auf die Strukturelle Homogenität in SiGe-Heterostrukturen möchten wir das Erreichen des **Meilensteins „M1.4.2: Nachweis struktureller Faktoren welche gemäß theoretischer Arbeiten kritisch für Quantenanwendung bzw. für die Ausbeute funktionierender Bauteile sein können.“** darlegen und die Ergebnisse des Arbeitspaket AP 1.4.2: „Einfluss verschiedener Prozessschritte bis zum Bauteil“ abschließen.

II-1.3: Zusammenhang struktureller Parameter und Quanteneigenschaften

Im Arbeitspaket AP 1.4.3: „Rolle der Materialdefekte bei Qubit- und QuBus-Funktion für den Schlussbericht“ wurde untersucht, wie **Materialdefekte in Si/SiGe-Heterostrukturen** die Funktionalität von Qubits und QuBus-Strukturen beeinflussen. Der Fokus lag auf der Erfassung von Fehlpassungsverzerrungen, Gitterverspannung und der Grenzflächeneigenschaften, insbesondere im Bereich der aktiven Qubit-Zonen. Mittels TEM, ECCI und orts aufgelöster Röntgenbeugung (SXDM) wurden Defekte sowohl strukturell als auch positionsgenau charakterisiert. Ein Ziel hier war es, insbesondere auch funktionierende Qubit- bzw. QuBus Shuttling-Bauteile zu untersuchen und ihre Charakteristika mit

strukturellen Daten zu korrelieren. Insbesondere in Shuttling-Bauteilen können lokal, entlang des Kanals, lokale Potentialschwankungen und verringerte Shuttling-Treue („Shuttle-Fidelity“) auftreten. Von Konsortialpartnern wurde durch das gezielte Hin- und Zurücktransportieren einzelner Elektronen über hintereinandergeschaltete Quantenpunkte (QDs), die lokale Shuttle-Fidelity ermittelt [11]. Fehler im Transport lassen sich dabei präzise räumlich zuordnen. So identifizierte „schwache Stellen“ korrelieren mit elektrostatischer Unordnung, etwa verursacht durch Defekte im Kristallgitter oder an Oxid-Halbleiter-Grenzflächen.

Mit SXDM wurden im Projekt von bereits charakterisierten Bauteilen mikroskopische Bilder der Gitterverzerrung aufgenommen (s. Abb. 11) um strukturelle Defekte als mögliche Ursache der Shuttling-Schwachstellen (gelb markiert in Abb. 11a) aufzudecken. Abb. 11a zeigt Verteilungen der Scherkomponenten des Verspannungstensors nahe der problematischen Region (gelb markiert). Obwohl gewisse Variationen der Verzerrung an der Shuttling-Schwachstelle zu sehen sind, ist die Stärke der Variation keineswegs auffällig, sodass basierend auf der limitierten Datenlage kein eindeutiger Zusammenhang mit der Potentialunordnung im Bauteil hergestellt werden kann. Andererseits ist in den SXDM-Bildern eine Versetzung in der Nähe des Einzelelektronentransistors (SET) am oberen Ende der Shuttling-Struktur zu sehen (grüner Pfeil). Diese Versetzung korreliert deutlich mit Unregelmäßigkeiten im Ladungsstabilitätsdiagramm dieses SETs (Abb. 11c), wobei der gegenüberliegende SET eine nahezu ideale Kennlinie aufweist (Abb. 11b). Dies ist ein erster experimenteller Nachweis, dass strukturelle Defekte und ihre Verzerrungsfelder messbar und direkt funktional relevant sind.



Fig 11: (vertrauliche Abbildung) Einfluss der Gitterdefekte auf Bauteileigenschaften. Ein „Weak-Link“ der Shuttling-Struktur (a, REM und SXDM Aufnahme) konnte nicht eindeutig auf strukturelle Probleme zurückgeführt werden. Jedoch führt eine Versetzung nahe dem Bauteil eindeutig zu Instabilitäten im Ladungsdiagramm (vgl. c zu b).

Neben Bauteil-Kennzahlen sind werden auch makroskopische Güteparameter zur Bewertung der Qubit-Heterostruktur betrachtet. Zum Beispiel werden Mobilitäten und Dichten von Ladungsträgern im Quantentopf über Tieftemperatur-Magnetotransport (Hall-Messungen) bestimmt und lassen geben Aufschluss über die Materialqualität. Im Projekt wurde der Einfluss der Grenzflächenschärfe auf die Transporteigenschaften untersucht. Dafür wurde Grenzflächen systematisch über Temperversuche verbreitert und Transporteigenschaften über Hall-Messungen charakterisiert. Die Korrelation mit der Grenzflächenverbreiterung geschah per XRR. Abb. 12 zeigt die Ergebnisse, wobei eine signifikante Verschlechterung der Transporteigenschaften erst bei einer deutlichen Verbreiterung der Grenzflächen von 2 Å über 5 Å einen nennenswerten Einfluss auf Mobilität der Ladungsträger hat. Jedoch ist zu erwarten, dass auch die Valley-Aufspaltung mit breiteren Grenzflächen abnimmt, was bislang noch nicht experimentell untersucht wurde.

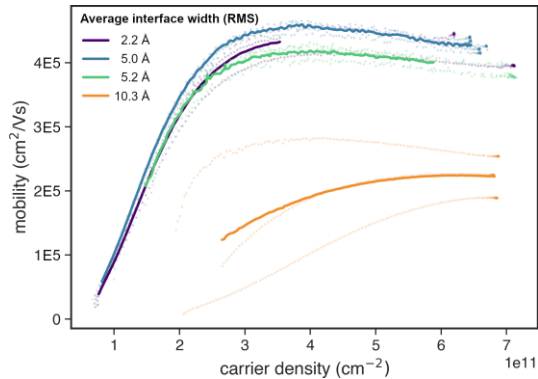


Abb. 12 Einfluss der Grenzflächenverbreiterung auf elektrische Transporteigenschaften in Form der Abhängigkeit der Ladungsträgermobilität von der Ladungsträgerdichte. Magnetotransport-Messungen wurden an 16 Bauelementen, gruppiert in Vierer-Sets, bei 1,5 K durchgeführt. Jedes Set entspricht Bauelementen, die jeweils auf einem Wafer gefertigt wurden. Jeder Wafer wurde vor der Bauteilherstellung bei unterschiedlichen Temperaturen getempert. Die durchgezogenen Linien stellen die durchschnittliche Mobilität jedes Sets dar, während die gestrichelten Linien die Einzelmessungen innerhalb der jeweiligen Gruppe zeigen. Erst ab einer deutlichen Grenzflächen Bauelemente vom Wafer, der bei 950 °C getempert wurde, zeigen über den gesamten Bereich der Ladungsträgerdichte hinweg eine durchgehend reduzierte Mobilität im Vergleich zu den anderen Sets.

II-1.4: Metrologie-Entwicklung

Im Arbeitspaket AP 1.4.4: „Entwicklung einer Metrologie für schnelle strukturelle Prüfung“ war die Weiterentwicklung der verfügbaren Charakterisierungsmethoden vorrangig in Bezug auf den Durchsatz geplant um regelmäßiges Feedback zur Material- und Bauteiloptimierung zu ermöglichen. Vor allem SXDM und TEM sind Methoden die nur schwer systematisch an Probenserien eingesetzt werden können. Das Problem bei synchrotronbasierten Methoden wie SXDM ist die geringe Verfügbarkeit und die Notwendigkeit, Messzeit über ein Antragssystem einzuwerben. Auch wenn die relevanten Versuche durchgeführt werden konnten, war ein hoher Durchsatz an SXDM Messungen im Projekt nicht nötig. Ein hoher Durchsatz an TEM Messungen wurde durch die Durchführung an verschiedenen Instituten (IKZ, IHP, CNR – „Institute for Microelectronics and Microsystems“ Italien) ermöglicht. Die Bildgebung von Defekten mittels ECCI stellte sich als besonders hilfreich für das Verständnis der plastischen Relaxation des Quantentopfes heraus. Die Methode nutzt ein konventionelles Rasterelektronenmikroskop (REM) mit Rückstreuelektronendetektor zur Dunkelfeldabbildung unter gezielten Beugungsbedingungen und eignet sich besonders zur Detektion struktureller Defekte in Halbleiter-Dünnschichten, da das Abtastvolumen durch die Beschleunigungsspannung gezielt zwischen 10 und 100 nm eingestellt werden kann. Bei Si-Quantentöpfen erfasst das Signal sowohl die obere als auch untere Grenzfläche – selbst bei abgeschlossenen Strukturen mit Oxidschicht und Elektroden (z. B. QuBus-Bauelemente). Durch ihre Sub-Nanometer-Auflösung können Fehlpassungs- und Durchstoßversetzungen hocheffektiv nachgewiesen werden. Im Vergleich zur Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) erlaubt ECCI großflächige, zerstörungsfreie Messungen mit hohem Durchsatz und statistischer Auswertung – bei gleichzeitig möglicher Weiternutzung der Proben. Durch Softwareentwicklung konnten wir automatisches Zusammensetzen („Stitching“) und Erfassen von Fehlpassungsversetzungen im Quantentopf erreichen (s. Abb. 13), was eine zuverlässige Quantifizierung der einsetzenden Relaxation ermöglichte.

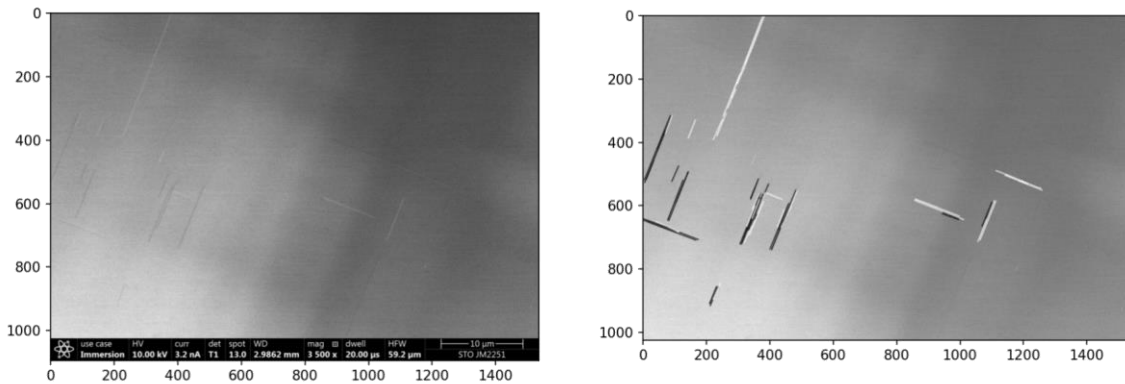


Abb. 13: Automatisierte Analyse von ECCI-Daten. Linien-Verfolgung und Kontrasterkennung.

II-2. Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Die eingesetzten Mittel entfielen nahezu ausschließlich auf Personalkosten ($1 \times 75\%$ E13 – 170.746 EUR) zur Durchführung der umfangreichen Charakterisierungsarbeiten. Diese umfassten sowohl den Betrieb und die methodische Weiterentwicklung der am IKZ verfügbaren hochauflösenden Elektronen- und Röntgenanalytik (z. B. TEM, ECCI, XRR) als auch den Einsatz von Synchrotron-basierten Verfahren wie der orts aufgelösten Röntgenbeugung (SXDM), die an externen Großforschungsanlagen durchgeführt wurden. Die personelle Kontinuität war entscheidend, um hochspezialisierte Messmethoden zu etablieren und reproduzierbar auf unterschiedlich prozessierte Qubit-Strukturen anzuwenden. Die Mittelverwendung erfolgte im Rahmen der genehmigten Budgetstruktur

II-3. Notwendigkeit und Angemessenheit der Projektarbeiten

Die im Teilvorhaben durchgeführten Arbeiten waren notwendig, um die strukturellen Ursachen für funktionale Einschränkungen in Si/SiGe-basierten Qubit- und QuBus-Strukturen zu identifizieren und gezielt adressieren zu können. Die steigenden Anforderungen an Kohärenz, Lesetreue und Skalierbarkeit in quantenelektronischen Architekturen erfordern eine mikroskopische Kontrolle der Material- und Strukturqualität bis in den Subnanometerbereich. Genau hierfür wurden wie geplant im Projekt spezifische SXDM, ECCI, XRR und TEM angewendet, weiterentwickelt und mit den elektrischen Eigenschaften korreliert.

Die Wahl und Kombination dieser Methoden angemessen und zielgerichtet. ECCI erlaubt zerstörungsfreie, großflächige Kartierungen von Versetzungen und Gitterstörungen mit Submikrometerauflösung – ideal zur schnellen Bewertung prozessinduzierter Defekte. SXDM ermöglicht eine orts aufgelöste dreidimensionale Messung des Gitterverzerrungstensors innerhalb eingebetteter Bauelemente und damit eine direkte Struktur-Funktions-Korrelation in realen Qubit-Strukturen. XRR liefert präzise Informationen zu Schichtdicken, Dichten und Grenzflächenschärfe der Heterostrukturen, insbesondere zur Kontrolle der Si-Deckschicht im Quantentopf. TEM mit atomarer Auflösung und hoher Sensitivität wurde zur hochauflösenden Analyse von Grenzflächen, Interdiffusion, Versetzungsnetzwerken eingesetzt.

Ein erheblicher Teil der Arbeiten erfolgte in enger Abstimmung mit den Verbundpartnern, insbesondere IHP, JARA und Infineon Dresden, um die Relevanz der strukturellen Befunde direkt an funktionsfähigen Bauteilen zu validieren. Die Projektarbeiten waren somit in Art und Umfang passgenau auf die wissenschaftlich-technischen Zielstellungen des Gesamtvorhabens ausgerichtet.

II-4. Voraussichtlicher Nutzen und Verwertungsplanung

Die durchgeführten Arbeiten haben zentrale Erkenntnisse zur Optimierung von Design und Wachstum der Si/SiGe Heterostrukturen, sowie zur Evaluierung struktureller Inhomogenitäten, Defekte und mechanischer Spannungsfelder erbracht, die unmittelbar in die Weiterentwicklung skalierbarer Qubit- und QuBus-Bauelemente einfließen können. Die am IKZ etablierten Verfahren zur orts- und tiefenaufgelösten Analyse ermöglichte es, entscheidende Fehlerquellen wie Fehlpassungsversetzungen, Durchstoßversetzungen, Grenzflächendiffusion oder stressbedingte Gitterverzerrungen frühzeitig zu erkennen. Zum Beispiel werden kritische Schichtdicken oder Temperaturen sowie Aktivierungsenergien der plastischen Relaxation und Interdiffusion direkt als Leitfaden für die Optimierung und Entwicklung der Heterostrukturen und Bauelemente dienen. Weiterhin werden Methodenentwicklungen wie die Nutzung von SXDM um alle Komponenten des Verzerrungstensors mikroskopisch zu kartographieren oder von diffuser Röntgenstreuung um Versetzungsdichten in-situ zu charakterisieren, viele zukünftige Arbeiten in anderen Gebieten der Halbleiter-Materialentwicklung anregen. Insgesamt liefert das Teilvorhaben einen strukturbasierten Beitrag zur Verbesserung von Materialqualität, Bauteilstabilität und Fertigungskontrolle im Bereich halbleiterbasierter Quantenprozessoren.

II-5. Relevanter Fortschritt an anderen Stellen

Quantencomputing auf Basis von Silium-Halbleiter-Spin-Qubits ist ein aktuell intensiv beforschtes Gebiet, was dementsprechend zu einer hohen Frequenz von wissenschaftlichen Veröffentlichungen im Berichtszeitraum führte, die für das vorliegende Projekt zum einen relevant waren und, zum anderen, auch Überschneidungen vorweisen. Im Folgenden sind die relevantesten Arbeiten genannt:

- Degli Eposti et al. schlagen eine amorphe Silizium-Deckschicht als alternative zur epitaktischen Silizium-Deckschicht vor (s. II-1.1.D) und demonstrieren so verbesserte elektrische Eigenschaften. [12]
- Das Konzept eines „Wiggle“ Quantentopfes als Alternative zum Silizium-Quantentopf ermöglicht voraussichtlich eine deutliche Erhöhung der Valley-Aufspaltung und dadurch der Betriebstemperaturen der Quantenprozessoren. Diese Art Quantentopf beinhaltet eine periodische Modulation des Germaniumanteils anstatt einer reinen Si-Schicht, was zur Umsetzung besondere Anforderungen an die Epitaxie stellt [8].
- Generell scheint eine gewisse Unordnung in Form von Germanium im konventionell reinen Silizium-Quantentopf die effektive Valley-Aufspaltung zu erhöhen [13, 14], insofern atomar scharfe Grenzflächen der Quantentopf-Schicht nicht realisiert werden können (s. auch II-1.1.E). Der Wiggle-Quantentopf ist dabei ein Spezialfall.
- Basierend auf unseren Erkenntnissen in II-1.1.C wurde demonstriert dass ein Verringern der Dicke der Quantentopfschicht auf unter 8 nm, was die Relaxation hemmt, zu einer leichten Verbesserung der elektrischen Eigenschaften führt. [5]
- Berechnungen von Woods et al. ergeben dass eine Scherverspannung in Silizium insbesondere in Kombination mit Wiggle-Quantentöpfen eine weitere Erhöhung der Valley-Aufspaltung haben soll [15]. Ansätze zur praktischen Einbringung der Scherverspannung wurden vorgeschlagen. Jedoch haben wir in diesem Teilprojekt bereits beobachtet, dass entsprechend hohe Werte der Scherverspannung durch Metallgatter in die Quantentopfschicht eingebracht werden kann (s. II-1.2.C).
- Vor kurzem wurde Stehouwer et al. der Einfluss von Quantentopf-Dicken und Grenzflächenschärfe experimentell untersucht [16]. Es wurde, dass scharfe Grenzflächen nicht zu den besten Ergebnissen für Valley-Aufspaltung und Ladungsträgermobilität führen.

II-6. Veröffentlichungen

Veröffentlichungen in begutachteten wissenschaftlichen Journalen:

- Liu, Y., Gradwohl, K.-P., Lu, C.-H., Remmele, T., Yamamoto, Y., Zoellner, M. H., Schroeder, T., Boeck, T., Amari, H., Richter, C., & Albrecht, M. (2022). *Role of critical thickness in SiGe/Si/SiGe heterostructure design for qubits*. Journal of Applied Physics, **132**(8). <https://doi.org/10.1063/5.0101753>
- Gradwohl, K.-P., Lu, C.-H., Liu, Y., Richter, C., Boeck, T., Martin, J., & Albrecht, M. (2022). *Strain Relaxation of Si/SiGe Heterostructures by a Geometric Monte Carlo Approach*. Physica Status Solidi (RRL) – Rapid Research Letters, **17**(6). Portico. <https://doi.org/10.1002/pssr.202200398>
- Liu, Y., Gradwohl, K.-P., Lu, C.-Hs., Yamamoto, Y., Remmele, T., Corley-Wiciak, C., Teubner, T., Richter, C., Albrecht, M., & Boeck, T. (2023). *Growth of 28Si Quantum Well Layers for Qubits by a Hybrid MBE/CVD Technique*. ECS Journal of Solid State Science and Technology, **12**(2), 024006. <https://doi.org/10.1149/2162-8777/acb734>
- Liu, Y., Gradwohl, K.-P., Lu, C.-H., Dadzis, K., Yamamoto, Y., Becker, L., Storck, P., Remmele, T., Boeck, T., Richter, C., & Albrecht, M. (2023). *Strain relaxation from annealing of SiGe heterostructures for qubits*. Journal of Applied Physics, **134**(3). <https://doi.org/10.1063/5.0155448>
- Corley-Wiciak, C., Richter, C., Zoellner, M. H., Zaitsev, I., Manganelli, C. L., Zatterin, E., Schüll, T. U., Corley-Wiciak, A. A., Katzer, J., Reichmann, F., Klesse, W. M., Hendrickx, N. W., Sammak, A., Veldhorst, M., Scappucci, G., Virgilio, M., & Capellini, G. (2023). *Nanoscale Mapping of the 3D Strain Tensor in a Germanium Quantum Well Hosting a Functional Spin Qubit Device*. ACS Applied Materials & Interfaces, **15**(2), 3119–3130. <https://doi.org/10.1021/acsami.2c17395>
- Corley-Wiciak, C., Zoellner, M. H., Zaitsev, I., Anand, K., Zatterin, E., Yamamoto, Y., Corley-Wiciak, A. A., Reichmann, F., Langheinrich, W., Schreiber, L. R., Manganelli, C. L., Virgilio, M., Richter, C., & Capellini, G. (2023). *Lattice Deformation at Submicron Scale: X-Ray Nanobeam Measurements of Elastic Strain in Electron Shuttling Devices*. Physical Review Applied, **20**(2). <https://doi.org/10.1103/physrevapplied.20.024056>
- Gradwohl, K.-P., Cvitkovich, L., Lu, C.-H., Koelling, S., Oezkent, M., Liu, Y., Waldhör, D., Grassler, T., Niquet, Y.-M., Albrecht, M., Richter, C., Moutanabbir, O., & Martin, J. (2025). *Enhanced Nanoscale Ge Concentration Oscillations in Si/SiGe Quantum Well through Controlled Segregation*. Nano Letters, **25**(11), 4204–4210. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.4c05326>
- Subramanian, A. N., Richter, C., Gybin, A., Kabukcuoglu, M. P., Hamann, E., Zuber, M., Oezkent, M., Gugushev, C., Juda, U., Schroeder, T., Abrosimov, N. V., Sumathi, R. R., & Gradwohl, K.-P. (2025). *On the Czochralski growth of SixGe1-x crystals as substrates for strained Ge quantum well heterostructures*. Journal of Applied Physics, **137**(6). <https://doi.org/10.1063/5.0238533>

Geplante und eingereichte Veröffentlichungen:

Lu et al.: Dynamics of interface interdiffusion in Si/SiGe heterostructures and their impact on transport properties.

Lu et al.: Diffuse X-ray scattering and Electron Channeling Contrast Imaging to study the onset of plastic relaxation in Ge/SiGe quantum well layers.

Referenzliste:

key reference

- [1] C. Corley-Wiciak et al. (2023). ACS Applied Materials & Interfaces, 15(2), 3119–3130. <https://doi.org/10.1021/acsami.2c17395>
- [2] M. H. Zoellner et al. (2015). ACS Applied Materials & Interfaces, 7(17), 9031–9037. <https://doi.org/10.1021/am508968b>
- [3] F. Rovaris et al. (2019). Phys. Rev. B, 100(8). <https://doi.org/10.1103/physrevb.100.085307>
- [4] Y. Liu et al. (2022). J. Appl. Phys., 132(8). <https://doi.org/10.1063/5.0101753>
- [5] B. Paquelet Wuetz et al. (2023). Nat. Commun., 14(1). <https://doi.org/10.1038/s41467-023-36951-w>
- [6] Y. Liu et al. (2023). ECS J. Solid State Sci. Technol., 12(2), 024006. <https://doi.org/10.1149/2162-8777/acb734>
- [7] J. R. F. Lima et al. (2023). Materials for Quantum Technology, 3(2), 025004. <https://doi.org/10.1088/2633-4356/acd743>
- [8] T. McJunkin et al. (2022). Nat. Commun., 13(1). <https://doi.org/10.1038/s41467-022-35510-z>
- [9] Y. Liu et al. (2023). J. Appl. Phys., 134(3). <https://doi.org/10.1063/5.0155448>
- [10] C. Corley-Wiciak et al. (2023). Phys. Rev. Appl, 20(2). <https://doi.org/10.1103/physrevapplied.20.024056>
- [11] R. Xue et al. (2024). Nat. Commun., 15(1). <https://doi.org/10.1038/s41467-024-46519-x>
- [12] D. Degli Esposti et al. (2022). Appl. Phys. Lett., 120(18). <https://doi.org/10.1063/5.0088576>
- [13] M. P. Losert et al. (2023). Phys. Rev. B, 108(12). <https://doi.org/10.1103/physrevb.108.125405>
- [14] J. Klos et al. (2024). Adv. Sci., 11(42). Portico. <https://doi.org/10.1002/adv.202407442>
- [15] B. D. Woods et al. (2024). Npj Quantum Information, 10(1). <https://doi.org/10.1038/s41534-024-00853-6>
- [16] L. E. A. Stehouwer et al. (2025). arXiv. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2505.22295>
- [17] K.-P. Gradwohl et al. (2025). Nano Lett., 25(11), 4204–4210. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.4c05326>
- [18] A. N. Subramanian et al. (2025). J. Appl. Phys., 137(6). <https://doi.org/10.1063/5.0238533>
- [19] K.-P. Gradwohl et al. (2022). Physica Status Solidi (RRL) – Rapid Research Letters, 17(6). Portico. <https://doi.org/10.1002/pssr.202200398>