

**Rahmenprogramm der Bundesregierung für Forschung und Innovation 2016-2020
Mikroelektronik aus Deutschland - Innovationstreiber der Digitalisierung**

Sachbericht

Verbundprojekt:

Erforschung einer neuen Generation vertikaler Transistoren auf Basis innovativer
Materialsysteme

- ForMikro-GoNext -

Teilvorhaben: IKZ - Kristallzucht, Epitaxie und Charakterisierung von Beta-Galliumoxid

Zuwendungsempfänger:

Forschungsverbund Berlin e.V.:
Leibniz-Institut für Kristallzüchtung,

Förderkennzeichen: 16ES1084K

Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2019- 30.09.2024 (inklusive kostenneutraler Verlängerung)

Teil I

Kurzbericht

1. Ursprüngliche Aufgabenstellung

Das Halbleitermaterial Beta-Galliumoxid ($\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$) mit seiner gegenüber SiC und GaN mehr als doppelt so hohen Durchbruchfeldstärke besitzt das Potenzial den Wirkungsgrad von Leistungskonvertern zu steigern. Bis jetzt konnten international flächenspezifische Einschaltwiderstände erreicht werden, die praktisch mit den Daten von Si-basierten Bauelementen übereinstimmen. Allerdings wurde die Leistungsfähigkeit von SiC oder GaN-basierten Bauelementen noch nicht erreicht. Im Vergleich zu SiC und GaN weist $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ eine geringe Elektronenbeweglichkeit auf, was die erreichbaren Schaltgeschwindigkeiten begrenzt. Daher muss das Anwendungspotential von $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ Leistungsschaltern vor allem bei hohen Spannungen > 1000 V gesehen werden. Um die hohe Durchbruchfeldstärke von $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ effizienter ausnutzen zu können und so höhere Spannungen effizienter schalten zu können, ist eine vertikale Bauelementstruktur notwendig. Die Leistung wird dabei flächensparend über die Schichtdicke, nicht wie beim lateralen Bauelement über die Fläche geschaltet. Ziel von GoNext ist es vertikale Hochspannungs- $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ –Bauelemente (Fin-FETs) mit sicheren und effizienten Schalteigenschaften herzustellen. Das IKZ hat bisher Materialforschung für laterale Bauelemente betrieben. Eine vertikale Architektur bedeutet für die gesamten Prozesskette neue Herausforderungen. Im Volumenkristallbereich sind leitfähige Kristalle als Rückkontakt für die späteren Bauelemente notwendig. Im Bereich der Epitaxie, welche den elektrischen Teil des späteren Bauelements herstellt, benötigt die vertikale Struktur i) Schichtdicken im μm Bereich (für laterale Bauelemente waren wenige hundert nm ausreichend) ii) Dotierkonzentrationen von ca. $1 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$ für die späteren Driftzonen und iii) höhere Wachstumsraten im Bereich $\mu\text{m}/\text{h}$. Die Materialcharakterisierung ist hierbei unabdingbar um die Eigenschaften des Materials zu analysieren und Feedback an die Kristallzüchtung und Epitaxie zu liefern.

2. Wissenschaftlicher/technischer Stand, an den angeknüpft wurde

Kristallzüchtung: Die Schmelzzüchtung ist die bevorzugte Methode zur Herstellung von $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ -Einkristallen, da sie hinsichtlich Kristallgröße, Strukturqualität und Kosten vorteilhaft ist. Besonders relevant sind die EFG- und Czochralski-Methoden. Die **EFG-Methode** ermöglicht das Wachstum dünner Kristallplatten mit großer Fläche. Sie wird kommerziell von Novel Crystal Technology (ehemals Tamura Corp.) genutzt und erlaubt Wafer mit einer maximalen Breite von 2 Zoll. Andere Institutionen erforschen kleinere Größen. Die **Czochralski-Methode** wurde am IKZ-Berlin entwickelt und ermöglicht potentiell das Wachstum größerer, elektrisch isolierender Volumenkristalle mit bis zu 4 Zoll Durchmesser. Diese Methode erlaubt (100), (010) sowie (001) orientierte Wafer. Herausforderungen bestehen vor allem beim Wachstum hochleitender Kristalle. Die **Bridgman-Methode** zeigt begrenztes Potenzial, da die strukturelle Qualität schlechter ist als bei Czochralski-Kristallen. Zudem sind Skalierung und Leitfähigkeitskontrolle problematisch.

Epitaxie: Mehrere Epitaxieverfahren wurden für die Herstellung funktionaler Schichten erprobt, darunter MBE, MOVPE, HVPE und LPCVD. Für die Industrialisierung müssen sie hohe Wachstumsraten, homogene Schichten, niedrige Defektdichten und hohe Ladungsträgerbeweglichkeit bieten. **MOVPE erfüllt als einziges Verfahren alle Kriterien** und ist in der Mikroelektronik bereits etabliert. Es ermöglicht hochpräzise Schichtabscheidung, jedoch gibt es Herausforderungen je nach Substratorientierung (hier nur die zwei wichtigsten): Die **(010) Orientierung** ist international weit verbreitet, aber problematisch durch facettiertes Wachstum, elektrische Störstellen und begrenzte Substratgröße. Die **(100) Orientierung** wurde bereits am IKZ erprobt und vermeidet die Probleme von

(010), kann aber zu Zwillingsbildung und Defekten führen. Durch gezielte Anpassung von Substrat-Fehlschnitt und Wachstumsparametern wurde am IKZ jedoch ein hochwertiges Stufenflusswachstum erreicht, mit geringen Defektdichten und herausragenden elektrischen Eigenschaften. Herausforderungen der MOVPE von β -Ga₂O₃ Epitaxieschichten für vertikale Fin-FETS (wie in GoNext abgezielt) sind Schichtdicken im μm Bereich, Verringerung der Hintergrunddotierung und Anhebung der Wachstumsrate.

3. Ablauf des Vorhabens und Zusammenarbeit mit Forschungseinrichtungen

Für das Projekt GoNext gab es eine Umsetzungskette vom β -Ga₂O₃ Kristall über die Epitaxie bis hin zum charakterisierten Bauelement. Dabei waren durch die einzelnen Arbeitspakete der Partner iterative Rückkopplungen vom Bauelement zur Kristallzucht möglich und wichtig um den gesamten Prozess mit jedem Durchlauf weiterzuentwickeln und zu verbessern. Dabei brachte das Institut für Kristallzüchtung seine Kompetenzen in der Volumenkristallzucht (das Basismaterial der Bauelemente), der Epitaxie (der elektrisch aktive Teil des Bauelements) sowie in der Materialcharakterisierung ein. Die am IKZ nach Vorgabe des Ferdinand Braun Instituts (welches langjährige Erfahrung im Bereich Prozessierung und Charakterisierung von Leistungsschaltbauelementen besitzt) homoepitaktisch beschichteten β -Ga₂O₃-Wafer wurden an das FBH übergeben, welche dann die mit Hilfe von Simulationen entworfenen Bauelemente auf Basis der Epi-Wafer prozessierte. Die fertigen Bauelemente wurden dann am FBH elektrisch charakterisiert. Das Institut für elektrische Antriebe, Leistungselektronik und Bauelemente der Universität Bremen führte parallel thermische Charakterisierungen und Zuverlässigkeitstests an den Referenz-Bauelementen durch. Durch Rückkopplung der Ergebnisse der Bauelementanalytik an die Epitaxie und die Kristallzucht erfolgte eine Weiterentwicklung des gesamten Prozesses. Die parallele Einbeziehung der Industrie verstärkte den Übergang von erkenntnisgetriebener zur anwendungsorientierten Forschung. Dabei unterstützte der Anlagenbauer AIXTRON durch Expertisen-Austausch die Weiterentwicklung des Epi-Prozesses und erhielt gleichzeitig Rückschlüsse für notwendige Modifikation zur Adaption der AIXTRON- Anlagentechnik auf das Materialsystem β -Ga₂O₃. Die Konzernforschung von ABB (jetzt Hitachi Energy) unterstützte auf Materialcharakterisierungs- sowie Bauelementseite durch umfangreiche Messungen und Tests.

4. Wesentlichen Ergebnisse

Kristallzüchtung: Erfolgreiche Herstellung leitfähiger Si dotierte β -Ga₂O₃ Volumenkristalle mit einem Kristalldurchmesser von 2" und einer Länge von bis zu 30 mm. Diese Kristalle ließen die Präparation von (100) 4° off orientierten Wafern bis zu einer Größe von 25x25 mm² zu, die Basis für den nächsten Prozessschritt – die Epitaxie.

Epitaxie: Erfolgreiche Herstellung von homoepitaktischen (100) 4° off β -Ga₂O₃ Epitaxieschichten mit bis zu 6 μm Schichtdicke (maximale Schichtdicke vor GoNext: 300 nm) unter Beibehaltung des für die Schichtqualität wichtigen Stufenflusswachstums. Hinsichtlich der elektrischen Eigenschaften konnten Dotierkonzentrationen im unteren 10¹⁶cm⁻³ Bereich erhalten werden, bei Rekordwerten für die Mobilität der freien Ladungsträger (über 160 cm²/Vs). Dies machte nicht zuletzt die Erhöhung der Wachstumsrate auf 2,2 $\mu\text{m}/\text{h}$ (vor GoNext maximal 0,2 $\mu\text{m}/\text{h}$) möglich. Diese Epi-Wafer dienten im nächsten Prozessschritt beim FBH als Ausgangsmaterial für die Bauelementprozessierung.

Materialcharakterisierung: Die Kristallzucht sowie Epitaxie wurde dabei durch die Materialcharakterisierung mit wertvollen Analysen unterstützt. Nur so gelang es das Material besser zu verstehen und dessen Eigenschaften dahingehen zu verbessern, die Projektziele zu erreichen.

Teil II

Eingehende Darstellung

1. Wissenschaftliche Ergebnisse

Arbeitspaket: Ga₂O₃ Volumenkristallzüchtung

Die angestrebte vertikale Bauelementarchitektur erfordert leitfähige Substrate. Daher fokussierte sich das Arbeitspaket „Volumenkristallzüchtung“ auf die Entwicklung des Wachstums von leitfähigen β -Ga₂O₃ Kristallen.

Das Arbeitspaket beinhaltete folgende Meilensteine:

M1: „Erfolgreiche Züchtung eines β -Ga₂O₃ Volumenkristalls mit einer Dotierkonzentration $> 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ und möglichst hoher Beweglichkeit, mit dem Wafer der Größe $10 \times 10 \text{ mm}^2$ realisiert werden können.“

M6: „Züchtung eines β -Ga₂O₃ Volumenkristalls mit einer Dotierkonzentration $> 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ mit dem Wafer der Größe $\frac{1}{4} 2''$ bzw. $25 \times 25 \text{ mm}^2$ realisiert werden können.“

Die Ga₂O₃ Volumenkristalle wurden zur Erzeugung von leitfähigen Kristallen mit Silizium dotiert. Durch die Erhöhung der freien Ladungsträger im Kristall entsteht jedoch ein Wärmestau während des Wachstumsprozesses, was zu einer Spiralbildung führte (siehe Abbildung 1). Die maximale Kristallzylinderlänge nimmt daher mit zunehmender Si-Dotierung ab. Dieser Effekt trat bereits für Kristalle mit kleinem Durchmesser von 20 mm auf, war jedoch für Kristalle mit einem Durchmesser von 2'' ausgeprägter.



Abbildung 1: Aufnahmen von β -Ga₂O₃ Kristallen für verschiedene Dotierkonzentrationen mit Silizium

Zur Stabilisierung des Wachstumsprozesses wurde daher die Co-Dotierung mit weiteren Elementen zusätzlich zum Silizium erprobt. Für Kristalle mit einem Durchmesser von 20 mm konnte durch

zusätzliche Verwendung von Al (5%) die Spiralbildung unterdrückt werden (siehe Abbildung 2). Dabei hatte das Aluminium keinen Einfluss auf die elektrischen Eigenschaften des Volumenkristalls.

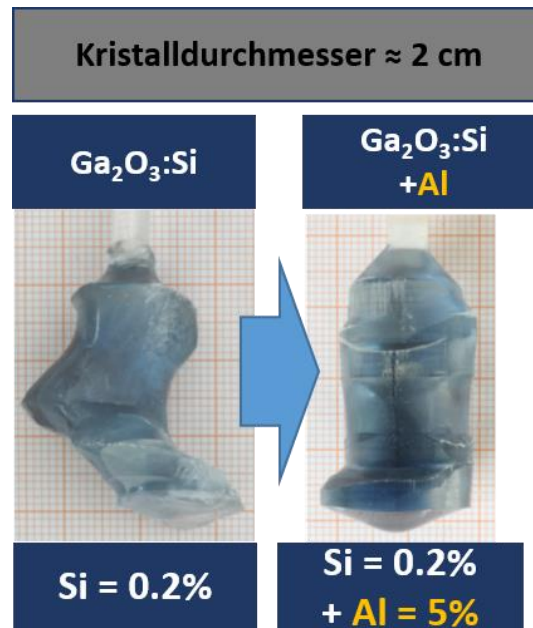


Abbildung 2: Aufnahmen von β - Ga_2O_3 Kristallen mit und ohne Aluminium Co-Dotierung.

Somit konnten leitfähige Kristalle mit einer Elektronenkonzentration von $2,4 \times 10^{18} - 4,3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ und einer Beweglichkeit der freien Ladungsträger von 93 - 76 cm^2/Vs erzeugt werden, welche zu Wafern der Größe $10 \times 10 \text{ mm}^2$ konfektioniert wurden.

Für Kristalle mit einem Durchmesser von 2" konnte die Verwendung von Al die maximale Kristalllänge jedoch nicht verbessern (Abbildung 3). Auch die Verwendung einer Germanium Co-Dotierung wirkte sich nicht positiv auf die Zylinderlänge aus, wie ebenfalls Abbildung 3 verdeutlicht.



Abbildung 3: Aufnahmen von 2" β - Ga_2O_3 Kristallen mit Aluminium und Germanium Co-Dotierung.

Darüber hinaus wurden weitere Lösungsansätze erprobt:

- (i) weitere Versuche zum Co-Doping,
- (ii) Anpassung des Kristall/Tiegel Verhältnisses und
- (iii) reduzierte Wachstumsrate

jedoch ohne nennenswerte positive Effekte in Bezug auf die Kristalllänge. Erst durch Anpassen der Wachstumsatmosphäre konnte die Kristallzylinderlänge auf ca. 25 mm erhöht werden. Dabei wurde Gas mit hoher Wärmeleitfähigkeit in der Wachstumsatmosphäre verwendet, im Detail Helium mit einer Konzentration von 40 Vol. %. Eine weitere Verbesserung in Bezug auf die Kristalllänge konnte durch die Modifikationen des Ofen-Designs erreicht werden. Dabei kam eine Kombination aus einer inneren Wärmedämmung mit geringer Strahlungsreflexion und einer dynamischen Wachstumsrate zum Einsatz. Damit konnte die Kristallzylinderlänge auf 30 mm angehoben werden wie in Abbildung 4 zu sehen.

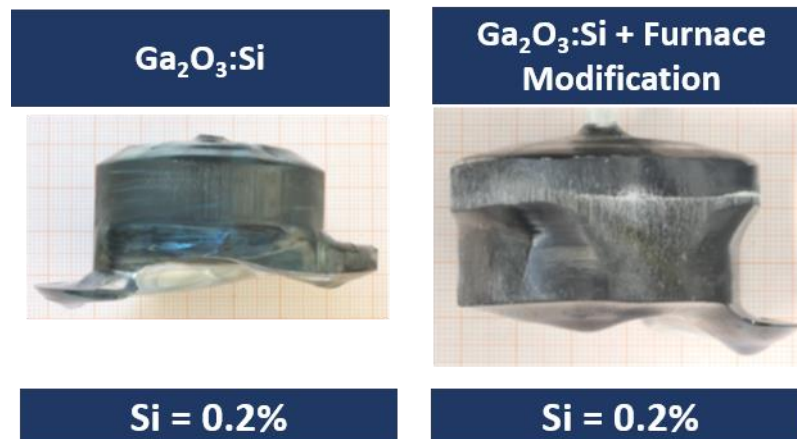


Abbildung 4: Aufnahmen von β -Ga₂O₃ Kristallen mit Durchmessern von 2" aber unterschiedlicher Zylinderlängen.

Auf diese Weise konnten erfolgreich leitfähige Si dotierte β -Ga₂O₃ Volumenkristalle mit einem Kristalldurchmesser von 2" und einer Länge von bis zu 30 mm erzeugt werden ohne, dass es zu einer Spiralbildung kam. Diese Kristalle ließen die Präparation von (100) 4° off orientierten Wafer bis zu einer Größe von 25x25 mm² zu (die weiteren Arbeiten fanden aber auf 10x10 mm² Wafern statt, wie im 3. Zwischenbericht erläutert). Die Meilensteine M1 sowie M6 wurden erfolgreich umgesetzt.

Arbeitspaket: Ga₂O₃ Epitaxie und Standardcharakterisierung

Der nächste Schritt in der Wertschöpfungskette nach Volumenkristallzüchtung und Wafering, ist die Epitaxie zur Abscheidung des elektrisch aktiven Teils des späteren Bauelements. Dabei zielt unser Projektpartner das FBH auf eine vertikale Bauelementstruktur ab, um die hohe Durchbruchfeldstärke von β -Ga₂O₃ besser auszunutzen. Die vertikale Bauelementstruktur erfordert maßgeschneiderte Epitaxie-Schichten. Die Anforderungen an die Eigenschaften dieser Schichten kann man wie folgt zusammenfassen:

- Niedrig dotierte Schichten für die Driftzone (M3, M7)
- Eine industrienähere Wachstumsrate ($\geq 1\mu\text{m/h}$)
- Schichtdicken, die die Realisierung eines Bauelements zulassen, welches bis zu 2000 V schalten kann. Geht man hier von einer aktuell realistisch erreichbaren durchschnittlichen Durchbruchfeldstärke von 3MV/cm aus, ist eine Schichtdicke der Driftzone des späteren Bauelements von ca. 6 μm notwendig, um die angestrebte Spannung blockieren/schalten zu können.

Die Anforderungen bilden die beiden Epitaxie-Meilensteine ab:

M3: „niedrig dotierte Epi-Schicht für Driftzone demonstriert (Ziel: $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$), kompatibel mit avasierter Prozesstechnologie (schließt mit n+ -Epi für refractory Sourcekontakte ab, $n=1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$)“

M7: Natur der Hintergrunddotierung identifiziert, n⁻ dotierte Epitaxieschicht für Fin-Mesa-Struktur auf $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ reduziert“

In der Vergangenheit wurden am IKZ für die Materialentwicklung von lateralen Bauelementen β -Ga₂O₃ Schichten mit Schichtdicken im Bereich von wenigen hundert Nanometern auf semi-isolierenden Substraten abgeschieden. Ein einfaches Up-Scaling des bereits vorhandenen Prozesses für die vertikale Struktur führte dabei jedoch zu keinem zufriedenstellenden Ergebnis. Für Schichtdicken oberhalb von

0,5 μm wurde dabei ein Übergang vom gewünschten defektarmen Stufenflusswachstum zum defektreichen 2D Inselwachstum beobachtet (siehe Abbildung 5 oben). Ein Verständnis der Wachstumsparameter und deren Einfluss auf den Epitaxie-Prozess sind hier unabdingbar, um die Kontrolle über die Wachstumsmodi zu er- und behalten. Dazu wurden die Wachstumsparameter dahingehend weiterentwickelt, um die effektive Diffusionslänge der Gallium Ad-Atome kontrollieren zu können. Dabei waren drei Schlüsselemente notwendig:

- i) Erhöhung des Reaktordrucks, zur Reduktion der Desorption von Gallium-Suboxiden von der Oberfläche
- ii) Anhebung des Argon-Volumenstroms (Push-Gas) um sicherzustellen, dass die Precursoren vom Showerhead zur Substratoberfläche auch bei erhöhtem Reaktordruck gelangen können
- iii) Anhebung des Gallium-Precursorenvolumenstroms zur Anpassung des Gallium/Sauerstoff Verhältnisses. Gallium reagiert an der heißen Substratoberfläche mit Sauerstoff. Dabei fängt Sauerstoff das Gallium ein und reduziert damit die effektive Diffusionslänge des Ga-Adatoms, wie interne Kinetic-Monte-Carlo Kalkulationen zeigen.

Durch die genannten Anpassungen war es nun möglich die effektive Diffusionslänge der Gallium Ad-Atome und damit die Wachstumsmodi zu kontrollieren. Damit gelang es auf (100) Substraten mit Fehlorientierungen von 6° bis 2° jeweils das gewünschte Stufenflusswachstum beizubehalten. Dabei zeigten (100) Substrate mit einer Fehlorientierung von 4° die besten elektrischen Eigenschaften für darauf abgeschiedene Epitaxie-Schichten. Zusätzlich konnte durch die beschriebene Weiterentwicklung der Wachstumsparameter die Wachstumsrate zunächst von ca. 0,30 $\mu\text{m}/\text{h}$ (Stand 2019 vor GoNext) auf bis zu 1,5 $\mu\text{m}/\text{h}$ angehoben und darüber hinaus das Stufenflusswachstum auch für Schichtdicken bis 3 μm beibehalten werden (siehe Abbildung 5 unten). Die Weiterentwicklung des Prozesses wurde dabei durch die Anwendungen von Werkzeugen aus dem Bereich maschinelles Lernen unterstützt.

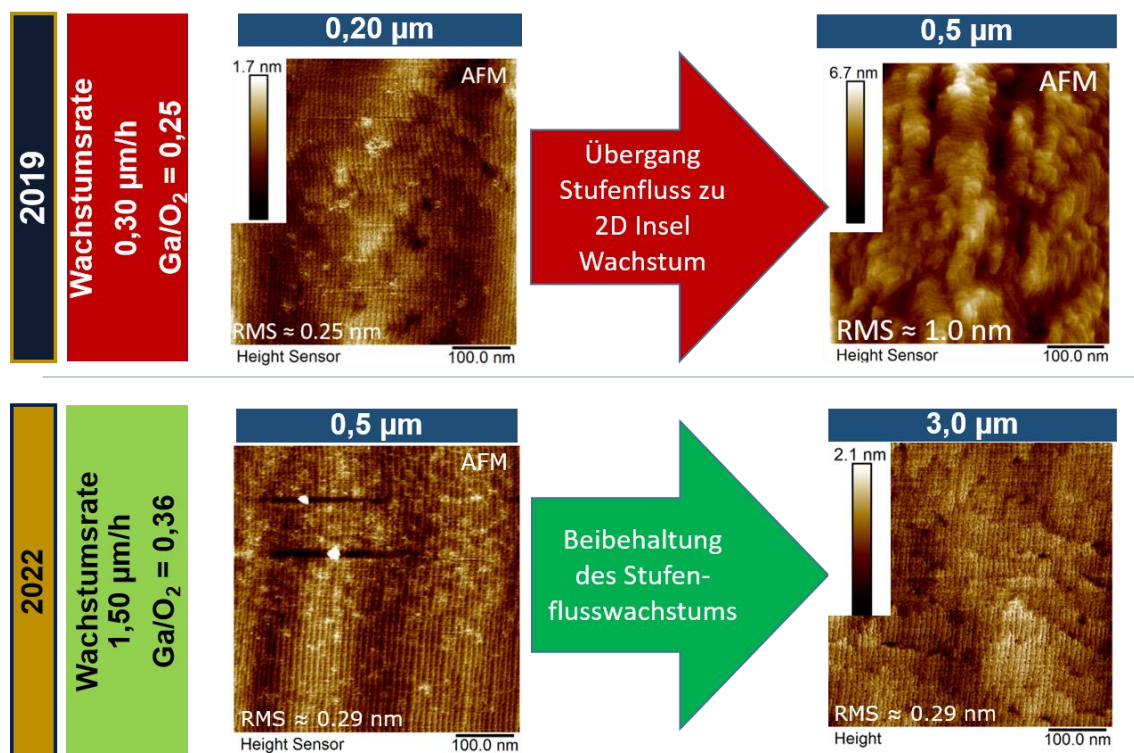


Abbildung 5: AFM Aufnahmen von $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ Schichten unterschiedlicher Schichtdicke und mit unterschiedlichen Wachstumsparametern abgeschieden.

Jedoch zeigten sich trotz mikroskopisch hoher morphologischer Qualität, makroskopisch Unebenheiten in Form von Partikeln auf der Oberfläche der 2 - 3 μm dicken Schichten, wie Abbildung 6 zeigt.

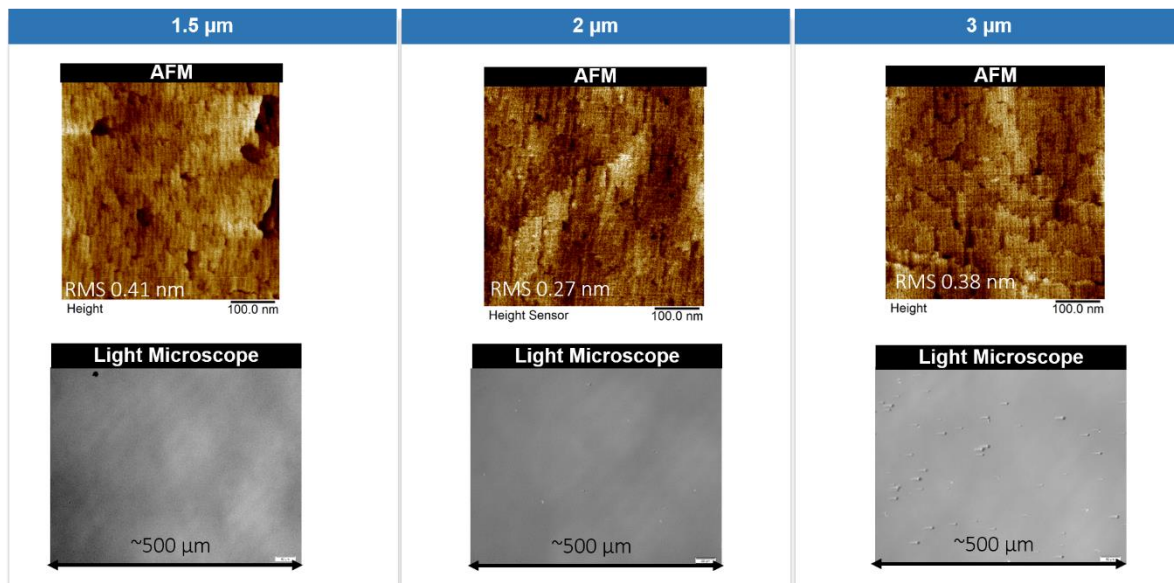


Abbildung 6: AFM und Lichtmikroskopie-Aufnahmen von Schichten mit einer Schichtdicke von 1,5 / 2,0 / 3,0 μm .

Nicht aufgebrochene Precursorenverbindungen wurden als Ursache für die Entstehung dieser Partikel gefunden, welche aus ungewollten Vorreaktionen in der Gasphase resultieren. Diese Vorreaktionen entstehen auf dem Weg vom Showerhead zum Substrat. Um die Distanz Showerhead – Substrat (d) (siehe Abbildung 7) möglichst gering zu halten und somit die Vorreaktionen zu verhindern, wurde mit Hilfe von IKZ Hausmitteln eine Hardwareanpassung an der Ga_2O_3 MOVPE Anlage durchgeführt.

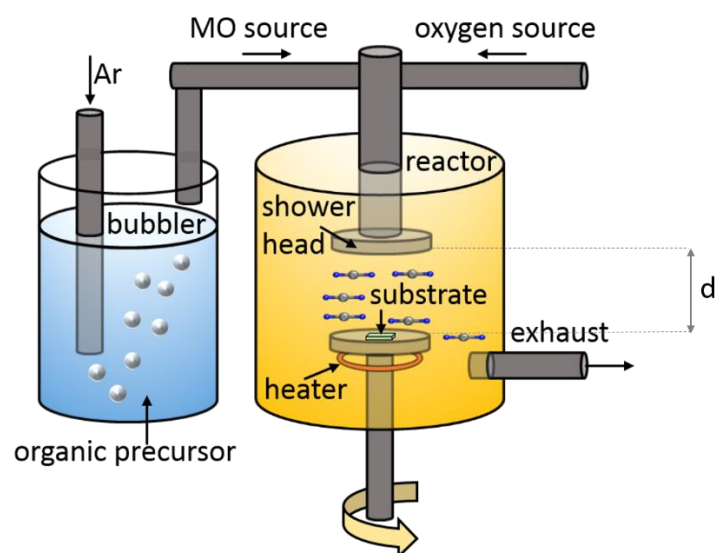


Abbildung 7: Schematische Darstellung der MOVPE Anlage.

Durch die Verringerung des Abstandes zwischen Showerhead und Suszeptor wurde die Wahrscheinlichkeit des Auftretens der Gasphasenvorreaktion durch eine Verringerung der Flugstrecke des Precursors (Ausgangsstoff) reduziert. Zusätzlich fand ein erhöhter Gesamtgasstrom (hauptsächlich Ar zur Verdünnung der Konzentration des nicht umgesetzten Precursors in der Gasphase) Anwendung.

Das Ergebnis war eine signifikante Verringerung der Dichte parasitärer Partikel bei einem Abstand zwischen Showerhead und Suszeptor von 1,5 cm (vorher ca. 8 cm). Infolgedessen konnten MOVPE-gewachsene β -Ga₂O₃-Epitaxie Schichten auf (100) 4° off orientierten Substraten mit einer Schichtdicke bis 4 μ m demonstrieren werden, mit einer Ladungsträgerbeweglichkeit von über 160 cm²/Vs bei 5×10^{16} cm⁻³ Ladungsträgerkonzentration. Diese Prozessergebnisse wurden 2023 im Japanese Journal of Applied Physics veröffentlicht und als Spotlight-Artikel geehrt.

Durch die Verringerung des Abstandes zwischen Showerhead und Suszeptor sowie weiterer Optimierung des Ga/O₂ Verhältnisses und Gasflusses konnten Wachstumsraten von bis zu 2,2 μ m/h realisiert werden (siehe Abbildung 8).

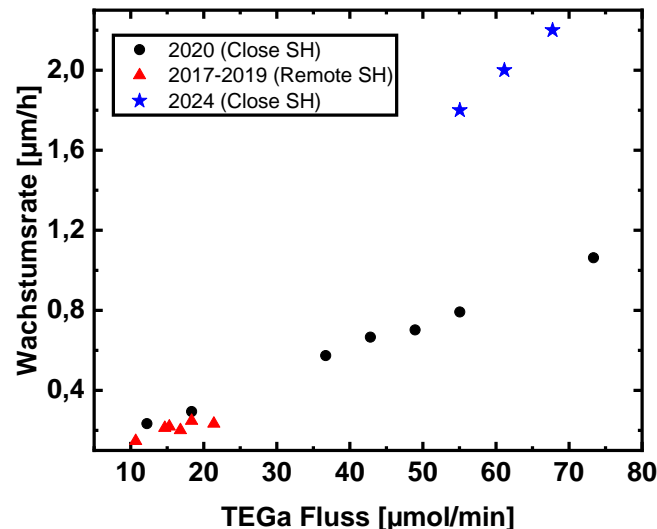
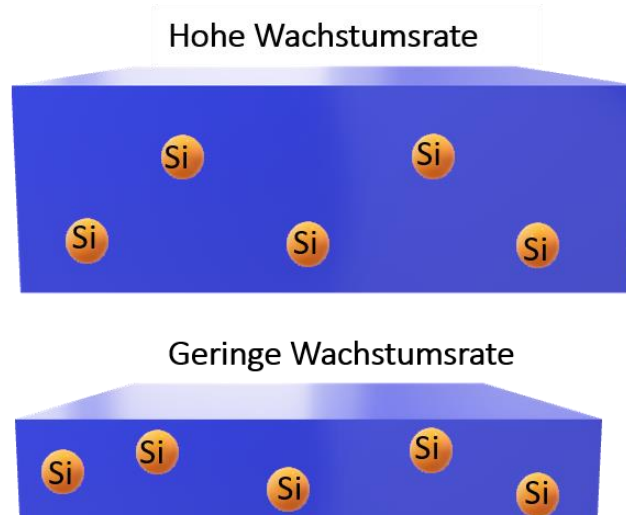


Abbildung 8: Wachstumsrate in Abhängigkeit des TEGa Flusses sowie des Showerheadposition.

Dies geht Hand in Hand mit der Realisierung von Schichten im Dotierungsbereich unter $1 \cdot 10^{17}$ cm⁻³. Da für das Wachstum der Driftzone des späteren Bauelements mehrere μ m dicke β -Ga₂O₃ Schichten ohne Si Fluss gewachsen werden, ist anzunehmen, dass das residuale Si in den Schichten nur von Hintergrundverunreinigungen in der Kammer kommen kann. Entweder durch Si was sich von Abscheidprozessen von Schichten mit Si Dotierung noch in der Kammer befindet oder aber durch Ausgasen von Material des Reaktors (Quarzteile,...) und/oder des Suszeptors (besteht aus SiC). Was durch die Anwendung des maschinellen Lernens bereits vorausgesagt wurde, konnte experimentell bestätigt werden: Eine Erhöhung der Wachstumsrate trägt daher hier direkt zu einer Reduzierung des Einbaus von Hintergrunddotierungen bei (vgl. Abbildung 9).



$$\text{Dotierung} \propto \frac{[Si]_{\text{angeboten}} + [Si]_{\text{Hintergrund}}}{\text{Wachstumsrate}}$$

Abbildung 9: Schematische Darstellung des Einbaus der Hintergrunddotierung bei verschiedenen Wachstumsraten..

Hinsichtlich der Schichtdicke konnten zum Ende des Projektes β -Ga₂O₃ Schichten mit abgezielten Schichtdicken bis zu 6 μm realisiert werden, unter Beibehaltung des für die elektrischen Eigenschaften so wichtigen Stufenflusswachstums (Abbildung 10).

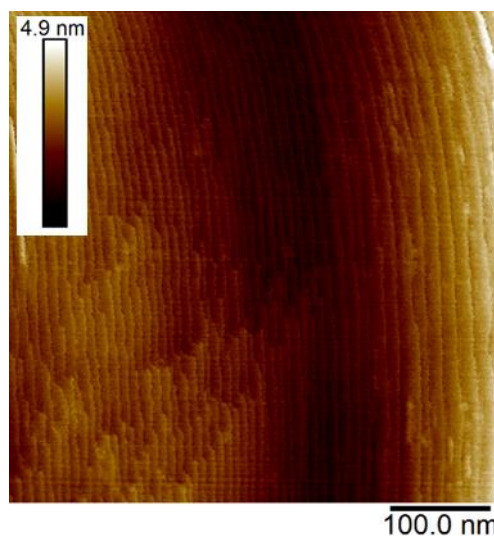


Abbildung 10: AFM Bild der Morphologie einer 6 μm dicken homoepitaktisch gewachsenen (100) 4° off orientierten β -Ga₂O₃ Schicht.

Darüber hinaus konnte das Verständnis über die Wachstumsmechanismen insbesondere der Morphologie-Instabilität noch weiter ausgebaut werden. Dabei wird nun zwischen zwei Instabilitätsarten unterschieden: i) Stufeninstabilität und ii) Stufen-Pinning aufgrund von Dotierung. Wie Abbildung 11 zu entnehmen ist, kann eine Morphologieänderung zum einen durch Schichtdickenerhöhung (Stufeninstabilität) oder durch das Pinnen von Stufen durch Verunreinigungen (Stufen-Pinning durch Dotierung) resultieren. Für den ersten Fall konnten wir vom GaN lernen. Durch eine Erhöhung des Ga Flusses kann die Ehrlich Schwöbel Barriere reduziert werden. Die Ehrlich Schwöbel Barriere ist eine Potentialbarriere, die in diesem Fall verhindert, dass Atome von einer höheren Stufe auf eine darunterliegende gelangen (Abbildung 12). Zusätzlich wissen wir durch IKZ

interne KMC Kalkulationen, dass Sauerstoff die effektive Diffusionslänge von Gallium verringert. Durch ein erhöhtes Ga/O_2 Verhältnis bildet sich ein Ga-Adlayer aus (wie beim GaN) welcher die Stufenstabilität erhöht und das gewünschte Stufenflusswachstum begünstigt.

Auch ab einer bestimmten Konzentration von Verunreinigung in unserem Falle der Si Dotierung (wie beispielsweise für Capping Schichten) kann eine ungewollte Morphologieänderung resultieren. Einzelne Si Atome können das Stufenflusswachstum stören, indem sie die Stufe pinnen wie in Abbildung 13 gezeigt. Diese Stufe wächst dann langsamer als eine ungepinnte. Dieser Effekt verstärkt sich mit zunehmender Dotierkonzentration und führt schlussendlich zu einer Überlagerung von mehreren Stufen, dem sogenannten und bereits bekannten Step-Bunching.

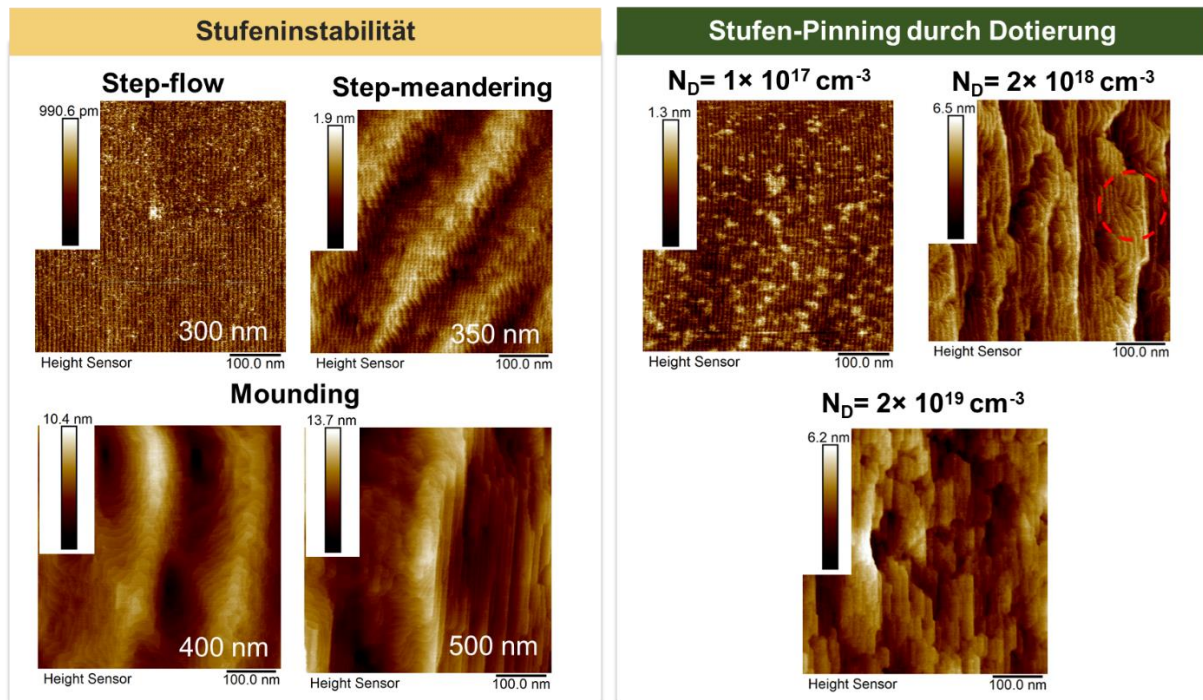


Abbildung 11: AFM Aufnahmen von (100) 4° off orientieren Ga_2O_3 Schichten unterschiedlicher Schichtdicke und Dotierung

Ehrlich Schwöbel Barriere für den GaN Fall

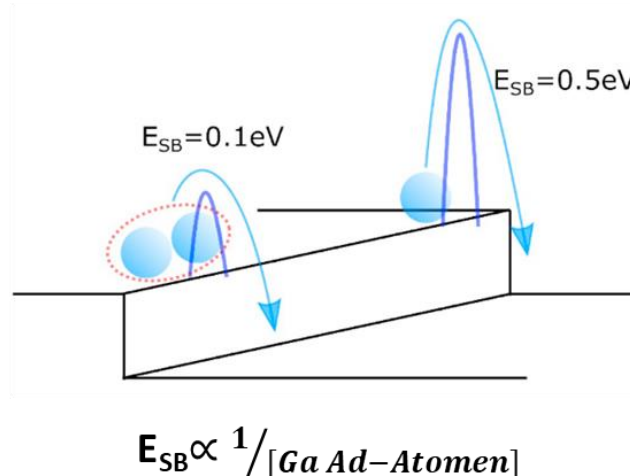


Abbildung 12: Schematische Darstellung der Ehrlich-Schwöbel Barriere für den GaN Fall [nach Turski et al., Appl. Surf. Sci. 484, 717 (2019).]

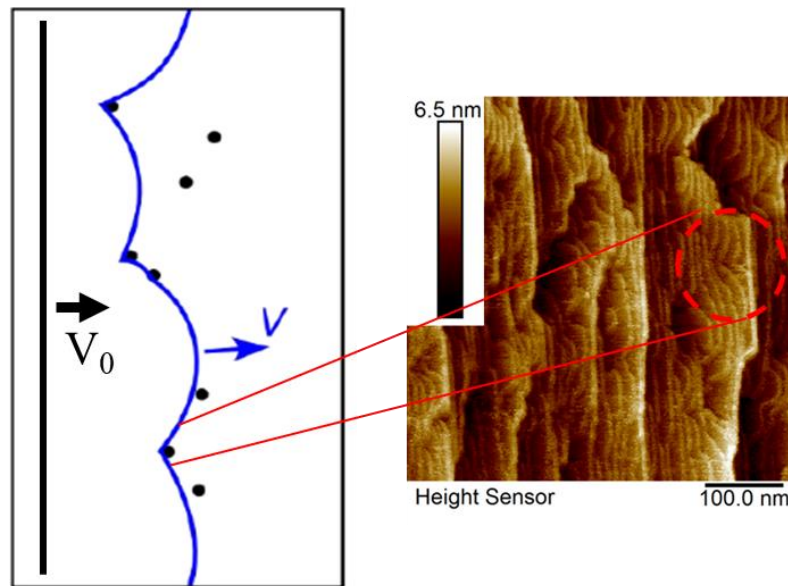


Abbildung 13: Schematische Darstellung des Stufen-Pinning Effekts [Lee-Thorp et al. (2020) *Cryst. Growth Des.*, 20 (3), 1940–1950.] und diesbezügliches AFM Bild einer (100) 4° off orientierten β -Ga₂O₃ Schicht mit Stufen-Pinning.

Dabei ist die Stufengeschwindigkeit der gepinnten Stufe gegeben durch:

$$V = V_0(1 - \omega\gamma\kappa/\Delta\mu)$$

Mit

V_0 ... Geschwindigkeit der geraden Stufe

κ ... Krümmung der Stufe

$\Delta\mu$... Änderung des chemischen Potentials

γ ... Oberflächenenergie

ω ... Molares Volumen

Die Stufengeschwindigkeit der gepinnten Stufe nähert sich dann der geraden Stufe an, wenn der letzte Term so klein wie möglich wird. Dies kann dadurch erreicht werden, indem man die Änderung des chemischen Potentials so groß wie möglich wählt, welche sich durch die Erhöhung des Precursor Flusses (in unserem Fall Ga) einstellen lässt. Somit ist auch im Falle des Stufen-Pinnings eine Erhöhung des Ga/O₂ Verhältnisses der Stufenstabilität zuträglich.

Übergeordnet anzumerken ist, dass der Industriepartner AIXTRON stets mit Rat und Tat zur Seite stand im Hinblick auf die Prozessentwicklung Epitaxie. Der direkte Draht zu Prof. Michael Heuken (*Vice President Advanced Technologies*) war dabei ausschlaggebend. Phänomene und Wachstumsmechanismen konnten direkt zeitnah telefonisch besprochen und Ratschläge eingeholt werden - eine sehr fruchtbare Zusammenarbeit. Generell konnten die Industriepartner durch die enge Zusammenarbeit das Potential von zukünftigen β -Ga₂O₃ Komponenten frühzeitig abzuschätzen und so eine Basis für die Planung der Leistungselektronik der nächsten Generation schaffen.

Zusammenfassend wurden Epitaxieschichten mit den von der Bauelementprozessierung (Projektpartner FBH) geforderten Eigenschaften für zwei Bauelementgeneration hergestellt. Auf Basis dessen wurden β -Ga₂O₃ „normally off“ vertikale Bauelemente realisiert. Schichten mit Schichtdicken > 3 μ m und mehr für die dritte Generation von Bauelementen (prozessiert beim Projektpartner FBH)

konnten erst nach Projektende an den Projektpartner transferiert werden. Dennoch wurden beide Meilensteine innerhalb der Projektlaufzeit erfolgreich umgesetzt.

Arbeitspaket: Materialcharakterisierung

Die Hauptaufgaben der Materialcharakterisierung innerhalb des Projektes waren:

- i. Identifikation der für die Hintergrunddotierung verantwortlichen Verunreinigungen in den Schichten (M7)
- ii. Nachweis der Qualität der mit MOVPE hergestellten Schichten und damit der Eignung für die Bauteileherstellung
- iii. Untersuchung der Defekte in Substratkristallen für weitere Verbesserung der Materialeigenschaften

Es wurden alle Hauptaufgaben in der Materialcharakterisierung erfolgreich bearbeitet und die Ergebnisse flossen in die Optimierung des Wachstums ein.

In Punkt **(i)** wurde Silizium als ungewollte Verunreinigung identifiziert, welche die Hauptursache der Hintergrunddotierung darstellt. Durch Korrelation mit den Wachstumsparametern wurde eine Verunreinigung der Ausgangsmaterialien mit Silizium ausgeschlossen. Dahingegen konnte gezeigt werden, dass sich die Verunreinigungsquelle in der Wachstumskammer befindet (vor allem residuales Si von vorangegangenen Wachstumsexperimenten). Aus technischen Gründen, ist es nicht möglich diese vor jedem Wachstumsversuch zu entfernen. Da die Verunreinigungsquelle mit einer konstanten Rate Silizium abgibt, gelang es durch eine Erhöhung der Wachstumsrate den Einbau der Verunreinigung zu minimieren (siehe Arbeitspaket Epitaxie).

Um die Qualität der Schichten in Punkt **(ii)** nachzuweisen, wurden Raumtemperatur- und temperaturabhängige Hall-Effekt-Messungen an einer 2,2 μm dicken $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ -UID-Schicht (UID, unintentionally doped) durchgeführt. Die Messungen zielen darauf ab, die Materialqualität in Bezug auf den Streuungsmechanismus und das Kompensationsverhältnis zu bewerten. Die Filme wiesen aufgrund der Hintergrunddotierung eine Ladungsträgerdichte von Mitte 10^{16} cm^{-3} auf. Darüber hinaus wurden hohe Raumtemperatur-Mobilitäten von $155 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ und $163 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ (bei einer Ladungsträgerkonzentration von ca. $5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) für die 2 μm und 3 μm dicken Filme gemessen. Dies waren zu diesem Zeitpunkt die höchsten Werte für 2 bis 3 μm dicke (100) orientierte MOVPE-gewachsene Schichten weltweit bei dieser Dotierkonzentration. Die Ergebnisse für die 2,2 μm dicke Schicht sind in Abb. 14 dargestellt. Das Maximum der Mobilität von $1243 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ bei $T = 80 \text{ K}$ ist im Diagramm der temperaturabhängigen Mobilität zu sehen (Abb. 14a). Die experimentellen temperaturabhängigen Mobilitätsdaten werden mit der Lösung der Boltzmann-Transportgleichung in der Relaxationszeit-Näherung unter Berücksichtigung der folgenden Streumechanismen angepasst: polare optische Phononen (μ_{POP}), unpolare optische Phononen (μ_{NOP}), ionisierte Verunreinigungen (μ_{II}), akustische Phononen (μ_{AP}) und neutrale Verunreinigungen (μ_{NI}). Die Gesamtmobilität (μ_{total}) wurde nach der Matthiessen-Regel berechnet:

$$\frac{1}{\mu_{\text{total}}} = \frac{1}{\mu_{\text{NI}}} + \frac{1}{\mu_{\text{II}}} + \frac{1}{\mu_{\text{POP}}} + \frac{1}{\mu_{\text{NOP}}} + \frac{1}{\mu_{\text{AP}}} . \quad (1)$$

Bei Temperaturen über 120 K ist die Mobilität aufgrund der Streuung optischer Phononen begrenzt. Dabei ergab eine Kombination aus Streuung an polaren optischen und unpolaren optischen Phononen die beste Anpassung. Bei Temperaturen unter 120 K ist die Mobilität durch die Streuung ionisierter

Verunreinigungen (Störstellen) begrenzt. Dabei wurden die Hall-Mobilitäts- und Dichtekurven (Abb. 14) gleichzeitig mit den gleichen Parametern für die Donordichten ($N_{D,1}, N_{D,2}$) und Ionisierungsenergien ($E_{D,1}, E_{D,2}$) sowie die tiefe Akzeptordichte (N_A^-) angepasst. Hierbei fand ein Modell mit zwei flachen Donor-Zuständen und vollständig ionisierten tiefen Akzeptor-Zuständen (unterhalb der mittleren Bandlücke) Anwendung, um die Hall-Ladungsträgerdichte $n\left(\frac{1}{T}\right)$ am besten zu beschreiben, was zur Ladungsneutralitätsgleichung führt:

$$n\left(\frac{1}{T}\right) = \sum_{i=1}^2 \frac{N_{D,i}}{1+2 \exp\left(\frac{E_f(T)-E_{D,i}}{k_B T}\right)} - N_A^- \quad , \quad (2)$$

mit der Boltzmann-Konstante k_B und der Fermi-Energie bei der entsprechenden Temperatur $E_f(T)$. Unter der Annahme einer Boltzmann-Statistik für die Ladungsträgerdichte kann man Gleichung (2) iterativ lösen, um die beste Anpassung an die experimentellen Werte zu erhalten, wie in Abb. 14 (blaue Linie) gezeigt. Die aus der Anpassung extrahierten Werte sind in Tabelle 1 zusammengefasst. Der flachste Donor hat eine Ionisierungsenergie von $E_{D,1}=41$ meV und eine Konzentration von $N_{D,1}=6,3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Das zweite Donorlevel hat eine Ionisierungsenergie von $E_{D,2}=120$ meV und eine Konzentration von $N_{D,2}=3,5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Die vollständig ionisierte tiefe Akzeptorkonzentration wurde mit $N_A^- = 4 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ bestimmt, was zu einem Kompensationsverhältnis von $\frac{N_A^-}{N_D} = 6\%$ führt. Es ist zu beachten, dass die Anpassung unterhalb von 45 K fehlschlägt, was auf den Bereich des Einfrierens von Ladungsträgern zurückzuführen ist (möglicherweise mit Hopping-Leitung im Störstellenband). Da die Konzentration des flachsten Donorniveaus aus der Hall-Anpassung mit der Siliziumkonzentration aus SIMS-Analysen übereinstimmt, kann man annehmen, dass die unbeabsichtigte Dotierung mit der Silizium-Hintergrunddotierung zusammenhängt. Geht man davon aus, dass die (Silizium-) Hintergrunddotierung konstant ist, würde die niedrige, den Hintergrund kompensierende Akzeptordotierungskonzentration eine kontrollierte n-Typ-Dotierung bis hinunter in den mittleren Bereich von 10^{15} cm^{-3} ermöglichen. Das zeigt auf, dass die Ladungsträgerkonzentration der Schichten von 1×10^{16} (wie von Meilenstein M7 gefordert) nicht nur möglich ist, sondern sogar noch weiter in den Bereich 10^{15} cm^{-3} gedrückt werden könnte.

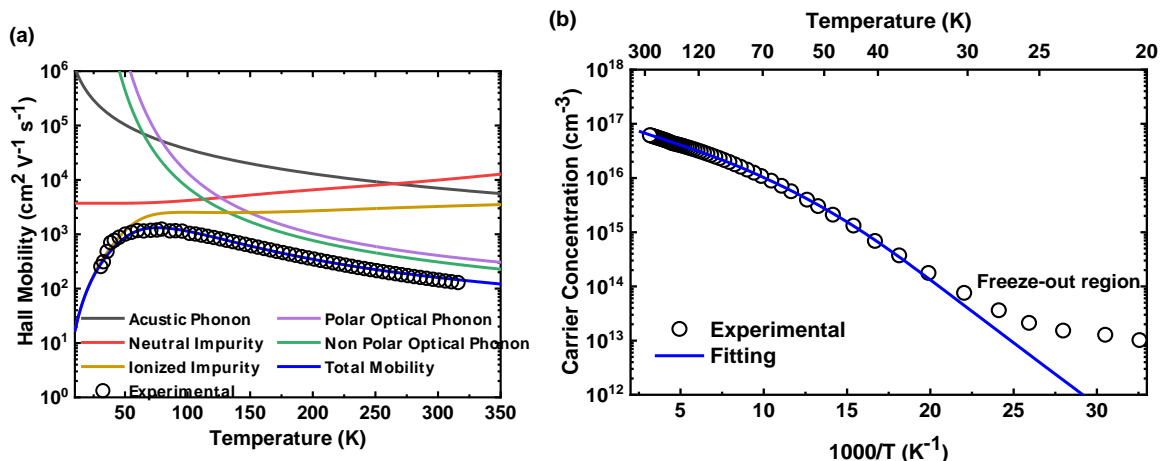


Abbildung 14. Temperaturabhängige Hall-Effekt-Messplots von UID MOVPE-gewachsenen (100) β -Ga₂O₃ homoepitaktischen Schichten (2 μm). Leere schwarze Kreise stellen die gemessenen experimentellen Daten dar: (a) Hall-Elektronenmobilität und verschiedene Streuungsmechanismen werden in den im Text erwähnten Mobilitätsberechnungen berücksichtigt. (b) Konzentration der freien Ladungsträger, wobei die blaue Linie die Anpassung auf der Grundlage der Ladungsneutralitätsgleichung darstellt.

Tabelle 1. Zusammenfassung der extrahierten Parameter der Anpassung der Ladungsneutralitätsgleichung des Zwei-Donor-Modells.

$N_{D,1}$ (cm^{-3})	$E_{D,1}$ (meV)	$N_{D,2}$ (cm^{-3})	$E_{D,2}$ (meV)	N_A^- (cm^{-3})
6.3×10^{16}	41	3.5×10^{16}	120	4×10^{15}

Damit erfüllte das Material die Anforderungen für die Bauteilherstellung beim Projektpartner FBH. Im internationalen Vergleich der Materialqualität führten und führen diese MOVPE Schichten somit auch hinsichtlich der Ladungsträgerbeweglichkeit den aktuellen Stand der Technik mit an.

Die Defekte in Substratkristallen (Punkt (iii)) wurden mittels tiefer Störstellen Transienten-Spektroskopie (DLTS) untersucht (siehe Abbildung 15). In dieser Untersuchung lag der Fokus auf der möglichen Erzeugung neuer Defekte in Schottky Dioden in Abhängigkeit des Elektrodenmaterials sowie unter thermischer Belastung. Da Leistungselektronik normalerweise am thermischen Limit des Bauelements betrieben wird, wurde hierbei die thermische Stabilität verschiedener Schottky-Kontakte (Au, Pt und Ni) auf (100) Ga₂O₃-Einkristallen untersucht. Es wurden mehrere Defektniveaus unterhalb des Leitungsbandminimums bei 0,41 eV, 0,60 eV, 0,77 eV, 0,96 eV und 1,17 eV festgestellt. Bei der DLTS-Temperaturabsenkung verschwand das 1,17-eV-Niveau, und das 0,60-eV-Niveau erschien für alle Schottky-Kontakte. DFT-Berechnungen deuten darauf hin, dass die Umlagerung und Dissoziation eines einzelnen Wasserstoffatoms aus einem doppelt hydrierten Ga-O-Divacancy-Komplex während des Temperaturdurchlaufs unter Vorspannung stattfindet. Das Defektniveau von 0,96 eV trat beim Ni-Kontakt erst nach der thermischen Belastung auf, im Gegensatz zu Au und Pt, wo es ohne ein thermisches Budget vorhanden ist. Temperaturabhängige Leckstrommessungen (bei -4 V) deuten auf eine Oxidation von Ni hin, und eine weitere thermodynamische Analyse legt eine Legierung von Au-Ga-Atomen an der Au/ β -Ga₂O₃-Grenzfläche nahe. Diese Studien geben einen Einblick in das Verhalten dieser in diesem Bereich hauptsächlich verwendeten Schottky-Kontakte und in die Veränderungen, die mit Temperaturwechseln einhergehen. Wichtige Informationen für den mit der Bauelementprozessierung beauftragten Projektpartner FBH.

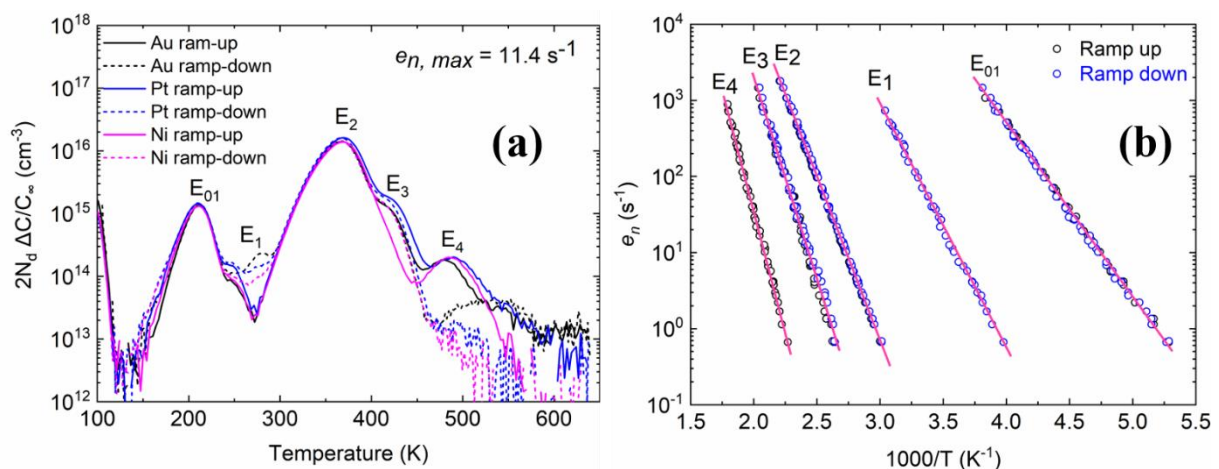


Abbildung 15(a) DLTS-Spektren von verschiedenen Au- (schwarz), Pt- (blau) und Ni-Schottky-Kontakten (rosa). Die durchgezogenen Linien stellen Messungen an frischen Kontakten vor oder während des Hochfahrens dar, und die gestrichelten Linien stellen Messungen nach dem Temperaturzyklus oder während des Herunterfahrens dar. Die zugehörigen DLTS-Parameter sind die Einstellung des Ratenfensters für das Spitzenmaximum $e_n, \text{max} = 11,4 \text{ s}^{-1}$, die Sperrspannung $V_r = -4 \text{ V}$, die Pulsspannung $V_p = 0 \text{ V}$ und die Pulsbreite $t_p = 100 \mu\text{s}$. (b) Repräsentative Arrhenius-Darstellung der Emissionsraten im

Spitzenmaximum des Au-Kontakts für jedes Defektniveau während des Hochfahrens (leere schwarze Kreise) bzw. des Herunterfahrens (leere blaue Kreise). Die rosa Linien stellen lineare Anpassungen der in Arrhenius-Darstellung aufgezeichneten Daten dar. [4]

Der Industriepartner Hitachi Energy stand im Projekt neben der Bauelementprozessierung auch der Materialcharakterisierung zu Seite. Herauszuheben sind hier vor allem die DLTS (tiefe Störstellen Messungen) an Schichten von $1\mu\text{m}$, $2\mu\text{m}$, $3\mu\text{m}$ sowie $4\mu\text{m}$. Welche die Werte vom IKZ auch auf anderen Proben mit unterschiedlichen Schichtdicken bestätigten. Auch hier konnte ein Akzeptor Level im mittleren 10^{-15} cm^{-3} nachgewiesen werden. Dies zeigt das Epitaxie-Schichten mit Dotierungsbereichen unter $1 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ definitiv möglich sind. Des Weiteren deuten die Ergebnisse daraufhin, dass die Schichtqualität sich nicht mit zunehmender Wachstumsdauer mindert. Wertvolle Ergebnisse die sich begünstigend auf das Ziel, die Wertschöpfungskette vom Startmaterial und seinen Eigenschaften bis hin zum Bauelement zu verbessern, auswirken.

Ergänzend zu den Inhalten

Die wichtigsten Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Die Hauptposition stellt die Vergütung der wissenschaftlichen sowie technischen Mitarbeiter dar. Hinzu kommt Verbrauchsmaterial, welches für die Durchführung der Versuche im Bereich Volumenkristallzüchtung und Epitaxie sowie Charakterisierung unerlässlich war. Darüber hinaus wurden Aufträge wie spezielle Analysen (SIMS) sowie die Wafer-Konfektionierung an Dritte vergeben. Mit Hilfe der Reisemittel konnten die wissenschaftlichen Ergebnisse auf nationalen und internationalen Konferenzen durch die Wissenschaftler vorgestellt und diskutiert werden und durch Einsatz der Publikationsmittel auch in wissenschaftlichen Journalen *open access* veröffentlicht werden.

Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Projektarbeiten

Die durchgeführten Forschungsarbeiten im Projekt ForMikro-GoNext sowie die dafür aufgewandten Ressourcen waren notwendig und angemessen um das Projekt erfolgreich zu bearbeiten. Sie entsprachen der im Projektantrag formulierten Planung. Darüber hinaus wurden alle wesentlichen im Arbeitsplan formulierten Aufgaben erfolgreich bearbeitet. Es wurden keine zusätzlichen Ressourcen für das Projekt notwendig. Lediglich eine kostenneutrale Laufzeitverlängerung wurde beantragt und bewilligt, hauptsächlich zur Kompensation von Ausfällen während der Corona Krise.

Die Wafer-Präparation für die Epitaxie und Bauelementfertigung umfasst 2 Themen: (i) Wachstumsentwicklung hochleitender Volumenkristalle und (ii) Entwicklung der Herstellung von Wafern aus den Volumenkristallen. Für das Management und die Entwicklung des Kristallwachstumsprozesses (einschließlich Designs, Dotierung, Thermodynamik, Wachstumsexperimente usw.) waren 10 PM notwendig (das IKZ finanzierte hier den führenden Wissenschaftler im Bereich Kristallzüchtung aus IKZ Haushaltsmitteln um den Kostenrahmen des Projekts nicht zu sprengen). So wurden qualitativ hochwertige und hoch leitfähige Kristalle mit Durchmessern bis zu 2" erzeugt.

Der Wissenschaftler Epitaxie war für die Entwicklung und Modellbildung des Epitaxie-Wachstumsprozesses zuständig. Weiterhin koordinierte er den Arbeitsablauf und leitete gleichzeitig den Doktoranden Epitaxie an. Dazu waren 39 PM notwendig.

Der Doktorand Epitaxie realisierte die Durchführung der Wachstumsexperimente und untersuchte die Epi-Schichten mit Hilfe von Standardcharakterisierungsmethoden prozessbegleitend in- und ex-situ. Dabei war er auch für die Präparation und Analyse der Morphologie (mittels AFM) der Substrate vor der epitaktischen Abscheidung zuständig.

Der Doktorand in der Materialcharakterisierung war für die strukturelle, optische sowie elektrische Untersuchung und Analyse der Volumenkristalle und Epitaxieschichten zuständig.

Beide Doktoranden schlossen ihre Promotionen mit Auszeichnung ab.

Der Techniker war zuständig für die Vorbereitung und Wartung der Kristallzüchtungsanlagen. Dies beinhaltete hauptsächlich die β -Ga₂O₃ Pulveraufbereitung (Trocknen, Pressen, Sintern), die Kristall-Keim-Präparation (Kernbohrung, Befestigung an einem Halter), die Vorbereitung der Iridium Teile (Reinigung mit Sandstrahlen, Ätzen, Ultraschallbad, Montage des Keimhalters) sowie die Entfernung von Ga₂O₃-Resten aus dem Tiegel nach dem Wachstum (Kernbohren, Sandstrahlen) (17,5 PM).

Voraussichtlicher Nutzen, insbesondere die Verwertbarkeit des Ergebnisses – auch konkrete Planungen für die nähere Zukunft - im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplans

Durch das BMBF-Projekt GoNext gelang für β -Ga₂O₃ der nächste Schritt in Richtung Technologieentwicklung. Um die vielversprechenden Materialeigenschaften von β -Ga₂O₃ besser nutzen zu können, ist eine vertikale Bauelementarchitektur notwendig. Dies bringt allerdings neue, anspruchsvolle Anforderungen an die gesamte Prozesskette von der Volumenkristallzüchtung und Wafering über die Epitaxie sowie Charakterisierung bis zur Bauelementherstellung mit sich. GoNext hat die Forschung zu β -Ga₂O₃ von der Grundlagenforschung bis zur Anwendungsebene vorangetrieben. Die Schlussfolgerung ist vielversprechend: Es gibt keine physikalischen Beschränkungen, die das Erreichen der theoretisch vorhergesagten, hervorragenden Materialeigenschaften verhindern, daher liegt der nächste Schwerpunkt auf der Skalierung des Prozesses. Die Ergebnisse wurden in zahlreichen Publikationen und auf Konferenzbeiträgen verwertet und zeigten zum Zeitpunkt der Veröffentlichung Rekordwerte in Bezug auf Schichtdicke, Qualität und elektrische Eigenschaften der epitaktisch gewachsenen β -Ga₂O₃-Schichten auf (100)-orientierten β -Ga₂O₃-Substraten.

Die Ergebnisse von GoNext legten den Grundstein für die Weiterentwicklung dieses Materials, so, dass β -Ga₂O₃ nun auf die Ebene der angewandten Wissenschaft gehoben werden kann. Dieser Schritt ermöglichte es nun Ende 2024, ein EFRE-Projekt zu akquirieren, um die Technologieentwicklung von β -Ga₂O₃ gestützt durch Investmittel zu beginnen. Die neue Aufgabe: Skalierung des Prozesses, um EU-weit einzigartiger Lieferant und Kooperationspartner für 2" β -Ga₂O₃ Epi-Wafer zu werden.

Das Timing ist denkbar gut: Das Interesse an β -Ga₂O₃ hat in den letzten Jahren weltweit deutlich zugenommen. Da die Ergebnisse aus dem IKZ international führend sind, ist eine Kommerzialisierung von β -Ga₂O₃ Epi-Wafern in Form einer Ausgründung geplant. Mit dieser Idee beteiligte sich das IKZ-Team am Berliner Startup-Inkubator 2023, dem Innovation Network for Advanced Materials (INAM), und gewann den Wettbewerb (AdMaLab 2023). Die Gründung ist für die erste Hälfte des Jahres 2025 geplant.

Als direkte in der Projektlaufzeit messbare Verwertung ist hier hervorzuheben, dass relevante Projektergebnisse in die Marktstrategie und Produktentwicklung beim Projektpartner AIXTRON mit einfließen. Auf Basis von Publikationen welche überwiegend aus GoNext erstanden sind, wurden AIXTRON Systeme weiter entwickelt speziell in Richtung β -Ga₂O₃ Abscheidung. AIXTRON ist nun seit kurzem in der Lage MOVCD Anlagen, welche auf die Herstellung von β -Ga₂O₃ Epitaxieschichten zugeschnitten sind, zu verkaufen.

Während der Durchführung des Vorhabens dem Zuwendungsempfänger bekannt gewordener Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Aktueller internationaler Spitzenwert bezüglich der Raumtemperaturmobilität einer homoepitaktischen mittels MOVPE abgeschiedenen β -Ga₂O₃ Schicht beträgt 194 cm²/Vs [Z. Feng et al., Phys. Status Solidi RRL 2000145, 2020]. Dieses Ergebnis wurde an der Ohio State Universität auf einem (010) orientierten Substrat erhalten. Anzumerken ist hier, dass dieser hohe Wert der Mobilität bei einer Konzentration der freien Ladungsträger von $\approx 8 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-3}$ gemessen wurde, also mehr als eine Größenordnung tiefer als in unserem Fall. Die Mobilität skaliert mit der Konzentration der freien

Ladungsträger. Somit ist der am IKZ erreichte Wert von für 4µm dicke Schichten von 160 cm²/Vs bei einer Konzentration der freien Ladungsträger von ca. 5·10¹⁶ cm⁻³ auf (100) orientierten Substrat (mit 4° Off-Cut) ebenfalls ein Rekordwert. Des Weiteren führt die Verwendung der (010) Orientierung im Gegensatz zur (100) Orientierung zu einem facettierten Wachstum, was die Oberflächenrauigkeit der Schichten erhöht und zu unscharfen Übergängen zwischen einzelnen Schichten führen kann. Dabei ist eine morphologisch glatte Oberfläche wie sie beim Wachstum auf der (100) Orientierung durch Stufenflusswachstum erhalten werden kann ein deutlicher Vorteil für Bauelemente, da hier schärfere Übergänge und somit geringere Leckströme möglich sind.

Erfolgte oder geplante Veröffentlichungen der Ergebnisse nach Nr. 5 der NKBF/NABF

Die wissenschaftlichen Ergebnisse der Prozessentwicklung bezüglich der Volumenkristallzüchtung, der epitaktischen Schichtherstellung sowie Materialcharakterisierung aus GoNext wurden insgesamt in 24 Publikationen veröffentlicht. Dabei konnten die Doktoranden Ta-Shun Chou (Epitaxie) und Palvan Seyidov (Materialcharakterisierung) erfolgreich mit Auszeichnung ihre Promotionen innerhalb von GoNext abschließen. Hierbei ist zusätzlich zu erwähnen, dass die hervorragende Arbeit von nun Dr. Ta-Shun Chou mit dem DGKK Nachwuchswissenschaftlerpreis geehrt wurde (die Preisverleihung fand am 7. März 2024 im Rahmen der Deutschen Kristallzüchtertagung (DKT) in Erlangen statt).

¹ S. Bin Anooz, R. Grüneberg, T.S. Chou, A. Fiedler, K. Irmscher, C. Wouters, R. Schewski, M. Albrecht, Z. Galazka, W. Miller, J. Schwarzkopf, and A. Popp, "Impact of chamber pressure and Si-doping on the surface morphology and electrical properties of homoepitaxial (100) β-Ga₂O₃ thin films grown by MOVPE," *J Phys D Appl Phys* **54**, 034003 (2021).

² Z. Galazka, S. Ganschow, K. Irmscher, D. Klimm, M. Albrecht, R. Schewski, M. Pietsch, T. Schulz, A. Dittmar, A. Kwasniewski, R. Grueneberg, S. Bin Anooz, A. Popp, U. Juda, I.M. Hanke, T. Schroeder, and M. Bickermann, "Bulk single crystals of β-Ga₂O₃ and Ga-based spinels as ultra-wide bandgap transparent semiconducting oxides," *Prog. Cryst. Growth Charact. Mater.* **67**, 100511 (2021).

³ T.-S. Chou, P. Seyidov, S. Bin Anooz, R. Grüneberg, T. Thi Thuy Vi, K. Irmscher, M. Albrecht, Z. Galazka, J. Schwarzkopf, and A. Popp, "Fast homoepitaxial growth of (100) β-Ga₂O₃ thin films via MOVPE process," *AIP Adv* **11**, 115323 (2021).

⁴ T.-S. Chou, S. Bin Anooz, R. Grüneberg, K. Irmscher, N. Dropka, J. Rehm, T.T.V. Tran, W. Miller, P. Seyidov, M. Albrecht, and A. Popp, "Toward Precise n-Type Doping Control in MOVPE-Grown β-Ga₂O₃ Thin Films by Deep-Learning Approach," *Crystals (Basel)* **12**, 8 (2022).

⁵ Z. Galazka, S. Ganschow, P. Seyidov, K. Irmscher, M. Pietsch, T.-S. Chou, S. Bin Anooz, R. Grueneberg, A. Popp, A. Dittmar, A. Kwasniewski, M. Suendermann, D. Klimm, T. Straubinger, Thomas Schroeder, and M. Bickermann, "Two inch diameter, highly conducting bulk β-Ga₂O₃ single crystals grown by the Czochralski method," *Appl. Phys. Lett.* **120**, 152101 (2022).

⁶ T.-S. Chou, S. Bin Anooz, R. Grüneberg, N. Dropka, J. Rehm, T.T.V. Tran, K. Irmscher, P. Seyidov, W. Miller, Z. Galazka, M. Albrecht, and A. Popp, "Si Doping Mechanism in MOVPE-grown (100) β-Ga₂O₃ films," *Appl. Phys. Lett.* **121**, 032103 (2022).

⁷ M. Lee, T.-S. Chou, S. Bin Anooz, Z. Galazka, A. Popp, R.L. Peterson, S. Bin Anooz, Z. Galazka, A. Popp, and R.L. Peterson, "Exploiting the Nanostructural Anisotropy of β-Ga₂O₃ to Demonstrate Giant Improvement in Titanium/Gold Ohmic Contacts," *ACS Nano* **16**(8), 11988–11997 (2022).

- ⁸ T.-S. Chou, S. Bin Anooz, R. Grüneberg, D. Natascha, W. Miller, T.T.V. Tran, J. Rehm, and A. Popp, "Machine learning supported analysis of MOVPE grown β -Ga₂O₃ thin films on sapphire," *J Cryst Growth* **592**, 126737 (2022).
- ⁹ M. Lee, T.-S. Chou, S. Bin Anooz, Z. Galazka, A. Popp, and R.L. Peterson, "Effect of post-metallization anneal on (100) Ga₂O₃ / Ti – Au ohmic contact performance and interfacial degradation," *APL Mater* **10**, 091105 (2022).
- ¹⁰ P. Seyidov, J.B. Varley, Z. Galazka, T.-S. Chou, A. Popp, A. Fiedler, and K. Irmscher, "Cobalt as a promising dopant for producing semi-insulating β -Ga₂O₃ crystals : Charge state transition levels from experiment and theory," *APL Mater* **10**, 111109 (2022).
- ¹¹ J. Rehm, T.-S. Chou, S. Bin Anooz, A. Fiedler, Z. Galazka, and A. Popp, "Perspectives on MOVPE-grown (100) β -Ga₂O₃ thin films and its Al-alloy for power electronics application," *Appl. Phys. Lett.* **121**, 240503 (2022).
- ¹² T.-S. Chou, P. Seyidov, S. Bin Anooz, R. Grüneberg, J. Rehm, T.T.V. Tran, A. Fiedler, Z. Galazka, M. Albrecht, and A. Popp, "High-mobility 4 μ m MOVPE-grown (100) β -Ga₂O₃ thin film by parasitic particles suppression," *Jpn J Appl Phys* **62**, SF1004 (2023).
- ¹³ Z. Galazka, A. Fiedler, A. Popp, S. Ganschow, A. Kwasniewski, P. Seyidov, M. Pietsch, A. Dittmar, S. Bin Anooz, K. Irmscher, M. Suendermann, D. Klimm, T.-S. Chou, J. Rehm, T. Schroeder, and M. Bickermann, "Bulk single crystals and physical properties of β -(Al_xGa_{1-x})₂O₃ (x = 0 - 0.35) grown by the Czochralski method," *J. Appl. Phys.* **133**, 035702 (2023).
- ¹⁴ T.-S. Chou, P. Seyidov, S. Bin Anooz, R. Grüneberg, M. Pietsch, J. Rehm, T.T.V. Tran, K. Tetzner, Z. Galazka, M. Albrecht, K. Irmscher, A. Fiedler, and A. Popp, "Suppression of particle formation by gas-phase pre-reactions in (100) MOVPE-grown β -Ga₂O₃ films for vertical device application," *Appl. Phys. Lett.* **122**, 052102 (2023).
- ¹⁵ T.-S. Chou, S. Bin Anooz, R. Grüneberg, T.T.V. Tran, J. Rehm, Z. Galazka, and A. Popp, "Homoepitaxial growth rate measurement and surface morphology monitoring of MOVPE-grown Si-doped (100) β -Ga₂O₃ thin films using in-situ reflectance spectroscopy," *J Cryst Growth* **603**, 127003 (2023).
- ¹⁶ T.-S. Chou, J. Rehm, S. Bin Anooz, O. Ernst, A. Akhtar, Z. Galazka, W. Miller, M. Albrecht, P. Seyidov, A. Fiedler, and A. Popp, "Exploring Miscut Angle Influence on (100) β -Ga₂O₃ Homoepitaxial Films Growth : Comparing MOVPE Growth with MBE Approaches," *J. Appl. Phys.* **134**, 195301 (2023).
- ¹⁷ T.-S. Chou, A. Akhtar, S. Bin Anooz, J. Rehm, O. Ernst, P. Seyidov, A. Fiedler, W. Miller, Z. Galazka, T. Remmele, M. Albrecht, and A. Popp, "Influencing the morphological stability of MOVPE-grown β -Ga₂O₃ films by O₂/Ga ratio," *Appl Surf Sci* **660**, 159966 (2024).
- ¹⁸ T.-S. Chou, S. Bin Anooz, J. Rehm, A. Akhtar, D. Mukherjee, P. Petrik, and A. Popp, "In-situ spectral reflectance investigation of hetero-epitaxially grown β -Ga₂O₃ thin films on c-plane Al₂O₃ via MOVPE process," *Appl Surf Sci* **652**, 159370 (2024).
- ¹⁹ T.-S. Chou, T. Thuy, V. Tran, H. Peelaers, K. Tetzner, O. Hilt, J. Rehm, S. Bin Anooz, A. Fiedler, Z. Galazka, M. Albrecht, and A. Popp, "Out-diffusion and uphill-diffusion of Mg in Czochralski-grown (100) β -Ga₂O₃ under high-temperature annealing and its influence on lateral MOSFET devices," *Adv. Electron. Mater* **2400342**, (2024).

²⁰ T.-S. Chou, J. Rehm, A. Akhtar, S. Bin Anooz, O. Ernst, P. Seyidov, Z. Galazka, M. Albrecht, A. Fiedler, and A. Popp, "Impurity-induced Step Pinning and Recovery in MOVPE-grown (100) β -Ga₂O₃ Film: The Influence of O₂/Ga Ratio," Appl. Phys. Lett., (2025).

²¹ T.-S. Chou, S. Bin Anooz, Z. Galazka, M. Albrecht, A. Fiedler, and A. Popp, "Reflectance spectroscopy analysis of Si-doped β -Ga₂O₃ lms grown by MOVPE : The influence of doping concentration and substrate conductivity," accepted by J. Appl. Phys., (2025).

²² T.-S. Chou, S. Bin Anooz, N. Dropka, H.-H. Chen, Z. Galazka, M. Albrecht, A. Fiedler, and A. Popp, "Controlling the morphology transition on MOVPE-grown (100) β -Ga₂O₃ film between step-flow growth and step-bunching: A machine learning-assisted approach," submitted to APL Mater, (2025).

²³ P. Seyidov, J. B. Varley, Y. K. Frodason, D. Klimm, L. Vines, Z. Galazka, T.-S. Chou, A. Popp, K. Irmscher, A. Fiedler, "Thermal Stability of Schottky Contacts and Rearrangement of Defects in β -Ga₂O₃ Crystals" Adv. Electron. Mater. **11**, 2300428, (2025).

²⁴ P. Seyidov, J. B. Varley, J.-X. Shen, Z. Galazka, T.-S. Chou, A. Popp, M. Albrecht, K. Irmscher, A. Fiedler, "Charge state transition levels of Ni in β -Ga₂O₃ crystals from experiment and theory: An attractive candidate for compensation doping" J. Appl. Phys. **134**, 205701 (2023).

Des Weiteren wurden die Ergebnisse des Projekts auf zahlreichen nationalen sowie überwiegend internationalen Konferenzen präsentiert. Auf eine Auflistung der Konferenzteilnahmen wurde aus Platzgründen an dieser Stelle verzichtet.

Berlin den 18.03.2025

Projektleiter
Dr. Andreas Popp