

Technische Universität Ilmenau  
Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften  
Institut für Physik  
Fachgebiet Experimentalphysik I

# Modulationsspektroskopie an GaN und AlGaN/GaN-Heterostrukturen

Diplomarbeit  
Thomas Klein

Verantwortlicher Hochschullehrer:  
Prof. Dr. rer. nat. habil. G. Gobsch

Betreuer:  
Dr. rer. nat. R. Goldhahn

eingereicht am: 27.09.2006

verteidigt am:



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Eigenschaften von Nitridhalbleitern</b>	<b>8</b>
2.1	Kristallstruktur . . . . .	8
2.2	Bandstruktur und optische Eigenschaften von Nitridhalbleitern	10
2.2.1	Bandlücke und optische Auswahlregeln für Volumenhalbleiter . . . . .	10
2.2.2	Einfluss der Verspannung auf Exzitonenübergangsenergien . . . . .	17
2.3	Spontane und piezoelektrische Polarisierung . . . . .	20
2.4	Entstehung eines zweidimensionalen Elektronengases . . . . .	26
<b>3</b>	<b>Experimentelle Methoden</b>	<b>30</b>
3.1	Elektroreflexion . . . . .	30
3.1.1	Prinzip Elektroreflexion . . . . .	30
3.1.2	Auswertung Elektroreflexionsspektren . . . . .	32
3.1.3	Experimenteller Aufbau . . . . .	34
3.2	Photostrommessung . . . . .	34
3.2.1	Grundlagen Photostrommessung . . . . .	34
3.2.2	Experimenteller Aufbau . . . . .	36
3.3	Photoreflexion . . . . .	36
3.3.1	Prinzip der Photoreflexion . . . . .	36
3.3.2	Experimenteller Aufbau der Photoreflexion . . . . .	37
3.4	Reflektivitätsmessungen . . . . .	37
3.5	Spektralellipsometrie . . . . .	38
3.5.1	Prinzip der Ellipsometrie . . . . .	38
3.5.2	Experimenteller Aufbau . . . . .	40
3.6	Photolumineszenz . . . . .	41

## INHALTSVERZEICHNIS

3.6.1	Grundlagen der Photolumineszenz . . . . .	41
3.6.2	Auswertung der Photolumineszenz . . . . .	43
3.6.3	Experimenteller Aufbau . . . . .	44
<b>4</b>	<b>Probenstruktur</b>	<b>45</b>
<b>5</b>	<b>Untersuchungen an GaN</b>	<b>48</b>
5.1	Photoreflexion . . . . .	48
5.2	Photolumineszenz . . . . .	53
5.2.1	Ergebnisse für $T \leq 80$ K . . . . .	53
5.2.2	Ergebnisse für $T \geq 80$ K . . . . .	59
<b>6</b>	<b>Untersuchungen an den AlGaIn/GaN-Heterostrukturen</b>	<b>63</b>
6.1	Ellipsometrie . . . . .	63
6.2	Photostrom . . . . .	66
6.3	Elektroreflexion . . . . .	68
6.3.1	Elektroreflexion an der Deckschicht . . . . .	68
6.3.2	Feldstärkebestimmung aus den FKO . . . . .	71
6.3.3	Temperaturabhängigkeit der internen elektrischen Feldstärke . . . . .	78
6.3.4	Ermittlung der Polarisationsgradienten an der Grenz- fläche . . . . .	81
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>84</b>
<b>A</b>	<b>Fitresultate</b>	<b>87</b>
A.1	Photoreflexion . . . . .	87
A.2	Photolumineszenz . . . . .	89
	<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>91</b>
	<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>92</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>93</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>99</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

Die Erforschung der binären Halbleiter Aluminiumnitrid (AlN), Galliumnitrid (GaN) und Indiumnitrid (InN) als Basis der Gruppe III-Nitride und deren Verbindungen gehören zu einem wichtigen Forschungsgebiet der Halbleiterphysik. Durch die Unterschiede in den Bandlücken wird eine Abdeckung des Spektralbereiches vom Infraroten (InN: 0,68 eV) bis hin zum Ultravioletten (AlN: 6,2 eV) erzielt.

Der Anwendungsbereich wird von optoelektronischen Bauelementen, wie blau-grünen oder weißen Leuchtdioden (LEDs) [1–3] und Laserdioden (LDs) [4], dominiert. Blauviolette Laser werden im Markt der optischen, besonders bei den Segmenten Computerspeicher (HD-DVD, Blu-ray Disc) sowie der Speicherung von Videos oder Videospiele auf DVD und bei Minidisks, breite Anwendung finden. Neben dem Einsatz als Lichtemitter sind diese Materialsysteme auch als UV-Detektoren einsetzbar [5, 6].

Besonderes Interesse weist GaN mit seinen physikalischen Eigenschaften auf, die es für Transistoranwendungen prädestinieren. So bietet sich dieses Material zur Herstellung von AlGaN/GaN-Transistoren mit hoher Elektronenbeweglichkeit (HEMT) [7, 8] an, die bei hohen Temperaturen [9] und hohen Frequenzen [10] eingesetzt werden können. Des Weiteren erlaubt die außergewöhnlich hohe Durchbruchspannung des GaN ( $> 5$  MV/cm) bei HEMTs das Anlegen von hohen Spannungen für Hochleistungsanwendungen. Die Elektronenbeweglichkeit in einer AlGaN/GaN-Heterostruktur auf Saphir beträgt  $2000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  bei Raumtemperatur [11, 12], wohingegen im reinen GaN nur  $400 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  [13] erreicht werden.

Herkömmliche III-V-Halbleitern, wie GaAs oder InP, kristallisieren bevorzugt in der kubischen Zinkblendestruktur. Die thermodynamisch stabile

## *Kapitel 1. Einleitung*

Phase der Gruppe-III-Nitride ist die hexagonale Wurtzitstruktur. Diese weist die Besonderheit auf, dass sich bei Heterostrukturen starke innere pyroelektrische Felder einstellen, die die Bauelementeigenschaften wesentlich beeinflussen. Die in den Nitriden vorhandene spontane und piezoelektrische Polarisation spielt bei der Bildung des zweidimensionalen Elektronengases (2DEG) eine wichtige Rolle. An der AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub>-Grenzfläche bildet sich dieses Elektronengas ohne eine zusätzliche Dotierung aus und besitzt eine hohe Ladungsträgerdichte, ohne an ionisierten Störstellen gestreut zu werden. Diese AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub>-Strukturen reagieren sensibel auf ein elektrisches Oberflächenpotential und sind deswegen sehr gut für Sensoren verwendbar. Die chemische und thermische Beständigkeit der Nitride erlaubt, diese Anwendung für verschiedene aggressive Stoffe zu erweitern.

Die optimale Herstellung des Materials ist sehr schwierig, da es bis jetzt kaum entsprechenden Ga<sub>N</sub>-Substrate gibt, die ein homoepitaktisches Wachstum der Schichten ermöglichen würden. Da man also auf andere Substrate (Saphir, Siliziumkarbid, Silizium) ausweichen muss, nimmt man eine Fehlanpassung der Gitterkonstante und des thermischen Ausdehnungskoeffizienten zwischen dem Substrat und der epitaktischen Schicht in Kauf. Dies führt im Schichtsystem allerdings zu mechanischen Verspannungen und teilweise zu einer hohen Konzentration an ausgedehnten Defekten. Diese beim Wachstum eingebrachten Störstellen bilden elektrisch aktive Zentren, sogenannte Traps, welche die Eigenschaften der HEMTs beeinträchtigen.

Mit optisch-spektroskopischen Methoden ist es möglich, die Polarisation, Oberflächenladungen, die Verspannung und Defekte direkt oder mit Hilfe geeigneter Modelle zu untersuchen. Daher ist eine experimentelle Erforschung der optischen Eigenschaften notwendig, um einen Transistor mit optimaler Charakteristik herzustellen.

In Kapitel 2 werden die relevanten physikalischen Eigenschaften der Nitridhalbleiter und im Besonderen deren Kristallstruktur, welche zur Ausbildung einer Polarisation im Kristall führt [14], behandelt. Weiterhin wird die Bandstruktur von Ga<sub>N</sub> an der Bandkante betrachtet und die Aufspaltung der Bänder durch die Spin-Bahn-Kopplung und das Kristallfeld einbezogen. Die Erniedrigung der Bandlücke aufgrund von Exzitonübergängen wird ebenfalls diskutiert. Die Entstehung des 2DEGs durch die Polarisationsdiskontinuität an der Grenzfläche des Materialsystems wird erläutert.

Kapitel 3 beschreibt die angewandten optischen Untersuchungsmethoden so-

wohl prinzipiell als auch in ihrer konkreten experimentellen Realisierung. Weiterhin wird auf die Ansätze zur Auswertung der Elektroreflexions (ER)-Messung, der Photostrommessung, der kontaktlosen Photoreflexion (PR), der Reflektivitätsmessung, der Ellipsometrie und der Photolumineszenz (PL) an GaN/AlGa<sub>N</sub>/GaN-HEMT-Strukturen eingegangen.

Die Probenstrukturen werden in Kapitel 4 beschrieben und anschließend in Kapitel 5 die experimentellen Ergebnisse der GaN-Proben präsentiert und diskutiert. Es wird eine GaN-Schicht ohne Substrat zur temperaturabhängigen Bestimmung der verspannungsfreien Übergangsenergien mittels Photolumineszenz und Photoreflexion untersucht.

In Kapitel 6 werden die Ergebnisse von ER-Messungen an Heterostrukturen vorgestellt. Die Auswertung dieser Daten führt zur Bestimmung der Polarisationsgradienten und der Dichte des 2DEGs an der GaN/AlGa<sub>N</sub>/GaN-Grenzfläche für verschiedene Al-Gehalte. Dabei wird auch die Temperaturabhängigkeit des Polarisationsgradienten untersucht. Aus der Zusammenfassung und dem Ausblick ergeben sich weitere Aufgaben und Fragestellungen, die im Rahmen von Folgeexperimenten untersucht werden können.

Im Anhang sind die Ergebnisse der Ermittlung der Übergangsenergien der Exzitonen aus den PR- und PL-Messungen in tabellarischer Form dargestellt.

# Kapitel 2

## Eigenschaften von Nitridhalbleitern

### 2.1 Kristallstruktur

Die Kristallstruktur von Gruppe-III-Nitriden ist abhängig von den Wachstumsbedingungen und der Wahl des Substrates. Die sich daraus ergebenden Kristallisationsarten sind die kubische Zinkblendestruktur, die NaCl-Struktur und die hexagonale Wurtzitstruktur. Die hier untersuchten Halbleiter (HL) kristallisieren in der Wurtzitstruktur mit vier Atomen pro Elementarzelle und bilden kovalente Bindungen. Deren Kristallstruktur wird über die Länge der hexagonalen Kante  $a$ , die Höhe  $c$  des Prismas, das Gitterkonstantenverhältnis und über den internen Zellparameter  $u = b/c$  beschrieben, mit  $b$  als Bindungslänge in Richtung der  $c$ -Achse. (Abbildung 2.1) Demnach beträgt der Wert des idealen Zellparameters  $u = \frac{3}{8} = 0,375$  und das Verhältnis der Gitterkonstanten  $\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1,633$ . Aber es treten Abweichungen von der Struktur auf, wenn  $u$ ,  $\frac{c}{a}$  oder beide Parameter vom idealen Wert verschieden sind. Dies kann sehr oft bei Materialien mit Wurtzitstruktur beobachtet werden [16]. Es existiert eine starke Wechselwirkung zwischen diesen zwei Parametern, das heißt, wenn  $\frac{c}{a}$  steigt, sinkt  $u$ . Damit wird gewährleistet, dass die Abstände der vier Tetraederbindungen konstant bleiben, und folglich verschieben sich die Tetraederwinkel [17]. Das Verhältnis  $\frac{c}{a}$  korreliert auch mit den Elektronegativitäten wie folgt: Die Verbindungen mit den größten Unterschieden in den Elektronegativitäten zeigen die größten Abweichungen vom idealen  $\frac{c}{a}$ -Wert. Wurtzitstrukturen sind



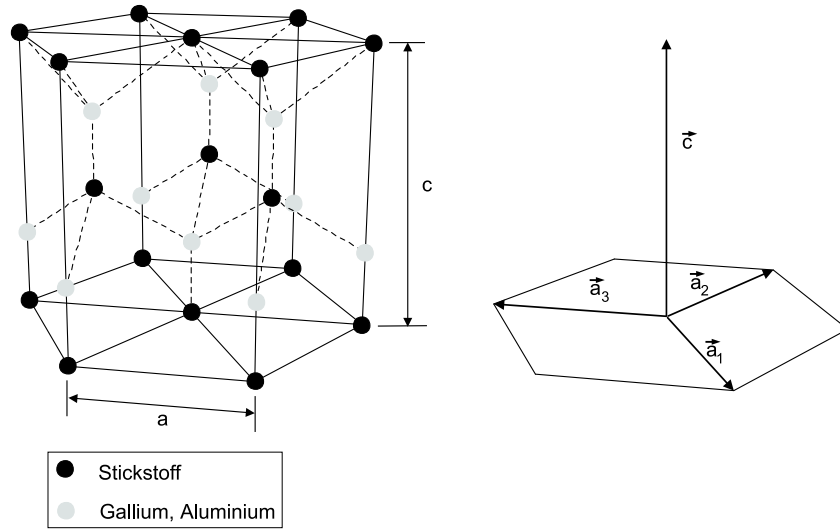


Abbildung 2.1: Links: Einheitszelle der Wurtzitstruktur.  
 Rechts: Orientierung der Gittervektoren  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$ ,  $\vec{a}_3$  und  $\vec{c}$ . [15]

stabil, wenn dieses Verhältnis kleiner als der ideale Wert ist, ansonsten ist die Zinkblendestruktur die stabilere Kristallform. Das  $\frac{c}{a}$ -Verhältnis beträgt 1,606 und der zellinterne Parameter  $u = 0,3819$  für GaN bzw.  $\frac{c}{a} = 1,626$  und  $u = 0,3772$  für AlN [8, 18].

Diese  $\frac{c}{a}$ -Verhältnisse sind kleiner als die theoretischen Werte für einen idealen Kristall und damit kristallisieren GaN und AlN in der Wurtzitstruktur. Diese entsteht, wenn man zwei hcp-Gitter (hexagonal dichteste Kugelpackung), das eine aus Stickstoff und das andere aus Gallium oder Aluminium, gegeneinander verschiebt (Abbildung 2.1). Dabei wird die Elementarzelle der Wurtzitstruktur über die drei Gittervektoren  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  und  $\vec{c}$  beschrieben. Oft sieht man Nomenklaturen der Kristallorientierung mit vier Zahlen, um die Symmetrieeigenschaften der Struktur besser hervorzuheben. Dabei ergeben sich diese aus  $(a_1|a_2) - (a_1 + a_2)|c$ . Legierungen aus den zwei binären Halbleitern AlN und GaN ergeben den ternären Halbleiter AlGaN. Mit Hilfe des Vegardschen Gesetzes [19]

$$a_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}(x) = x \cdot a_{\text{AlN}} + (1 - x)a_{\text{GaN}}, \quad (2.1)$$

$$c_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}(x) = x \cdot c_{\text{AlN}} + (1 - x)c_{\text{GaN}} \quad (2.2)$$

kann man die Gitterkonstanten abhängig vom Al-Gehalt für eine AlGaN-Probe linear interpolieren. Für das  $\frac{c}{a}$ -Verhältnis und  $u$  gilt dieser lineare Zusammenhang nicht mehr und diese werden mit einer quadratischen Funk-

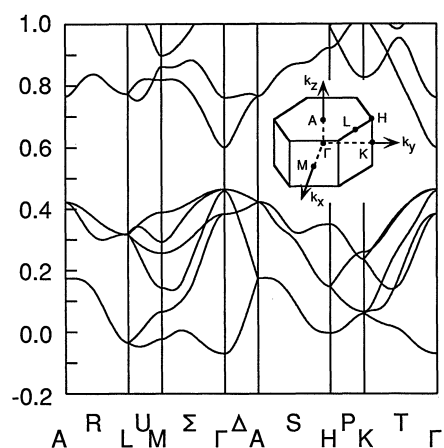


Abbildung 2.2: elektronische Bandstruktur von wurtzitem GaN

tion berechnet. Es wird der Bowing-Parameter  $b_u = 0,0032$  eingeführt, und  $u(x)$  ergibt sich zu:

$$u_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}(x) = x \cdot u_{\text{AlN}} + (1 - x) \cdot u_{\text{GaN}} - b_u x(1 - x). \quad (2.3)$$

Diese Nichtlinearität ist auf die unterschiedliche Reaktion der binären Verbindungen auf hydrostatischen Druck, Volumendeformation durch unterschiedliche Gitterkonstanten im Mischkristall im Vergleich zu den binären Verbindungen, interne Spannungseffekte durch variierende Kationen-Anionen-Bindungslängen sowie Fehlordnungseffekte durch die zufällige Verteilung der Metallatome auf den Kationenplätzen im Gitter zurückzuführen [20].

## 2.2 Bandstruktur und optische Eigenschaften von Nitridhalbleitern

### 2.2.1 Bandlücke und optische Auswahlregeln für Volumenhalbleiter

Bei der Bandstruktur von Wurtzithalbleitern liegen das Leitungsbandminimum und das Valenzbandmaximum am  $\Gamma$ -Punkt der Brillouinzone. Damit handelt es sich um einen direkten Halbleiter (vergleiche Abbildung 2.2). Das Leitungsband (LB) ( $\Gamma_1$ ) ist isotrop, wohingegen das Valenzband (VB) ( $\Gamma_{15}$ ) unter Vernachlässigung der Kristallfeld- und der Spin-Bahn-Wechselwirkung dreifach entartet ist.

## 2.2. Bandstruktur und optische Eigenschaften von Nitridhalbleitern

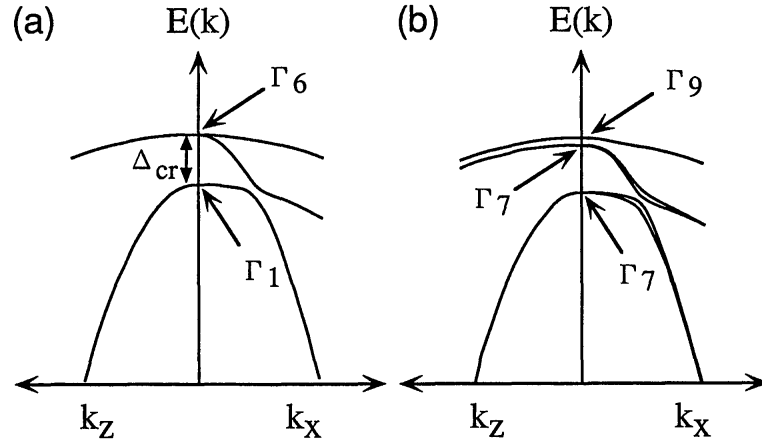


Abbildung 2.3: Schematische Bandstruktur nahe des  $\Gamma$ -Punktes von GaN (a) mit Kristallfeldaufspaltung und (b) mit zusätzlicher Spin-Bahn-Wechselwirkung [21]

Bei der Wurtzitstruktur erniedrigt sich die Symmetrie, weil die Kristallstruktur in  $z$ -Richtung nicht mehr identisch zu der in  $x, y$ -Richtung ist. Im idealen hexagonalen Kristall sind alle Bindungslängen zu den nächsten Nachbarn identisch, jedoch zu den übernächsten in Richtung der  $c$ -Achse ca. 13% kürzer [8]. Diese Abweichungen beschreibt man mit Hilfe der Kristallfeldaufspaltung  $\Delta_{cr}$ , welche die Entartung des Valenzbandes aufhebt. Es entstehen die zwei  $\Gamma_6$ -Bänder und das  $\Gamma_1$ -Band, welche  $x$  und  $y$  bzw.  $z$  repräsentieren (vergleiche Abbildung 2.3 a)). Die Energielagen der Aufspaltung hängen von der Materialart und linear von dem Verhältnis der Gitterkonstanten  $\frac{c}{a}$  ab. Es ist zu beachten, dass  $\Delta_{cr}$  positiv ist, wenn  $\Gamma_6$  energetisch über  $\Gamma_1$  liegt und negativ im anderen Fall.

Mit zusätzlicher Spin-Bahn-Wechselwirkung  $\Delta_{so}$  (vergleiche Abbildung 2.3 b)) spaltet das entartete  $\Gamma_6$ -Valenzband in die Zustände  $\Gamma_9$  und  $\Gamma_7$  auf und  $\Gamma_1$  ändert seine Symmetrieeigenschaften zu  $\Gamma_7$  [22]. Gleichzeitig nimmt das Leitungsband die  $\Gamma_7$ -Symmetrie an. Dabei ist  $\Delta_{cr}$  stets größer als  $\Delta_{so}$  für GaN und beide sind relativ klein (einige meV).

In Abbildung 2.4 ist ein schrittweises Schema für die Aufspaltung der zunächst entarteten Valenzbänder dargestellt. Von links zur Mitte betrachtet man zunächst die Kristallfeldaufspaltung  $\Delta_{cr}$  und anschließend die Spin-Bahn-Wechselwirkung  $\Delta_{so}$ , wohingegen von rechts zur Mitte die Effekte in umgekehrter Reihenfolge dargestellt sind. Das  $\Gamma_8$ - und  $\Gamma_7$ -Band, im Fall der Spin-Bahn-Wechselwirkung, repräsentiert den Gesamtdrehimpuls  $J = 3/2$

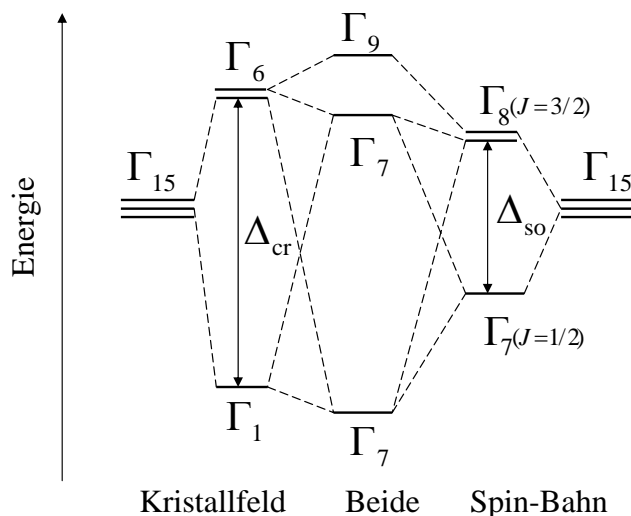


Abbildung 2.4: Energieaufspaltung an der Oberkante des Valenzbandes bei Wurtzithalbleitern am  $\Gamma$ -Punkt durch Einfluss des Kristallfeldes  $\Delta_{\text{cr}}$  und der Spin-Bahn-Wechselwirkung  $\Delta_{\text{so}}$

bzw.  $1/2$ , welcher sich additiv aus Drehimpuls und Spin zusammensetzt (vergleiche Abbildung 2.4 rechts). Optische Übergänge aus den drei nicht entarteten Valenzbändern ( $\Gamma_9^V$ ,  $\Gamma_{7+}^V$ ,  $\Gamma_{7-}^V$ ) in das  $\Gamma_7^C$ -Leitungsband werden von der kleinsten Energie beginnend als A-, B-, und C-Übergänge bezeichnet. Die Aufspaltung des VB kann man analytisch mit einer  $(6 \times 6)$  Hamilton-Matrix am  $\Gamma$ -Punkt berechnen. Mit der quasi-kubischen Näherung ( $\Delta_{\text{so}}=3\Delta_2=3\Delta_3$  und  $\Delta_{\text{cr}} = \Delta_1$ ) [23] folgen für die Absolutlagen der aufgespalteten Valenzbänder, bezogen auf die homoepitaktische Bandlückenenergie (für GaN bei  $T=5$  K  $E_g=3,477$  eV ), die Beziehungen:

$$\Gamma_9^V = \Delta_{\text{cr}} + \frac{\Delta_{\text{so}}}{3} \quad (2.4)$$

$$\Gamma_{7-}^V = \frac{\Delta_{\text{cr}} - \frac{\Delta_{\text{so}}}{3}}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\Delta_{\text{cr}} - \frac{\Delta_{\text{so}}}{3}}{2}\right)^2 + 2\left(\frac{\Delta_{\text{so}}}{3}\right)^2} \quad (2.5)$$

$$\Gamma_{7+}^V = \frac{\Delta_{\text{cr}} - \frac{\Delta_{\text{so}}}{3}}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\Delta_{\text{cr}} - \frac{\Delta_{\text{so}}}{3}}{2}\right)^2 + 2\left(\frac{\Delta_{\text{so}}}{3}\right)^2}. \quad (2.6)$$

Für die Relativlagen der Valenzbandenergien ergibt sich die Gleichung

$$\Gamma_9^V - \Gamma_{7\mp}^V = \frac{\Delta_{\text{so}} + \Delta_{\text{cr}}}{2} \mp \frac{1}{2} \sqrt{(\Delta_{\text{so}} + \Delta_{\text{cr}})^2 - \frac{8}{3}\Delta_{\text{so}}\Delta_{\text{cr}}}. \quad (2.7)$$

Für GaN sind die Parameter  $\Delta_{\text{cr}} = 10$  meV und  $\Delta_{\text{so}} = 18$  meV [24] positiv und somit ist das oberste Valenzband stets das  $\Gamma_9^V$ .

## 2.2. Bandstruktur und optische Eigenschaften von Nitridhalbleitern

AlGa<sub>x</sub>N-Mischkristalle zeigen ein unterschiedliches Verhalten, da  $\Delta_{\text{cr}}$  mit steigendem Al-Gehalt negativ wird und somit ab einem Al-Anteil von  $x = 0,05$   $\Gamma_{7-}^V$  das oberste Valenzband ist (vergleiche Abbildung 2.5). Die Spin-Bahn-Wechselwirkung im Mischkristall kann man mittels linearer Interpolation zwischen AlN ( $\Delta_{\text{cr}} = -230 \text{ meV}$ ) und GaN nähern. Es wurden noch keine Daten für  $\Delta_{\text{cr}}$  in Abhängigkeit vom Al-Anteil veröffentlicht, somit ist diese Annahme zulässig. Für einen Al-Anteil von  $x = 0,3$  beträgt  $\Delta_{\text{cr}} = -56,4 \text{ meV}$  und somit erfährt der B-Übergang eine Verschiebung von  $51,5 \text{ meV}$  (nach Gleichung (2.7)) zu kleineren Energien im Vergleich zu dem A-Übergang. Abbildung 2.5 zeigt die relativen Energiepositionen der drei

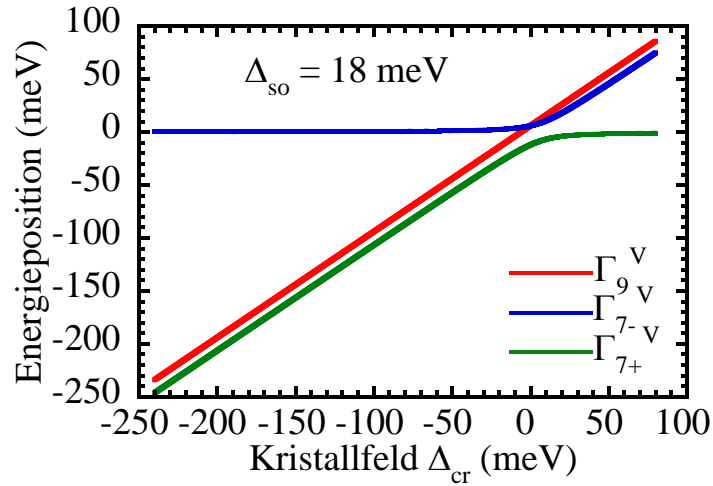


Abbildung 2.5: relative Valenzbandenergien am  $\Gamma$ -Punkt als Funktion von  $\Delta_{\text{cr}}$  mit  $\Delta_{\text{so}} = 18 \text{ meV}$

Valenzbänder als Funktion von  $\Delta_{\text{cr}}$  für  $\Delta_{\text{so}} = 18 \text{ meV}$  und stellt den Zusammenhang der wechselnden Reihenfolge der Valenzbänder von GaN und AlGa<sub>x</sub>N dar. Optische Übergänge vom  $\Gamma_9^V$ - in das  $\Gamma_7^C$ -Band (A-Übergang) sind nur erlaubt, wenn das Licht senkrecht zur  $c$ -Achse polarisiert ist. Während die Übergänge von  $\Gamma_{7+}^V$  und  $\Gamma_{7-}^V$  in das Leitungsband in beiden Polarisationsrichtungen zugelassen sind, ändert sich die Übergangswahrscheinlichkeit abhängig vom Polarisationszustand der elektromagnetischen Welle und von  $\Delta_{\text{cr}}$ . Abbildung 2.6 (a) zeigt die berechneten Oszillatorstärken der Übergänge für senkrecht zur  $c$ -Achse polarisiertes Licht. Man erkennt, dass für  $E \perp c$  alle drei Übergänge erlaubt sind und abhängig von der Kristallfeldenergie diese unterschiedlich stark zur Absorption beitragen. Für  $E \parallel c$  sind nur die

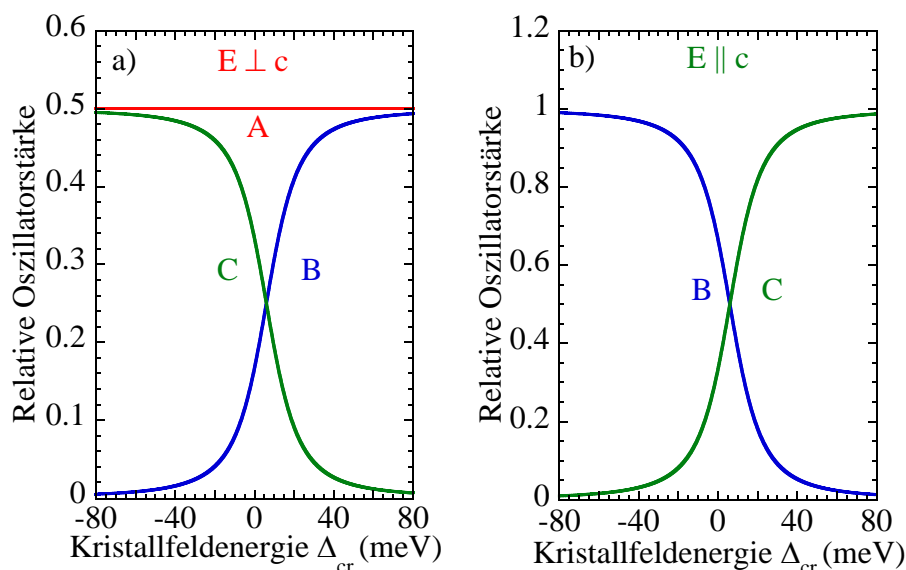


Abbildung 2.6: Berechnete relative Oszillatorstärken für A-, B- und C-Übergang als Funktion der Kristallfeldenergie für senkrechte (a) und parallele (b) Polarisation des Lichtes für  $\Delta_{so} = 18$  meV

Übergänge vom B- und C-VB in das LB erlaubt. Des Weiteren trägt C stärker als im senkrechten Polarisationszustand bei. Die berechnete Energieverschiebung aus Abbildung 2.5 und die Übergangswahrscheinlichkeit aus Abbildung 2.6 führen zu folgenden Schlussfolgerungen:

1. Bei positivem  $\Delta_{cr}$  erhöht sich die relative Valenzbandenergie des B-Übergangs geringer im Gegensatz zum A-Übergang. Die Valenzbandenergie des A-Übergangs verschiebt sich viel stärker zu kleineren Energien als der B-Übergang bei negativer Kristallfeldenergie.
2. Der relative Beitrag von A zur Absorption ist unabhängig von  $\Delta_{cr}$  und nur in der Konfiguration  $E \perp c$  erlaubt.
3. Bei negativem Kristallfeld sinkt die Übergangswahrscheinlichkeit vom B-Übergang rapide und man beobachtet einen wachsenden Beitrag durch C bei  $E \perp c$ .
4. Die kleinste Absorptionskante, die für ein negatives  $\Delta_{cr}$  beobachtet wird, erzeugt der B-Übergang. Dieser dominiert für  $E \parallel c$  und ist für  $E \perp c$  relativ schwach im Vergleich zu A und C.

## 2.2. Bandstruktur und optische Eigenschaften von Nitridhalbleitern

Die optischen Eigenschaften werden von Übergängen von den drei Valenzbändern in das Leitungsband bestimmt. Die Bandlücke wird definiert als der Abstand zwischen A- und Leitungsband, wenn  $\Delta_{cr}$  und  $\Delta_{so}$  positiv sind.

Bei AlGa<sub>x</sub>N-Mischkristallen errechnet sich die Energie der Bandlücke, abhängig vom Al-Gehalt  $x$ , mit einem quadratischen Ansatz

$$E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = (1 - x) \cdot E_g(\text{GaN}) + x \cdot E_g(\text{AlN}) - b \cdot x \cdot (1 - x). \quad (2.8)$$

Der Bowing Parameter  $b$  ist in der Literatur mit verschiedenen Werten zu finden, abhängig von der Wachstumsbedingungen und Qualitäten der Strukturen. Bei Berechnungen in dieser Arbeit wurde nach Buchheim et al. [25] ein Wert von  $b = 0,9 \text{ eV}$  benutzt. Die Bandlücke  $E_g$  ist eine Funktion der Temperatur. Diese Abhängigkeit wird über die empirische Beziehung

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (2.9)$$

von Varshni beschrieben, wobei  $E_g(0)$  die Bandlücke bei  $T=0 \text{ K}$  ist und  $\alpha$  und  $\beta$  materialspezifische Konstanten darstellen.

Für GaN gibt es Untersuchungen von Thonke et al. [26] mit folgendem Ergebnis:  $E_g(0) = 3,502 \text{ eV}$ ,  $\alpha = 0,79 \frac{\text{meV}}{\text{K}}$  und  $\beta = 1000 \text{ K}$ . Schließlich sind noch die Banddiskontinuitäten für Leitungs- und Valenzband zu beachten, welche bei Heteroübergängen eine wichtige Rolle spielen. Das Verhältnis der Banddiskontinuitäten von Leitungsband zu Valenzband ist für einen GaN/AlGa<sub>x</sub>N Heteroübergang 65:35 [27].

Betrachtet man einen Halbleiter mit vollständig gefülltem VB und leerem LB, dann wird dies als Grundzustand des HL bezeichnet. Durch eine optische Anregung, Absorption eines Photons, wird ein Elektron vom VB ins LB angehoben und erzeugt ein Loch im VB. Infolge der Coulombanziehung bewegen sich beide Teilchen gemeinsam durch den Kristall und bilden ein Exziton (Quasiteilchen aus Elektron und Loch). Ist die Übergangsenergie größer als die Bandlücke, spricht man vom Exzitonkontinuum. Unterhalb dieser charakteristischen Energie findet man zusätzlich diskrete Exzitonlinien (vergleiche Abbildung 2.7). Diese tragen maßgeblich zur Absorption und Reflexion bei. Die Exzitonen werden als A-, B-, und C-Exziton, herrührend von der Benennung der Bänder, bezeichnet. Die Übergangsenergien bei 1,6 K für A-, B- und C-Exziton betragen für unverspanntes GaN 3,477 eV, 3,4815 eV bzw. 3,498 eV [26].

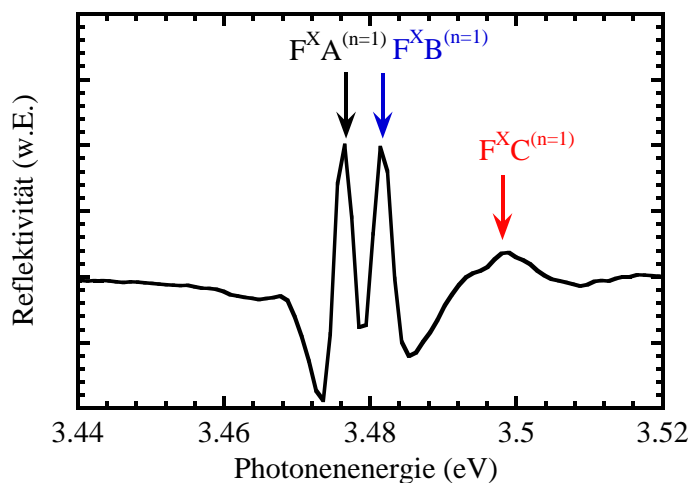


Abbildung 2.7: Reflektivitätsspektrum mit gekennzeichneten diskreten A-, B- und C-Exzitonen für die HVPE-Probe bei  $T = 80$  K

Das Elektron und das Loch wechselwirken über die Coulombkraft und können somit in Analogie zum Wasserstoffatom berechnet werden. Bei der Bestimmung der Energieeigenwerte geht man von der Annahme aus, dass die Coulomb-Wechselwirkung schwach ist, weil andere Valenzelektronen das Exziton abschirmen. Weiterhin werden die Blochwellenfunktionen der Elektronen durch s-Zustände vom Ga und N bestimmt, wohingegen die Löcher durch die 2p-Zustände von N beschrieben werden. Die Exzitonwellenfunktion ergibt sich damit als Linearkombination dieser zwei Wellenfunktionen. Elektronen und Löcher sind bezüglich ihrer Massenmittelpunkte lokalisiert und deshalb ist es zweckmäßiger, Wannier-Funktionen, Fouriertransformierte der Blochfunktionen, zu verwenden. Für die diskreten Energiewerte erhält man durch Lösen der Schrödingergleichung folgende Formel:

$$E_n = E_g + \frac{\hbar^2}{2M^*} \cdot K^2 - \frac{e^4 \mu^*}{2(4\pi\hbar\epsilon_0\epsilon_r)^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad \text{mit} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.10)$$

Die reduzierte effektive Masse  $\mu^*$  ist definiert als:

$$\frac{1}{\mu^*} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*}. \quad (2.11)$$

Der zweite Term in Gleichung (2.10) beschreibt die kinetische Energie der Exzitonen mit der Gesamtmasse  $M^* = m_e^* + m_h^*$ . Die Bindungsenergie  $E_b$



## 2.2. Bandstruktur und optische Eigenschaften von Nitridhalbleitern

des ruhenden Exzitons ( $K = 0$ ) wird nach Gleichung (2.10) berechnet, indem man  $n = 1$  setzt [28]:

$$E_b = \frac{e^4 \mu^*}{2(4\pi\hbar\epsilon_0\epsilon_r)^2} \approx 13,6 \text{ eV} \cdot \frac{\mu^*}{\epsilon_r^2}. \quad (2.12)$$

Exzitonen im Halbleiter haben zur Folge, dass Absorption schon bei der Bandlückenenergie  $E_g$ , verringert um den Betrag der Exzitonenbindungsenergie  $E_b$  (25 meV für GaN), auftritt. Man unterscheidet zwischen freien und an Störstellen gebundenen Exzitonen, welche nochmals um den Betrag der Bindungsenergie des Exzitons  $E_{BX}$  an die Störstelle verringert sind. Die an Störstellen gebundenen Exzitonen werden erst bei tiefen Temperaturen sichtbar (vergleiche Kapitel 5.2.1).

### 2.2.2 Einfluss der Verspannung auf Exzitonenübergangsenergien

Die exzitonenischen Übergangsenergien sind abhängig von der Verspannung des Materials und somit von Probe zu Probe unterschiedlich. Bei kompressiver Verspannung steigt die Energielücke in der Bandstruktur im Vergleich zu unverspanntem GaN an, wohingegen sich diese bei tensiler Verspannung verringert [29]. Des weiteren wurden Druckwellenexperimente in Kombination mit zeitaufgelösten optischen Absorptionsmessungen durchgeführt, um die Deformationspotentiale in GaN zu bestimmen. Damit kann eine theoretische Berechnung zum Verlauf der Energieverschiebung abhängig von der Verspannung durchgeführt werden. Abbildung 2.8 zeigt die experimentellen und theoretischen Übergangsenergien von A-, B- und C-Exziton, aufgetragen über der  $c$ -Achsen-Verspannung.

Aus der Bestimmung der Übergangsenergien der Exzitonen kann man die mechanische Verspannung in den jeweiligen Schichten bestimmen und damit direkt auf die piezoelektrische Polarisation schließen. Dies ist von praktischer Relevanz, da das Wachstum von AlGaIn/GaN-Heterostrukturen keine vollständig relaxierte Schichten erzeugt. Die unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten bzw. Gitterkonstanten der Nitridschichten im Vergleich zum Substrat führen zu einer biaxialen Verspannung in der Ebene. Diese biaxiale Verspannung  $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy}$  in der Basisebene wird durch eine Verformung  $\epsilon_{zz}$  in Richtung der  $c$ -Achse kompensiert. Die Verspannung in

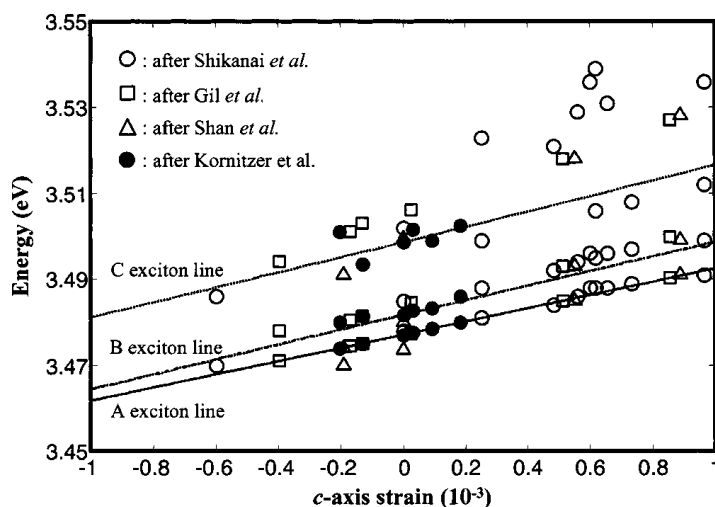


Abbildung 2.8: Vergleich der experimentell bestimmten Übergangsenergien (unterschiedliche Symbole) mit dem theoretischen Verlauf berechnet aus den Deformationspotentialen für GaN [30]

$c$ -Richtung ist gegeben durch

$$\epsilon_{zz} = \frac{c - c_0}{c_0}, \quad (2.13)$$

und für die isotrope Verspannung in der Basisebene gilt

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{a - a_0}{a_0}. \quad (2.14)$$

Für die Wurtzitstruktur ergibt sich folgende Beziehung für die Gitterkonstanten bzw. die Verspannungen:

$$\frac{c - c_0}{c_0} = -2 \frac{C_{13}}{C_{33}} \frac{a - a_0}{a_0}, \quad (2.15)$$

wobei  $C_{13} = 106$  GPa und  $C_{33} = 398$  GPa die elastischen Konstanten für GaN nach Polian et al. [31] sind. Dabei entsprechen  $a_0$  und  $c_0$ , bzw.  $a$  und  $c$  den Gitterkonstanten des relaxierten bzw. des verspannten Kristalls.

Die Verschiebung der Übergangsenergien und -wahrscheinlichkeiten (vergleiche Abbildung 2.5 und 2.6) entsteht durch eine zusätzliche Verspannung. Die Verspannung bewirkt eine Deformation der Einheitszelle, welche mit Hilfe der Kristallfeldenergie beschrieben wird. Die Änderung von  $\Delta_{\text{cr}}$  aufgrund der Verspannung errechnet sich nach [30,32] zu

$$\Delta_{\text{cr}} \rightarrow \Delta_{\text{cr}} + D_3 \cdot \epsilon_{zz} + D_4(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}). \quad (2.16)$$

## 2.2. Bandstruktur und optische Eigenschaften von Nitridhalbleitern

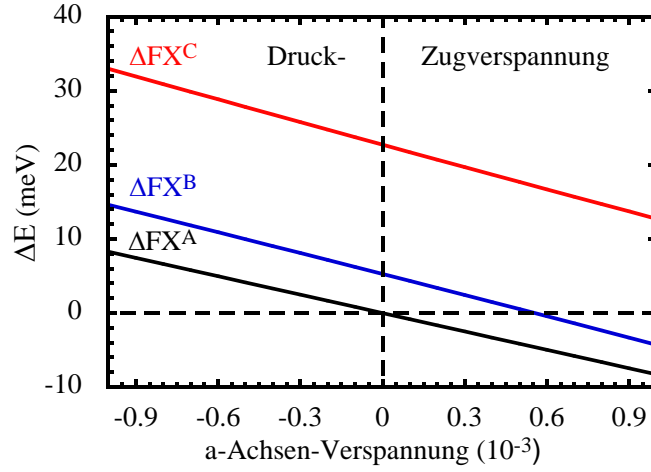


Abbildung 2.9: Relative Änderung der exzitonischen Übergangsenergien der drei freien Exzitonen abhängig von der biaxialen Verspannung in der Wachstumsebene aus Berechnung von Peng [30]

$D_i$  sind die Deformationspotentiale für das Valenzband in GaN, wobei speziell die Potentiale  $D_3 = 1,9 \text{ eV}$  und  $D_4 = -1 \text{ eV}$  [30] für die Bestimmung der Kristallfeldenergie von Bedeutung sind.

Somit kann man mit den Gleichungen (2.4)-(2.7) und (2.16) die Verschiebung der Exzitonienübergangsenergien abhängig von der jeweiligen Verspannung bestimmen. In der Arbeit von Shan et al. [29] wurden die Gitterkonstanten bei Raumtemperatur ermittelt und Reflexionsmessungen bei 10 K durchgeführt. Die Anpassung der experimentellen Ergebnisse mit Hilfe der Deformationspotentiale, welche aus den Gitterkonstanten bei Raumtemperatur bestimmt wurden, führt zu einer oberen Grenze in der Bestimmung der Parameter. In der Arbeit von Peng et al. [30] wurden die Deformationspotentiale direkt bei Raumtemperatur gemessen. Bei derselben Temperatur wurden die Absorptionskoeffizienten im belasteten und unbelasteten Zustand ermittelt und daraus konnte auf die Bandlückenverschiebung geschlossen werden. Die Messung bei derselben Temperatur und die direkte Ermittlung der Deformationspotentiale führt zu einer präziseren Bestimmung der Verschiebung der energetischen Lage der drei Exzitonienübergänge:

$$\begin{aligned} \Gamma_7^C - \Gamma_9^V &= E_g + (a_{cz} - D_1)\epsilon_{zz} + (a_{ct} - D_2)(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}) \\ &\quad - D_3\epsilon_{zz} - D_4(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}), \end{aligned} \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_7^C - \Gamma_{7\mp}^V &= E_g + \frac{\Delta_{so} + \Delta_{cr}}{2} + \left( a_{cz} - D_1 - \frac{D_3}{2} \right) \epsilon_{zz} \\ &\quad + \left( a_{ct} - D_2 - \frac{D_4}{2} \right) (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}) \\ &\quad \mp \sqrt{\left[ \frac{1}{2}\Delta_{cr} - 1/3\Delta_{so} + D_4(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}) \right]^2 + \frac{2}{9}\Delta_{so}^2}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

$E_g$  bezeichnet die Bandlücke für homoepitaktisches, verspannungsfreies Material und die Parameter  $a_{cz}$  und  $a_{ct}$  beschreiben die Deformationspotentiale des Leitungsbandes parallel bzw. senkrecht zur  $c$ -Achse. Die Werte für GaN betragen  $E_g = 3,447$  eV bei  $T = 295$  K,  $(a_{cz} - D_1) = -9,6$  eV,  $(a_{ct} - D_2) = -8,2$  eV. Damit kann man die Energieverschiebung mit Kenntnis der Verspannung bzw. der Gitterkonstanten bestimmen. In Abbildung 2.9 ist die relative Änderung der Exzitonenübergangsenergien abhängig von der Verspannung dargestellt. Für unverspanntes GaN [26,33] beträgt der Abstand des A- und B-Exzitons 5,3 meV und für A- und C-Exziton 22,7 meV.

## 2.3 Spontane und piezoelektrische Polarisation

Die Gruppe-III-Nitride sind pyroelektrische Materialien, das heißt sie besitzen eine spontane Polarisation ohne Vorhandensein eines äußeren elektrischen Feldes. In Verbindung mit dieser Eigenschaft ist die Piezoelektrizität der Nitridhalbleiter zu nennen. Heterostrukturen wachsen pseudomorph, das bedeutet, dünne Schichten nehmen die Gitterkonstante der darunterliegenden dicken Schicht an. Deshalb entsteht eine mechanische Verspannung in der Wachstumsebene und diese wiederum induziert eine verspannungsabhängige Polarisation. Diese Polarisationen führen zu einem Gradienten an der AlGaIn/GaN-Grenzfläche und zur Ausbildung des 2D-Elektronengases.

Die GaN-Wurtzitstruktur setzt sich aus Doppellagen von Ga und N zusammen. Abhängig davon, welches Element die obere Lage der Doppelschicht besetzt, entsteht die Polarität. In dieser Arbeit wurde mit Ga-polaren Proben experimentiert, das heißt, Ga befand sich in der Doppellage oben (siehe Abbildung 2.10). Da Gallium (1,6) und Aluminium (1,5) im Vergleich zu

### 2.3. Spontane und piezoelektrische Polarisation

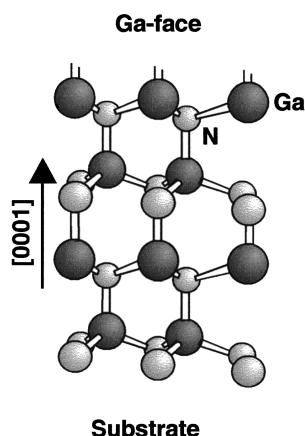


Abbildung 2.10: Atomlagen bei Ga-Polarität [14]

Stickstoff (3,0) kleinere Elektronegativitäten haben, entsteht in den Bindungen ein Dipolmoment. Die Abstände zwischen den nächsten Nachbarn sind nahezu gleich. Deswegen kompensieren sich die Dipolmomente hier zu Null. Die Bindungslängen zwischen den übernächsten Nachbarn in Richtung der  $c$ -Achse sind allerdings um 13 % kürzer als in der Ebene. Dadurch entsteht ein resultierender Polarisationsvektor in Richtung  $c$ -Achse vom jeweiligen Metall- zum Stickstoffatom.

Die Wurtzitstruktur besitzt zwei Arten von ersten Nachbarn (Metall-Stickstoff), deren die Bindungslängen gegeben sind durch:

$$M - N_{c1} = u \cdot c \quad (2.19)$$

entlang der  $c$ -Achse (eine Bindung)(vergleiche Abbildung 2.11) und

$$M - N_{b1} = \sqrt{\frac{1}{3}a^2 + \left(\frac{1}{2} - u\right)^2 \cdot c^2} \quad (2.20)$$

in der Ebene (drei Bindungen). Es gibt weiterhin drei Typen von übernächsten Nachbarn mit den Bindungslängen

$$M - N_{c2} = (1 - u) \cdot c \quad (2.21)$$

entlang der  $c$ -Achse (eine Bindung) sowie

$$M - N_{b2} = \sqrt{a^2 + (u \cdot c)^2} \quad (2.22)$$

(sechs Bindungen)

$$M - N_{b'2} = \sqrt{\frac{4}{3}a^2 + \left(\frac{1}{2} - u\right)^2 \cdot c^2} \quad (2.23)$$

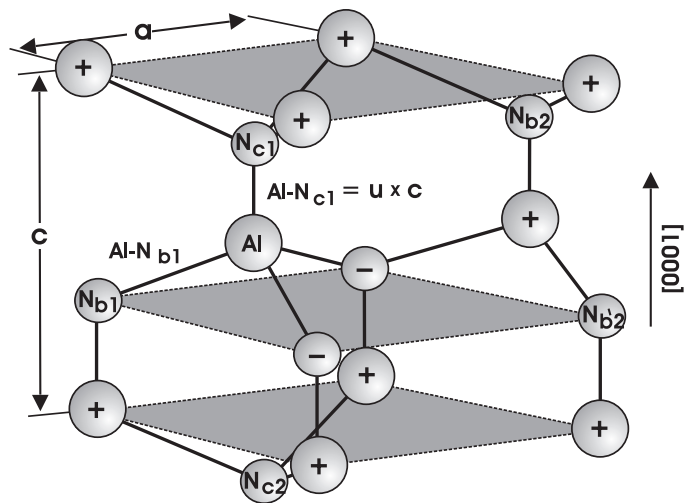


Abbildung 2.11: Schematische Darstellung eines wurzitierten AlN-Kristalls; Al ist das Zentralatom; positives Zeichen bedeutet Al-Atome und negatives N-Atome; der Index 1 kennzeichnet den nächsten und die 2 den übernächsten Nachbar vom Zentralatom aus [14]

(drei Bindungen) in der Basalebene [8].

Reale Kristalle besitzen eine Kristallstruktur mit einem größeren zellinternen Parameter  $u$  und somit ändern sich die Bindungslängen. Die spontane Polarisation ist sehr sensibel auf die Strukturparameter ( $a$ ,  $c$ ), das heißt AlN und GaN polarisieren unterschiedlich stark. In binären Nitridverbindungen hängt  $P_{SP}$  linear von der Versetzung der Anion- bzw. Kationgitter ab. Die Nichtidealität der Kristallstruktur wächst von GaN zu AlN. Dadurch steigt auch die spontane Polarisation von GaN ( $P_{SP} = -0,034 \frac{C}{m^2}$ ) zu AlN ( $P_{SP} = -0,09 \frac{C}{m^2}$ ) an, weil das Verhältnis  $c/a$  von GaN zu AlN sinkt. Untersuchungen von Bernardini et al. [20] ergaben, dass  $P_{SP}$  für relaxierte Mischkristalle mit festem  $x$ -Gehalt linear von  $u$  abhängt. Weiterhin wurde nachgewiesen, dass die Differenzen der spontanen Polarisation in AlGaN-Kristallen mit gleichem Al-Anteil größtenteils von Einflüssen der Struktur und variierenden Kation-Anion-Bindungslängen herrühren.

Jedoch ist der zellinterne Parameter eine nichtlineare Funktion vom Al-Gehalt und somit ändert sich  $P_{SP}$  nichtlinear mit der Mischkristallzusammensetzung. In Abbildung 2.12 wird die Nichtlinearität von  $u$  durch die Gleichung (2.3) beschrieben. Durch diese Nichtlinearität hängt auch  $P_{SP}$

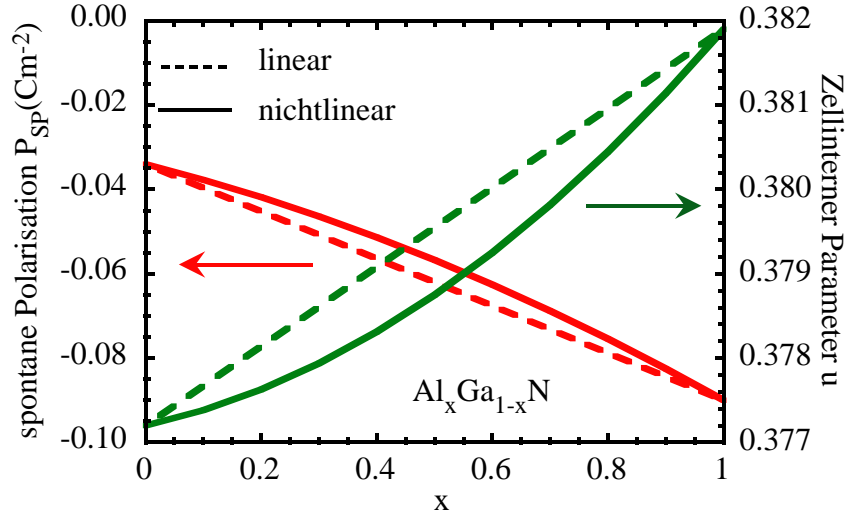


Abbildung 2.12: Spontane Polarisation  $P_{SP}$  und zellinterner Parameter  $u$  für  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ -Mischkristalle; Beschreibung der Nichtlinearität durch den Bowering-Parameter und Vergleich mit der linearen Approximation nach dem Vegardschen Gesetz

nichtlinear von  $x$  ab. Für AlGa<sub>N</sub> gilt [8]:

$$P_{SP, \text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} = (P_{SP, \text{AlN}}x + P_{SP, \text{GaN}}(1-x) + bx(1-x)) \frac{\text{C}}{\text{m}^2} \quad (2.24)$$

mit  $b=0,021$ . In Abbildung 2.12 ist der nichtlineare Verlauf von  $u$  bzw.  $P_{SP}$  dargestellt und mit der linearen Näherung verglichen.

Die Kenntnis der spontanen Polarisation ist nicht ausreichend, um die pyroelektrischen Eigenschaften von GaN- oder Heterostrukturen zu beschreiben. Diese Strukturen wachsen pseudomorph und verspannt auf dem Substrat oder der Pufferschicht. Eine Gitterfehlanpassung entsteht durch die unterschiedlichen Gitterkonstanten der binären Nitridverbindungen und deren Mischkristallen sowie durch die unterschiedlich großen thermischen Ausdehnungskoeffizienten. Die somit entstandene Gitterfehlanpassung ruft eine Verspannung im Kristall hervor. Dies bewirkt eine Verschiebung der Ionenrümpfe und der Ladungen, so dass sich ein elektrisches Polarisationsfeld aufbaut. Man spricht hier vom piezoelektrischen Effekt, der durch die spannungsinduzierte Polarisation

$$P_{PE} = e_{ij}\epsilon_k \quad (2.25)$$

mit  $e_{ij}$  als piezoelektrischen Tensor beschrieben wird. Der piezoelektrische Tensor besteht aus drei unabhängigen Komponenten, von denen nur zwei

## Kapitel 2. Eigenschaften von Nitridhalbleitern

( $e_{33}$  und  $e_{31}$ ) in die Berechnung der piezoelektrischen Polarisierung entlang der [0001]-Achse einfließen. Durch die Verknüpfung der Gleichungen (2.25) und (2.15) erhält man dann die gesamte piezoelektrische Polarisierung in  $c$ -Richtung:

$$P_{\text{PE}} = 2 \frac{a - a_0}{a_0} \left( e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right). \quad (2.26)$$

Der Ausdruck  $\left( e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right)$  ist für  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  unabhängig von der Al-Konzentration  $x$  stets negativ. Weiterhin gilt bei kompressiver Verspannung die Bedingung  $a < a_0$  und somit folgt für  $P_{\text{PE}}$  stets ein positives Vorzeichen. Das heißt, dass der Polarisationsvektor in positive  $z$ -Richtung zeigt. Für Zugverspannung gilt  $a > a_0$  und das daraus folgende negative Vorzeichen bedeutet dann, dass die piezoelektrische Polarisierung gegen die Wachstumsrichtung (in negative  $z$ -Richtung) zeigt.

Zu beachten ist, dass die Polarisierung nichtlinear mit der Verspannung von GaN zu AlN ansteigt. Für pseudomorph auf eine Pufferschicht gewachsene Nitridverbindungen berechnet sich die Verspannung nach

$$\epsilon = \frac{a_{\text{Puffer}} - a(x)}{a(x)}. \quad (2.27)$$

In erster Näherung kann man die piezoelektrischen und elastischen Konstanten, analog zu den Gitterkonstanten, für Mischkristalle nach dem Vegard'schen Gesetz linear zwischen den Binärverbindungen interpolieren. Nach Gleichung (2.26) hängt somit  $P_{\text{PE}}$  nichtlinear vom Al-Gehalt ab. Die piezoelektrische Polarisierung ergibt sich für eine auf einer unverspannten AlN- bzw. GaN-Puffer pseudomorph gewachsenen  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ -Schicht wie folgt:

$$P_{\text{PE,Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N/AlN}}(x) = (0,026(1-x) + 0,0248x(1-x)) \frac{\text{C}}{\text{m}^2}, \quad (2.28)$$

$$P_{\text{PE,Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N/GaN}}(x) = (-0,0525x + 0,0282x(1-x)) \frac{\text{C}}{\text{m}^2}. \quad (2.29)$$

Da bei den verwendeten Proben zuerst eine AlN- bzw. GaN-Nukleationsschicht von ca. 25 nm gewachsen wurde und anschließend eine 1  $\mu\text{m}$  dicke GaN-Pufferschicht, ist Gleichung (2.29) zur weiteren Berechnung zu verwenden. Die AlN-Nukleationsschicht hat durch die darüber befindliche dicke GaN-Schicht keine Auswirkung auf den Polarisationsgradient an der AlGaN/GaN-Grenzfläche. Die angegebenen Gleichungen gelten unter der Annahme, dass  $C_{ij}$  und  $e_{ij}$  für den jeweiligen Kristall konstant sind, und dass die piezoelektrische Polarisierung linear von der Verspannung abhängt.



### 2.3. Spontane und piezoelektrische Polarisation

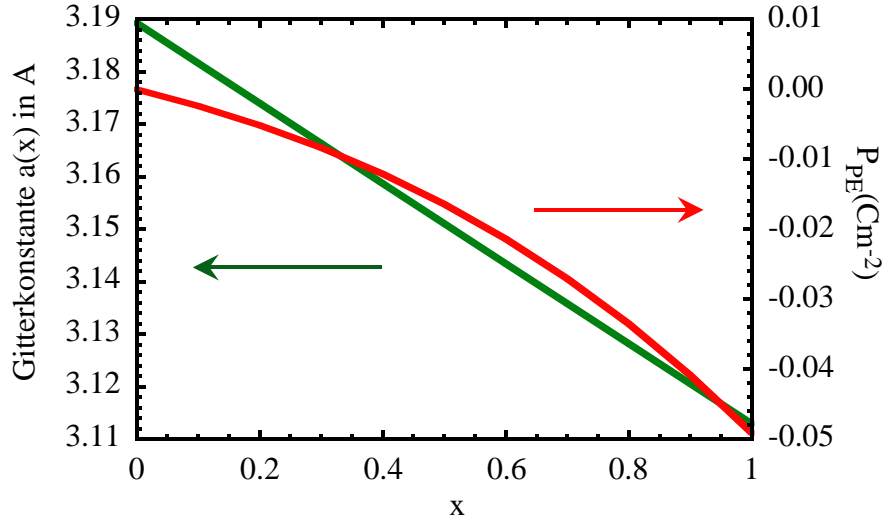


Abbildung 2.13: Piezoelektrische Polarisation  $P_{PE}$  und Gitterkonstante  $a$  für  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ -Mischkristalle

Falls jedoch starke Verspannungen auftreten, werden diese Beziehungen nichtlinear. Diese Nichtlinearität ist eine reine Volumeneigenschaft und dominiert gegenüber Effekten, wie Fehlordnungen oder alternierenden Bindungslängen [20]. Dadurch kann man  $P_{PE}$  für Mischkristalle linear aus der piezoelektrischen Polarisation der binären Verbindungen interpolieren:

$$P_{PE,\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} = xP_{PE,\text{AlN}}(\epsilon(x)) + (1-x)P_{PE,\text{GaN}}(\epsilon(x)). \quad (2.30)$$

Diese binären Nitridhalbleiter hängen jedoch nichtlinear von der Verspannung ab und es folgt für  $P_{PE}$  [8]:

$$P_{PE,\text{AlN}} = (-1,808\epsilon + 5,624\epsilon^2) \frac{\text{C}}{\text{m}^2} \quad (\text{druckverspannt}), \quad (2.31)$$

$$P_{PE,\text{AlN}} = (-1,808\epsilon - 7,888\epsilon^2) \frac{\text{C}}{\text{m}^2} \quad (\text{zugverspannt}), \quad (2.32)$$

$$P_{PE,\text{GaN}} = (-0,918\epsilon + 9,541\epsilon^2) \frac{\text{C}}{\text{m}^2} \quad (\text{druckverspannt}). \quad (2.33)$$

In Abbildung 2.13 sind die piezoelektrische Polarisation und die  $a$ -Gitterkonstante abhängig vom Al-Gehalt dargestellt.  $P_{PE}$  für  $\text{AlGaN}$ -Kristalle wurde nach Gleichung (2.30) linear aus der piezoelektrischen Polarisation der Binärkomponenten berechnet. Dabei wird die nichtlineare Abhängigkeit von  $P_{PE}$  von der Verspannung über die Gleichungen (2.31)-(2.33) berücksichtigt. Man erkennt, dass eine lineare Änderung der Gitterkonstante eine nichtlineare Änderung in der piezoelektrischen Polarisation

zur Folge hat, hervorgerufen durch die quadratische Abhängigkeit von der Verspannung.

Für zugverspannte AlGa<sub>x</sub>N/GaN-Heterostrukturen mit Ga-Polarität zeigen spontane und piezoelektrische Polarisation in Richtung des Substrates und für druckverspannte Proben sind diese antiparallel. Wenn diese zwei Polarisationsarten parallel sind, verstärken sie den Effekt, und wenn sie antiparallel sind, ist die Polarisation in der Probe geschwächt.

## 2.4 Entstehung eines zweidimensionalen Elektronengases

Das Verständnis der nichtlinearen Abhängigkeit der spontanen und piezoelektrischen Polarisation vom Al-Anteil und der Verspannung in der Heterostruktur ermöglicht eine Aussage zur Entstehung der polarisationsinduzierten Ladungen an Grenzflächen in der Probe. Die Gesamtpolarisation  $P$  setzt sich additiv aus spontaner  $P_{\text{SP}}$  und piezoelektrischer Polarisation  $P_{\text{PE}}$  zusammen:

$$P = P_{\text{SP}} + P_{\text{PE}}. \quad (2.34)$$

Da die Werte für die piezoelektrische und die spontane Polarisation von GaN zu AlN zunehmen, ist die gesamte Polarisation im AlGa<sub>x</sub>N größer als im GaN-Puffer. An der AlGa<sub>x</sub>N/GaN-Grenzfläche ändert sich somit  $P$  zwischen den zwei Materialien abrupt. Dadurch entsteht eine 2D-Polarisationsladungsdichte  $\rho_P$  im Bereich von  $10^{-2} \text{ C/m}^2$  an der Grenzfläche, welche mit der Polarisation über

$$\nabla P = -\rho_P \quad (2.35)$$

verknüpft wird. Im speziellen Fall von einer AlGa<sub>x</sub>N/GaN-Grenzfläche bewirkt der Polarisationsgradient eine 2D-Flächenladungsdichte  $\sigma_P$ , die sich aus der Differenz der Polarisation von oberer und unterer Schicht berechnen lässt:

$$\sigma_P = P(\text{oben}) - P(\text{unten}). \quad (2.36)$$

Wenn die polarisationsinduzierte Ladungsdichte  $\sigma_P$  positiv ist, haben freie Elektronen die Tendenz, diese Ladung zu kompensieren, und es kommt zur Ansammlung von freien Elektronen an der Grenzfläche. Für eine zugverspannte ( $\epsilon > 0$ ) Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>N-Schicht auf unverspanntem GaN berechnet sich

## 2.4. Entstehung eines zweidimensionalen Elektronengases

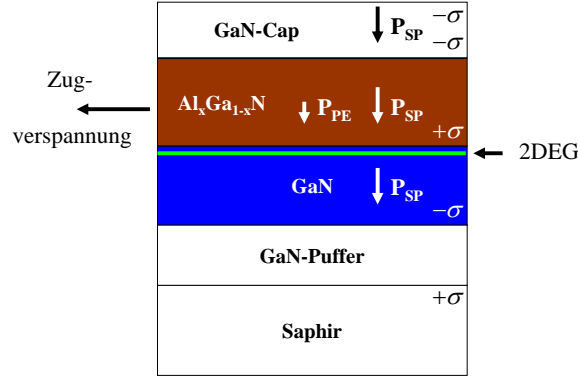


Abbildung 2.14: Spontane und piezoelektrische Polarisation in einer AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub>-Heterostruktur mit Ga-Polarität. Das 2DEG liegt an der AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub>-Grenzfläche im Ga<sub>N</sub> [34].

die Polarisationsladungsdichte nach:

$$\begin{aligned}
 \frac{\sigma_{GF}}{e} &= - \frac{[[P_{SP}(Al_{0,3}Ga_{0,7}N) + P_{PE}(Al_{0,3}Ga_{0,7}N)] - [P_{SP}(GaN) + P_{PE}(GaN)]] \frac{C}{m^2}}{e} \\
 &= - \frac{[[-0,04669 - 0,00403] - [-0,034 + 0]] \frac{C}{m^2}}{e} \\
 &= 1,044 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-2}.
 \end{aligned} \tag{2.37}$$

In Abbildung 2.14 ist die Probenstruktur mit den entsprechenden Polarisierungen eingezeichnet. In der relaxierten Ga<sub>N</sub>-Pufferschicht zeigt  $P_{SP}$  zum Substrat hin. Darauf folgt schließlich eine verspannte AlGa<sub>N</sub>-Schicht, in der sich die gesamte Polarisation aus der Summe  $P = P_{SP} + P_{PE}$  ergibt. Die abschließende Ga<sub>N</sub>-Deckschicht weist auch eine spontane Polarisation in Richtung des Substrates auf.

Ein Vorteil ist, dass keine künstliche Dotierung notwendig ist, um die 2DEG-Elektronen bereitzustellen. Diese stammen nach Ibbetson et al. [35] und Jogai [36] von ionisierten Oberflächendonatoren. Dabei wird davon ausgegangen, dass die AlGa<sub>N</sub>-Barriere undotiert, die Bänder ungekrümmt sind und sich die Donatorzustände unterhalb der Leitungsbandkante befinden. Durch die ionisierten Donatoren wird die Ladungsneutralität in der Probe gewährleistet. Im Gleichgewichtszustand ist das Ferminiveau an der Oberfläche unterhalb der Donatorzustände. Ionisierte Donatoren, oberhalb der Fermienergie, stellen Elektronen bereit, die zum 2DEG beitragen und die positive polarisationsinduzierte Flächenladungsdichte an der Heterogrenzfläche abschirmen. Durch eine hinreichende Dicke der AlGa<sub>N</sub>-Schicht erhöht sich die Bandverkrümmung, hervorgerufen durch die Polarisation. Ab dieser Dicke

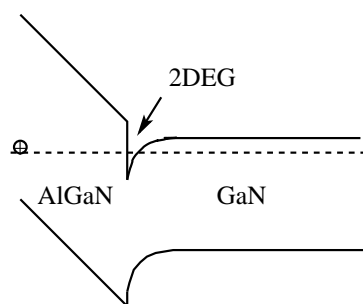


Abbildung 2.15: Bänderschema für eine AlGaN/GaN-Heterostruktur mit Oberflächenendonatormodell zur Ausbildung des 2DEG

liegen die Oberflächenendonatorzustände oberhalb der Fermienergie und werden ionisiert (vergleiche Abbildung 2.15). Die 2DEG-Dichte für pseudomorph gewachsene Proben, mit AlGaN-Dicken größer als 15 nm und einem Al-Anteil von mehr als 6%, kann man näherungsweise mit der Gleichung

$$n_S(x) = [-0,169 + 2,61 \cdot x + 4,5 \cdot x^2] \cdot 10^{13} \text{cm}^{-2} \quad (2.38)$$

berechnen. Eine detaillierte Berechnung ist in Refs. 8 und 14 genauer vorgestellt. Für eine Probe mit  $x = 20,1\%$  und einer Schichtdicke von  $d_{\text{AlGaN}} = 30 \text{ nm}$  ergibt sich eine Elektronenkonzentration an der Grenzfläche von  $5,4 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$ . Eigene Untersuchungen für diese Zusammensetzung werden in Kapitel 6.3.2 vorgestellt.

Diese Approximation wurde für Proben ohne Deckschicht durchgeführt, jedoch hat eine 2 nm-Schicht einen Einfluss auf die 2DEG-Dichte. In Abbildung 2.16 oben ist das Valenz- und Leitungsband mit Deck-Schicht dargestellt. Das Oberflächenpotential bleibt unabhängig von der Deckschichtdicke konstant, weil die Fermienergie durch die Oberflächenzustände festgehalten wird [37, 38]. Eine Erhöhung der Dicke hat zur Folge, dass der Bandkantenverlauf flacher ist. Die Lage der Leitungsbandkante in Bezug auf das Fermienergielevel ist im Bereich des Kanals durch die 2DEG-Konzentration festgelegt. Durch das Flacherwerden des Bandkantenverlaufs in der Barriere mit steigender GaN-Deckschichtdicke verringert sich zwangsläufig die Feldstärke in der AlGaN-Barriere. Die 2DEG-Dichte fällt mit steigender Deckschichtdicke ab, weil weniger Oberflächenzustände oberhalb der Fermienergie liegen und nicht ionisiert werden können. Dadurch werden einige Donatoren unter die Fermienergie gedrückt und können keine Elektronen für die AlGaN/GaN-Grenzfläche bereitstellen, somit sinkt die 2DEG-Dichte

## 2.4. Entstehung eines zweidimensionalen Elektronengases

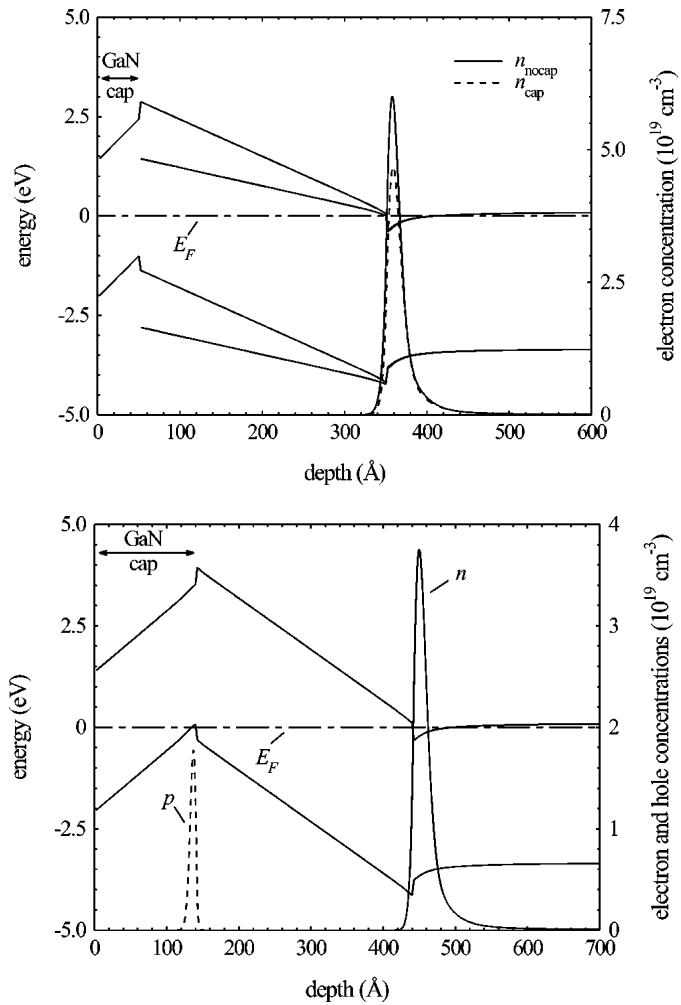


Abbildung 2.16: Oben: berechnetes Bänderschema und Elektronenkonzentration für eine AlGaIn/GaN-Heterostruktur mit GaN-Deckschicht und 2DEG; unten: Darstellung des Bandverlaufes mit Deckschicht, welche zur Ausbildung eines 2D-Löchergases führt [36]

mit steigender Deckschichtdicke. Erreicht die Deckschicht einen bestimmten Grenzwert (ca. 12 nm mit  $x=30\%$ ) steigt das Valenzband über die Fermienergie und es kommt zur Ausbildung eines 2D-Löchergases (siehe Abbildung 2.16 unten).

# Kapitel 3

## Experimentelle Methoden

Die Charakterisierung der GaN/AlGaIn/GaN-HEMT-Strukturen geschieht mittels optischer Spektroskopie. Dieses Kapitel dient zur Beschreibung der theoretischen Grundlagen und der experimentellen Umsetzung der Messmethoden. Im ersten Teil dieses Abschnittes wird die Elektreflexion behandelt und die Analyse der Franz-Keldysh-Oszillationen (FKO) beschrieben. In Kapitel 3.3 wird die Photoreflexion nur kurz erläutert, da sie der ER sehr verwandt sind. Folgend geht es um die Bestimmung der Reflektivität. Unter 3.5 wird die Spektralellipsometrie erläutert, welche zur kontaktfreien Bestimmung der Schichtdicken der Probenstruktur dient. Die Photolumineszenz wird im letzten Kapitel 3.6 dieses Abschnittes näher beschrieben.

### 3.1 Elektreflexion

#### 3.1.1 Prinzip Elektreflexion

Die Spektren der dielektrischen Funktion (DF) oberhalb der Bandlücke sind relativ breit und somit sind die kritischen Punkte der Bandstruktur (van-Hove-Singularitäten) kaum eindeutig zu identifizieren. Deswegen ist es vorteilhafter, die Ableitung der DF zu messen, um den breiten Untergrund, der durch Band-zu-Band-Übergänge entsteht, zu eliminieren. Die Modulationspektroskopie untersucht Interband-Übergänge durch Anlegen einer periodischen Störung. Ein Verfahren zur Bestimmung der kritischen Punkte stellt die Elektreflexion dar, welche durch Seraphin und Hess zuerst beschrieben wurde [39]. Bei dieser Modulationstechnik untersucht man den Einfluss eines äußeren, elektrischen Feldes auf die Probeneigenschaften. Diese Störung

wird durch das Anlegen einer Wechselspannung  $U_{AC}$ , welche zusätzlich von einer Gleichspannung  $U_{DC}$  überlagert werden kann, erzeugt. Damit ändern sich die optischen Eigenschaften im Halbleiter, welche über die dielektrische Funktion beschrieben werden. Die DF ist definiert als

$$\bar{\varepsilon} = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2. \quad (3.1)$$

Sie ist über die Beziehung

$$\bar{n} = n + i\kappa = \sqrt{\bar{\varepsilon}} \quad (3.2)$$

mit dem Real- und Imaginärteil ( $n$  und  $\kappa$ ) des komplexen Brechungsindex  $\bar{n}$  verknüpft. Damit ergeben sich für den Real- und Imaginärteil der dielektrischen Funktion folgende Gleichungen:

$$\varepsilon_1 = n^2 - \kappa^2, \quad (3.3)$$

$$\varepsilon_2 = 2 \cdot n \cdot \kappa. \quad (3.4)$$

Das ER-Signal setzt sich aus der Reflektivitätsänderung  $\Delta R$ , welche durch das modulierte, elektrische Feld bewirkt wird, und aus der Reflektivität  $R$  bei  $U = U_{DC}$  zusammen.  $\Delta R$  ergibt sich aus der Differenz der Reflektivitäten bei den zwei Feldstärken, die über die angelegten Spannungen  $U_{DC} + 0.5U_{AC}$  und  $U_{DC} - 0.5U_{AC}$  eingestellt werden können. Die Spannungsamplitude der Rechteckfunktion, die zur Modulation dient, bestimmt entscheidend die Intensität des Signals. Die Reflektivität kann bei senkrechtem Einfall über

$$R = \frac{(n-1)^2 + \kappa}{(n+1)^2 + \kappa} \quad (3.5)$$

bestimmt werden. Für das Messsignal folgt bei einer Rechteckmodulation die Beziehung

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{R(E, F_2) - R(E, F_1)}{\frac{1}{2}[R(E, F_2) + R(E, F_1)]} = \alpha_S(\varepsilon_1, \varepsilon_2)\Delta\varepsilon_1 + \beta_S(\varepsilon_1, \varepsilon_2)\Delta\varepsilon_2. \quad (3.6)$$

Die Koeffizienten  $\alpha_S$  und  $\beta_S$  werden als Seraphin-Koeffizienten [40, 41] bezeichnet. Sie geben an, wie stark der Real- bzw. Imaginärteil zum ER-Signal beiträgt, und sind abhängig von der Photonenenergie des einfallenden Lichtes sowie von den optischen Konstanten der angrenzenden Medien. Die ER ist eine hochempfindliche Methode zur Bestimmung der kritischen Punkte der Bandstruktur, weil das ER-Signal proportional zur dritten Ableitung der DF

aus entsprechenden Ellipsometriemessungen ist. Der Einfluss eines starken elektrischen Feldes auf den Absorptionskoeffizienten eines Halbleiter wird als Franz-Keldysh Effekt bezeichnet. Durch die Anwesenheit des äußeren elektrischen Feldes erfahren die nichtlokalisierten, freien Elektronen im HL eine Störung, was sich auf die Wellenfunktion  $\Psi$  der Elektronen auswirkt. Dies verursacht die Franz-Keldysh-Oszillationen im ER-Spektrum oberhalb der Bandlücke und die Absorption in der verbotenen Zone.

### 3.1.2 Auswertung Elektreflexionsspektren

Die Änderung des Imaginärteils der dielektrischen Funktion, aufgrund der Anwesenheit eines elektrischen Feldes in  $z$ -Richtung kann über die Differenz von  $\varepsilon_2(\omega, F_z)$  und  $\varepsilon_2(\omega, 0)$  bestimmt werden. Unter Verwendung der Kramers-Kronig-Relation lassen sich  $\varepsilon_1$  und  $\varepsilon_2$  ineinander umrechnen. Daraus ergeben sich für die Änderung der DF durch das elektrische Feld die Beziehungen

$$\Delta\varepsilon_1 = \varepsilon_1(\omega, \vec{F}) - \varepsilon_1(\omega, 0) = \frac{B\sqrt{\theta}}{\omega^2} \mathcal{G}(x_0), \quad (3.7)$$

$$\Delta\varepsilon_2 = \varepsilon_2(\omega, \vec{F}) - \varepsilon_2(\omega, 0) = \frac{B\sqrt{\theta}}{\omega^2} \mathcal{F}(x_0), \quad (3.8)$$

mit

$$B = \frac{e^2 |\vec{e}\vec{P}_{VC}|}{2\pi\varepsilon_0 m_0^2 \hbar} \sqrt{\frac{8|\mu^*|}{\hbar^3}}, \quad (3.9)$$

$$x_0 = \frac{E_g - \hbar\omega}{\hbar\Theta} \quad (3.10)$$

und der elektrooptischen Energie

$$\hbar\Theta = \left( \frac{e^2 F^2 \hbar^2}{2\mu^*} \right)^{1/3}. \quad (3.11)$$

Die sogenannten elektrooptischen Funktionen  $\mathcal{G}(x_0)$  und  $\mathcal{F}(x_0)$  können durch die konvergenten und divergenten Lösungen  $\text{Ai}(x_0)$  und  $\text{Bi}(x_0)$  der Airy-Differentialgleichung und deren ersten Ableitungen  $\text{Ai}'(x_0)$  und  $\text{Bi}'(x_0)$  ausgedrückt werden [42]. Für einen  $3D - M_0$  kritischen Punkt eines Halbleiters mit parabolischer Bandstruktur kann man  $\Delta\varepsilon_2$  oberhalb der Bandlücke (ungefähr ab der dritten Oszillation) asymptotisch nähern [43, 44]:

$$\Delta\varepsilon_2(\hbar\omega, F_z) \propto \exp\left[\frac{-2\Gamma\sqrt{E - E_g}}{(\hbar\Theta)^{3/2}}\right] \cos\left[\frac{4}{3}\left(\frac{\hbar\omega - E_g}{\hbar\theta}\right)^{3/2}\right] \cdot \frac{1}{E^2(E - E_g)}. \quad (3.12)$$



Maxima und Minima werden beobachtet, wenn das Argument des Kosinus  $\pm 1$  ergibt. Dies führt zu folgender Bedingung:

$$\frac{4}{3} \left( \frac{\hbar\omega_v - E_g}{\hbar\theta} \right)^{3/2} = v \cdot \pi \quad \text{mit} \quad v = 3, 4, 5, \dots \quad (3.13)$$

Stellt man in einem Diagramm  $(\hbar\omega_v - E_g)^{3/2}$  über der Nummer  $v$  der Extrema dar, erhält man eine Gerade mit dem Anstieg

$$S = \frac{3\pi(\hbar\theta)^{3/2}}{4} = \frac{3\pi e F_z \hbar}{\sqrt{32}\mu^*}. \quad (3.14)$$

Damit kann man nun bei bekannter reduzierter effektiver Masse  $\mu^*$  die elektrische Feldstärke in der Probe bestimmen.

Die Auswertung der kritischen Punkte der Bandstruktur erfolgt über die dielektrische Funktion. Für die Übergangsenergie eines kritischen Punktes sind freie Exzitonen entscheidend beteiligt. Der Exzitonenbeitrag zur dielektrischen Funktion kann mit einer lorentzverbreiterten Deltafunktion folgendermaßen beschrieben werden:

$$\varepsilon_{\text{Ex}} = \frac{I}{\hbar\omega - E_{\text{Ex}} + i\Gamma}. \quad (3.15)$$

$I$  ist die Amplitude,  $E_{\text{Ex}}$  die Übergangsenergie und  $\Gamma$  die Verbreiterung. Durch das modulierte interne elektrische Feld erfährt  $\varepsilon_{\text{Ex}}$  auch eine Änderung und es ergibt sich damit

$$\Delta\varepsilon_{\text{Ex}} \propto (\hbar\omega - E_{\text{Ex}} + i\Gamma)^{-n}. \quad (3.16)$$

Der Parameter  $n$  berücksichtigt die Dimension des kritischen Punktes. Für Exzitonen gilt  $n = 2$ . Daraus ergibt sich die Gleichung

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{C e^{i\phi}}{(\hbar\omega - E_{\text{Ex}} + i\Gamma)^2} \quad (3.17)$$

mit  $C$  als Konstante, welche die Amplitude repräsentiert, und  $\phi$  als Phasenwinkel. Dieser beschreibt die Art des Übergangs und den optischen Weg durch das Material. Die Übergangsenergie  $E_{\text{Ex}}$  und der phänomenologische Verbreiterungsparameter  $\Gamma$  legen die energetische Lage und Breite der Struktur fest. Aus den Spektren ist es möglich, die energetische Lage und die Verbreiterung ohne die Kenntnis der Materialkonstanten des Kristalls oder der elektrischen Feldstärke zu ermitteln.

### 3.1.3 Experimenteller Aufbau

Der experimentelle Aufbau des ER-Messplatzes ist in Abbildung 3.1 dargestellt. Als Lichtquelle wird eine 100 W-Xenonkurzbogenlampe verwendet, die sich in einem Lampengehäuse mit Kondensator befindet. Die Linse L1 fokussiert das Licht nahezu vollständig auf den Eintrittsspalt des Monochromators (PGS 2). Eine Blende hinter L1 sorgt für eine homogene Ausleuchtung des Spaltes, indem sie Randbereiche des Lichtstrahls verdeckt. Der Monochromator zerlegt das Licht spektral. Dieses wird anschließend auf die Linse L2 ins Unendliche abgebildet. Dadurch wird ein nahezu paralleler Strahl erzeugt, der auf ein Spiegelprisma trifft und schließlich auf die Probe im Kryostaten abgelenkt wird. Eine Linse (Objektiv) außerhalb des Kryostaten fokussiert das Licht unter nahezu senkrechtem Einfall auf die Probe. Die Probe befindet sich in einem Kryostaten, in dem Stickstoff bzw. Helium eingefüllt wird, um Temperaturexperimente von 5 K bis 300 K durchzuführen.

Das reflektierte Licht wird danach auf das Prisma zurückgeleitet und von einer Photodiode detektiert. Eine vor der Diode angebrachte Linse sorgt für eine optimale Ausleuchtung der Detektorfläche. Diese erzeugt einen Gleichstromanteil, welcher proportional zu  $R$  ist, und eine Wechselkomponente proportional zu  $\Delta R$ .

Der Wechselanteil der Reflektivität entsteht durch Anlegen eines im Funktionsgenerator erzeugten elektrischen Wechselsignals an dem ohmschen und dem Schottkykontakt der Probe. Der Photostrom im Detektor wird mittels I-U-Vorverstärker umgewandelt und mit einem Faktor von  $10^8$  V/A verstärkt. Der Gleich- und Wechselspannungsanteil wird vom PC gemessen. Vorausgehend wird die Wechselspannung phasensensitiv mit einem Lock-In-Verstärker in Form einer Gleichspannung ausgegeben. Das Messprogramm erzeugt das Messsignal der Elektroreflexion  $\frac{\Delta R}{R}$  (3.6). Dieses Verhältnis wird aus der vom Lock-In erzeugten Gleichspannung ( $\propto \Delta R$ ) und der von außen angelegten Gleichspannung  $U_{\text{DC}}(\propto R)$  gebildet.

## 3.2 Photostrommessung

### 3.2.1 Grundlagen Photostrommessung

Bei der Messung des Photostromes (PC) werden Elektron-Loch-Paare in der Probe durch auftreffendes Licht auf den Schottky-Kontakt generiert. An-

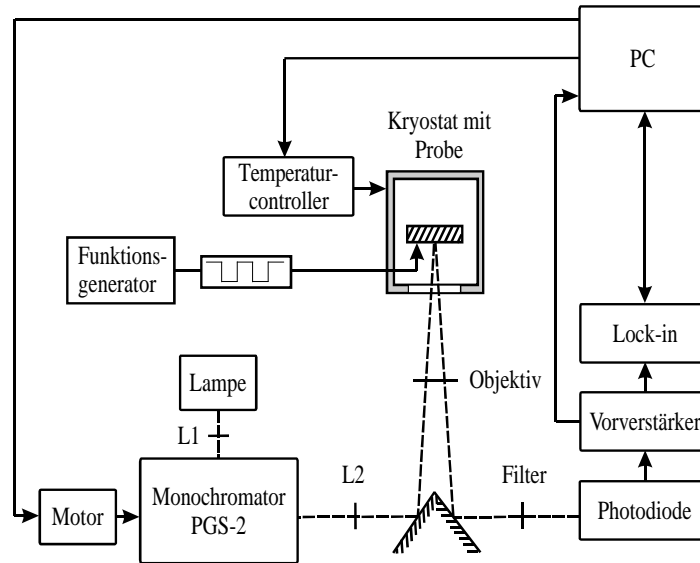


Abbildung 3.1: Schematischer Aufbau des ER Messplatzes

schließlich werden diese über das innere elektrische Feld bzw. die von außen zwischen Schottky- und ohmschem Kontakt angelegte Spannung getrennt. Der entstandene Photostrom wird in Abhängigkeit von der Energie des anregenden Lichts gemessen. Ein Vorteil dieser Methode besteht darin, dass nicht das von der Probe reflektierte Licht mittels eines Detektors gemessen wird, sondern direkt der generierte Photostrom. Dieser ist proportional zur Absorption der generierten Ladungsträger, welche über die Gleichung

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega}{n \cdot c_0} \cdot \varepsilon_2(\omega) \quad (3.18)$$

mit dem Imaginärteil der DF verknüpft ist, wobei  $c_0$  die Vakuumlichtgeschwindigkeit und  $n$  die Brechzahl des Mediums ist.

Dadurch ist diese Technik auch bei Materialien anwendbar, die eine sehr rauhe Oberfläche besitzen und Reflexionsmessung durch die geringe Intensität unmöglich machen. Ein weiterer ganz wichtiger Vorteil der Messung des Photostroms besteht in der Möglichkeit der Änderung der Polarisation des Messlichts mittels eines Glan-Thomson-Prismas. Damit ist es unmittelbar möglich, die Auswahlregeln der exzitonischen Übergänge für unterschiedliche Polarisationen zu untersuchen (Vergleiche Kapitel 2.2.1). Dies wurde im Rahmen dieser Arbeit nicht durchgeführt, kann aber Gegenstand weiterer Experimente sein.

### 3.2.2 Experimenteller Aufbau

Der experimentelle Aufbau zur Messung des Photostroms ist dem für die Messung der Elektroreflexion sehr ähnlich (Abbildung 3.1). Der Hauptunterschied besteht im fehlenden Photoempfänger bei Photostrommessungen. Der Chopper hinter dem Monochromator liefert die Referenzfrequenz für den Lock-In-Verstärker, wodurch der Einfluss von Streulicht aus der Umgebung eliminiert wird. Ein Picoamperemeter misst den generierten Photostrom. Ein Transformator filtert den Gleichspannungsanteil heraus und lässt den Wechselanteil der Spannung, welcher durch das gehopperte Licht auf dem Schottky-Kontakt erzeugt wird, passieren. Das Signal wird dem PC zugeführt und man erhält eine wellenlängenabhängige  $I_{\text{Ph}}(\lambda)$  Charakteristik für die jeweilige Probe.

## 3.3 Photoreflexion

### 3.3.1 Prinzip der Photoreflexion

Die Photoreflexion ist ebenfalls wie die ER ein Vertreter der Modulationspektroskopie. Die Art der Modulation des elektrischen Feldes in der Probe unterscheidet sich jedoch. Anstatt Kontakte auf die Probe zu bringen und darüber ein externes moduliertes Feld anzulegen, nutzt man hier einen intensitätsmodulierten Laser.

Ein gehoppertes Laser erzeugt in der Probe periodisch Elektron-Loch-Paare. Eventuell fest vorhandene Ladungen werden dadurch abgeschirmt, das heißt, die inneren elektrischen Felder verringern sich. Interne Felder entstehen durch mögliche vorhandene geladene Oberflächenzustände, Verunreinigungen oder ungesättigte Bindungen. Das Abschirmen der inneren Felder ändert die Reflektivität der Probe mit der gleichen Modulationsfrequenz wie die Anregungsquelle. Dadurch ist eine phasenempfindliche Auswertung des Messsignals mittels Lock-In-Technik durchführbar.

Die Messgröße der Photoreflexion entspricht analog zur Elektroreflexion, der Änderung der Reflektivität  $\Delta R$  bezogen auf die Reflektivität  $R$  (Gleichung (3.5)) ohne externe Störung (vergleiche Gleichung (3.6)). Durch die Normierung auf die Reflektivität werden Intensitätsschwankungen, Streuungen, Einflüsse der optischen Komponenten in der Messanordnung und die spektrale Empfindlichkeit des Detektors im Messsignal ausgeglichen, weil diese in

die Messungen von  $\Delta R$  und  $R$  einfließen. Die Photoreflexion ist eine geeignete Methode, um optische Übergänge temperaturabhängig und kontaktlos zu messen. Die Auswertung der Spektren erfolgt analog zur ER.

#### 3.3.2 Experimenteller Aufbau der Photoreflexion

Der Messaufbau für die Photoreflexion ist dem der Elektroreflexion sehr ähnlich, so dass der ER-Aufbau nur geringfügig modifiziert werden muss (vergleiche Abbildung 3.1). Das elektrische Feld wird hier durch einen gehopperten He-Cd-Laserstrahl mit einer Wellenlänge von 325 nm moduliert. Die Frequenz des Choppers dient als Referenz für den Lock-In-Verstärker, so dass der Unterschied der Reflexion für den aus - und eingeschalteten Laser gemessen wird.

### 3.4 Reflektivitätsmessungen

Um Reflektivitätsmessungen durchzuführen, muss der Aufbau aus Abschnitt 3.1 kaum variiert werden. Die Wechselspannung wird ausgeschaltet und ein Chopper vor die Meßlichtquelle platziert. Das Signal am PC liefert die unkorrigierte Reflektivität  $R_{\text{exp}}$  der Probe.

Diese ist noch durch die spektrale Charakteristik der Xenonlampe, die spektrale Empfindlichkeit des Detektors, Reflexionsverluste an den Linsen und Streueffekte verfälscht. Deshalb wird eine weitere Messung unter gleichen Messbedingungen durchgeführt, um die Reflektivität  $R_{\text{Si, exp}}$  einer Siliziumscheibe zu messen. Die tatsächliche Reflektivität  $R_{\text{Si}}$  wurde zuvor mit einem Ellipsometer bestimmt. Teilt man nun die gemessene Reflektivität des Si durch die tatsächliche, erhält man einen wellenlängenabhängigen Faktor mit dem die Reflektivität der zu untersuchenden Probe zu korrigieren ist:

$$R = \frac{R_{\text{Si}}}{R_{\text{Si, exp}}} \cdot R_{\text{exp}}. \quad (3.19)$$

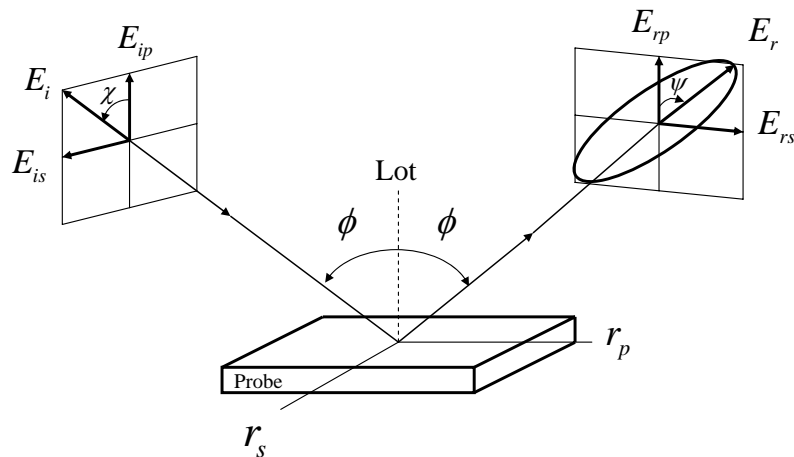


Abbildung 3.2: Zerlegung der elektrischen Feldvektoren von einfallendem (i) und reflektiertem (r) Licht in parallele und senkrechte Komponente

## 3.5 Spektralellipsometrie

### 3.5.1 Prinzip der Ellipsometrie

Bei der Spektralellipsometrie wird die Änderung der Polarisierungseigenschaften des Lichtes bei der Reflexion an der Probe untersucht. Aus der Änderung des Polarisationszustandes kann man die dielektrische Funktion (Gleichung(3.1)) und die Schichtdicke der Probe bestimmen. Die Wellenlänge wird während der Messung variiert. Somit erhält man die DF abhängig von der Photonenenergie.

Bei Mehrschichtsystemen hängt  $\varepsilon$  von der DF der Einzelschichten, den jeweiligen Schichtdicken und von Grenzflächenrauigkeiten zwischen den einzelnen Schichten ab. Deshalb misst man eine effektive DF  $\langle \varepsilon \rangle$ . Die wahre DF der Schichten wird bestimmt, indem man ein Modell erstellt und es an die experimentellen Daten anpasst.

Trifft bei dem Ellipsometrieexperiment eine elektromagnetische Welle auf eine Grenzfläche, so lässt sich der elektrische Feldvektor in zwei Komponenten zerlegen. Die eine ist senkrecht (s) und die andere parallel (p) zur Einfallsebene (aufgespannt durch einfallenden Strahl und Lot) (siehe Abbildung 3.2).

An der Grenzfläche zwischen zwei Medien mit unterschiedlichem Brechungs-

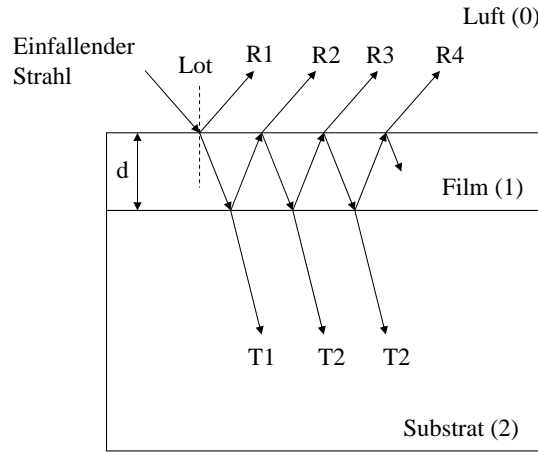


Abbildung 3.3: Vielfachreflexion und Transmission für einen dünnen Film auf einem halbunendlichen Substrat

index treten Reflexion und Transmission auf (vergleiche Abbildung 3.3). Über die Komponenten der elektrischen Feldstärke des Lichtes  $\vec{E}_i$  und  $\vec{E}_r$ , welche man in einen parallelen und einen senkrechten Anteil zerlegen kann, erhält man die Fresnelkoeffizienten für Reflexion und Transmission. Diese sind gegeben durch das Verhältnis der einfallenden Komponente des elektrischen Feldes zum reflektierten bzw. transmittierten Anteil.

Für ein Schichtsystem mit mehreren parallelen Schichten ändern sich die Verhältnisse für Reflexion und Transmission nach Abbildung (3.3) durch die entstehende Vielfachreflexion an den Grenzflächen. Die reflektierten Strahlen unterscheiden sich in ihrer Phasenlage aufgrund der verschiedenen optischen Weglängen des Lichtes durch die Probe. Hierfür kann man nun eine Phasendicke  $\beta_P$  einführen:

$$\beta_P = (\bar{n}_1) \cdot d \cdot \frac{2\pi}{\lambda} \cos \phi_1 = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot d \cdot \sqrt{\bar{n}_1^2 - \bar{n}_0^2 \cdot \sin^2 \phi_0}. \quad (3.20)$$

Die gesamte reflektierte Feldstärke erhält man durch phasenrichtiges Aufsummieren der einzelnen Strahlen. Durch die schnelle Abnahme der Feldstärke mit steigender Anzahl der Grenzflächenkontakte konvergiert die Summe. Man erhält die Fresnelkoeffizienten für das 3-Phasen-Modell [37] und definiert  $\rho$  als Messgröße der Ellipsometrie:

$$\rho = \frac{\langle \bar{r}_p^- \rangle}{\langle \bar{r}_s^- \rangle} = \frac{|\langle \bar{r}_p^- \rangle|}{|\langle \bar{r}_s^- \rangle|} \cdot e^{i(\delta_p - \delta_s)} = \tan \Psi \cdot e^{i\Delta}. \quad (3.21)$$

Die Messgrößen  $\Psi$  und  $\Delta$  werden bei der Ellipsometrie als ellipsometrischer Winkel, definiert als Azimut der großen Halbachse der Ellipse, bzw. als Pha-

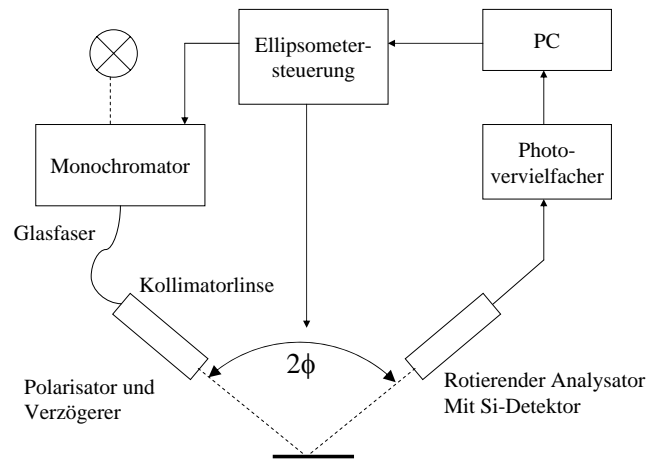


Abbildung 3.4: Schematischer Aufbau des Ellipsometermessplatzes

senschub bezeichnet. Bei einer bisher nicht untersuchten Probe hat man für jede Schicht drei Unbekannte, den Realteil, den Imaginärteil der DF und die Schichtdicke  $d$ . Man hat jedoch nur zwei Messgrößen und daraus ergibt sich ein nicht eindeutig lösbares Gleichungssystem. Einen Ausweg bietet die Messung bei unterschiedlichen Einfallswinkeln. Dadurch erhält man verschiedene optische Weglängen durch die Schichten bzw. andere Phasendicken  $\beta_p$  und kann somit alle Größen bestimmen.

### 3.5.2 Experimenteller Aufbau

Der prinzipielle Aufbau eines Ellipsometers ist in Abbildung (3.4) schematisch dargestellt. Die Messlichtquelle wird durch eine Xe-Höchstdrucklampe gebildet und das entstehende Licht wird anschließend in einem Monochromator spektral zerlegt. Mittels einer Lichtleitfaser wird das Licht in einen Polarisator geleitet, der linear polarisiertes Licht erzeugt, und auf die Probe ausgerichtet. Der Detektor besitzt eine geringe Empfindlichkeit für linear polarisiertes Licht, deshalb wird noch ein variabler Verzögerer (Retarder) hinter dem Polarisator angebracht. Dieser ändert die Phasenlage zwischen paralleler und senkrechter Komponente des Lichtes in definierter Weise und erhöht somit die Empfindlichkeit am Detektor.

Das reflektierte Licht ist im allgemeinen elliptisch polarisiert und trifft auf einen kontinuierlich rotierenden Analysator, der die Polarisationsellipse abtastet. Die am Detektor gemessene Spannung für elliptisch polarisiertes



Licht ist gegeben durch

$$U(t) = U_{\text{DC}} + a \cos(2\omega t) + a \sin(2\omega t), \quad (3.22)$$

wobei  $\omega$  die Kreisfrequenz des Analysators angibt. Das Signal besteht aus einem Gleichanteil, überlagert von einem Wechselanteil, und die Intensität am Detektor ergibt sich zu:

$$I_{\text{D}} \propto 1 + \alpha \cos(2A) + \beta \sin(2A). \quad (3.23)$$

$A$  bezeichnet den Azimutwinkel des Analysators und  $\alpha$  bzw.  $\beta$  sind die Fourierkoeffizienten des Signals. Diese können über  $\Psi$  und  $\Delta$  und den bekannten Azimutwinkel des Polarisators  $P$  folgendermaßen ausgedrückt werden:

$$\alpha = \frac{a}{U_{\text{DC}}} = \frac{\tan^2 \Psi - \tan^2 P}{\tan^2 \Psi + \tan^2 P} \quad \text{und} \quad (3.24)$$

$$\beta = \frac{b}{U_{\text{DC}}} = \frac{2 \tan \Psi \cos \Delta \tan P}{\tan^2 \Psi + \tan^2 P}. \quad (3.25)$$

Aus den ermittelten Fourierkoeffizienten können die Messgrößen  $\Psi$  und  $\Delta$  berechnet werden.

$$\tan \Psi = \sqrt{\frac{1 + \alpha}{1 - \alpha}} \cdot |\tan P| \quad (3.26)$$

$$\cos \Delta = \frac{\beta}{\sqrt{1 - \alpha^2}} \cdot \frac{\tan P}{|\tan P|} \quad (3.27)$$

## 3.6 Photolumineszenz

### 3.6.1 Grundlagen der Photolumineszenz

Lumineszenz ist die optische Strahlung eines physikalischen Systems, die beim Übergang von einem angeregten Zustand zum Grundzustand entsteht. Je nach Art der Anregung, hier durch Photonen, unterscheidet man verschiedene Arten der Lumineszenz. Die Anregung von Elektronen in das Leitungsband erfolgt mittels Laser, dessen Energie größer als die der Bandlücke ist. Es gibt weiterhin andere Methoden, um Elektron-Loch-Paare im Halbleiter zu erzeugen, auf die hier nicht näher eingegangen wird.

Die angeregten Elektronen und Löcher thermalisieren in die Nähe der Leitungs- und Valenzbandkante durch inelastische Phononenstreuung und

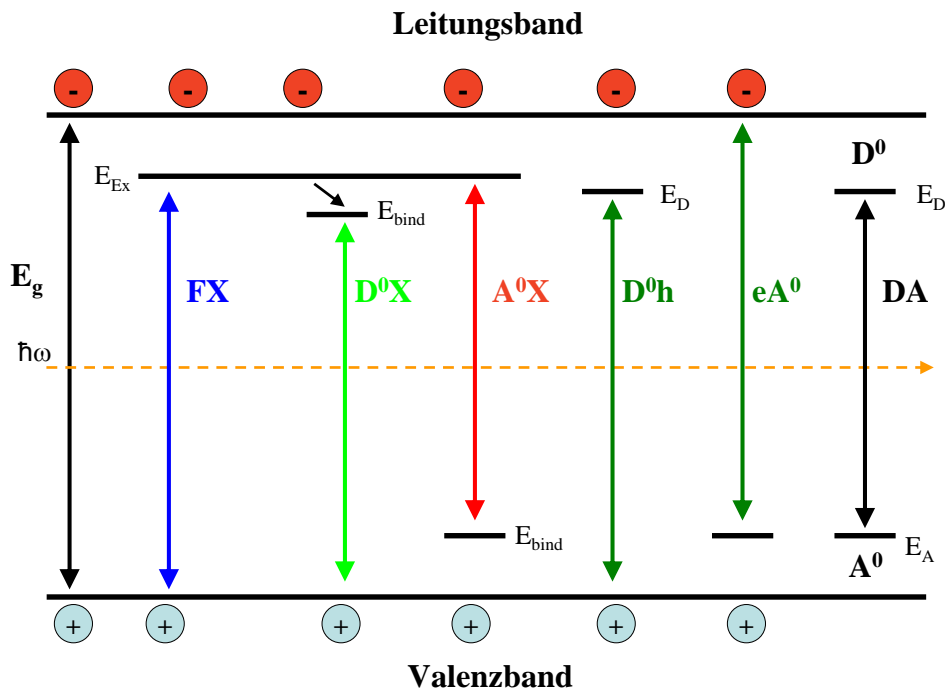


Abbildung 3.5: Mögliche Lumineszenzübergänge unterhalb der Bandlücke: freies Exziton (FX), donator- bzw. akzeptorgebundenes Exziton ( $D^0X$  bzw.  $A^0X$ ), frei-zu-gebundener-Übergang ( $eA^0$ ,  $D^0h$ ) und neutraler Donator-Akzeptor-Übergang ( $DA$ )

rekombinieren anschließend. Diese Abweichung von der Gleichgewichtskonzentration der Löcher und Elektronen führt zu verschiedenen Rekombinationsmechanismen. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die strahlende Rekombination (Photonen) der PL untersucht. Die erzeugte Photolumineszenz ist für die jeweilige Probe charakteristisch und dient zur Bestimmung der Exzitonübergangsenergien. Im Folgenden werden die im Experiment aufgetretenen Rekombinationsmechanismen, welche in Abbildung 3.5 dargestellt sind, näher beschrieben.

Bei der direkten Band-zu-Band-Rekombination besetzt ein Elektron des Leitungsbandes unmittelbar einen freien Zustand des Valenzbandes und emittiert dabei ein Photon mit der Bandlückenenergie  $E_g$ . Für Energien, die kleiner als die Bandlücke sind, kann die Lumineszenzstrahlung auch durch Exzitonen erfolgen, weil die Rekombinationsstrahlung um die Exzitonbindungsenergie (Gleichung 2.12) abgesenkt ist. Man unterscheidet zwischen freien und störstelle gebundenen Exzitonen. Donatoren und Akzeptoren sind in der Probe in gewissem Maße vorhanden und die Exzitonen werden

aufgrund der Van-der-Waals-Wechselwirkung von den Störstellen angezogen. Dies führt zu einer weiteren Absenkung der Energie durch die Lokalisierung des Exzitons. Die Rekombination eines solchen Exzitons an einem Donator bzw. Akzeptor wird als  $D^0X$  bzw.  $A^0X$  bezeichnet.

Die Frei-zu-gebundenen-Rekombination entsteht durch den strahlenden Übergang eines freien Ladungsträgers mit einem lokalisierten Defektzustand. Man unterscheidet zwischen zwei Arten solcher Übergänge, dem Akzeptor ( $eA^0$ )- und dem Donator-Übergang ( $D^0h$ ). Die emittierte Photonenenergie ist um die Bindungsenergie der jeweiligen Störstelle verringert. Eine Erhöhung der Störstellenkonzentration führt zur Verbreiterung im Spektrum, weil die Störstellen näher aneinander liegen und es zum Überlappen der Wellenfunktion kommt (Störstellenband).

Kommen in einem Halbleiter sowohl Donatoren als auch Akzeptoren vor, so können strahlende Übergänge zwischen donatorgebundenen Elektronen und akzeptorgebundenen Löchern stattfinden ( $DA$ ).

### 3.6.2 Auswertung der Photolumineszenz

Die genaue Lage  $E$  der Übergänge in einem PL Spektrum kann mittels Linienformmodellen an die experimentellen Daten angepasst werden. In diesem Kapitel werden die Gleichungen zum Anpassen mittels Lorentzprofil, Gaußprofil und einer Mischfunktion aus beiden Funktionen dargelegt. Das Lorentzprofil wird ausgedrückt durch:

$$I_L = A \cdot \frac{\Gamma E}{(E_0^2 - E^2 - i\Gamma E)}. \quad (3.28)$$

Das Gaußprofil hat die Form:

$$I_G = A \cdot e^{-\left(\frac{E-E_0}{\sigma}\right)^2} \quad (3.29)$$

und der Gauß-Lorentz-Oszillator wird beschrieben mit der Gleichung

$$I = iA \left[ \int_0^\infty e^{i(\hbar\omega - E_0 + iB_r\gamma(s))s} ds + \int_0^\infty e^{i(\hbar\omega + E_0 + iB_r\gamma(s))s} ds \right]. \quad (3.30)$$

Die Beziehung  $\gamma = \Gamma + 2\sigma^2 s$ , mit  $s = t/\hbar$  und  $t$  als Streuzeit an Defekten, beschreibt die Verbreiterung der Gauß-Lorentz-Misch-Funktion. Die natürliche Linienbreite  $\Gamma = \hbar/\tau$  bezieht sich auf die homogene, während  $\sigma$  die inhomogene Verbreiterung durch Streuung an Defekten, die Elektron-Phonon-Wechselwirkung und die Elektron-Elektron-Streuung über das Gaußprofil berücksichtigt. Die Verbreiterung  $\gamma$  kann man kontinuierlich zwischen

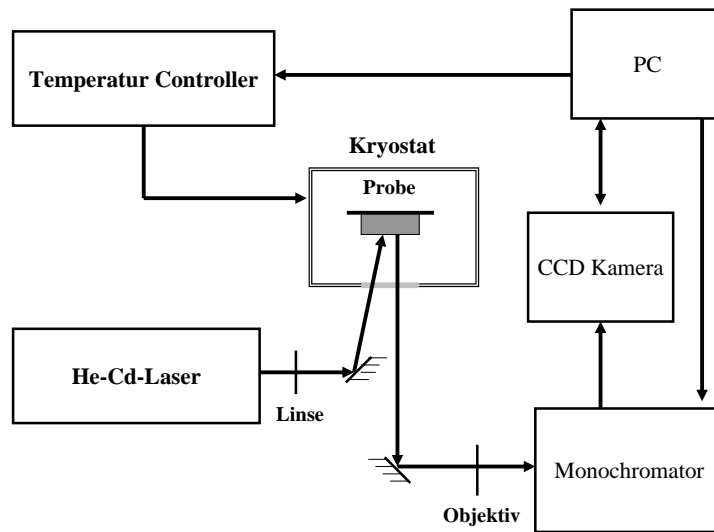


Abbildung 3.6: Aufbau eines PL-Messplatzes

Gauß( $\sigma$ )- und Lorentz( $\Gamma$ )-Verbreiterung über die Beziehung  $e^{B_r} = \Gamma/\sigma$  variieren. Negatives  $B_r$  bedeutet eine vorwiegende Gauss- und positives  $B_r$  einen größeren Anteil an Lorentz-Verbreiterung [45].

### 3.6.3 Experimenteller Aufbau

Abbildung 3.6 zeigt schematisch den Aufbau des PL-Messplatzes. Die Probe befindet sich in einem Kryostaten, in dem Stickstoff bzw. Helium eingefüllt wird, um Temperaturexperimente von 5 K bis 300 K durchzuführen.

Als Anregung dient ein 325 nm-He-Cd-Laser, dessen Anregungsenergie oberhalb der Bandlücke des zu untersuchenden Halbleiters sein sollte. Der erzeugte Strahl wird auf die Probe geleitet und erzeugt ein Ungleichgewicht zwischen Elektronen und Löchern. Die emittierte Lumineszenz wird mit einem Objektiv eingefangen und über eine Lichtleitfaser in den Monochromator geleitet. Dort findet eine spektrale Zerlegung des Lichtes statt, welches von einer CCD-Kamera zur weiteren Analyse aufgenommen wird.

# Kapitel 4

## Probenstruktur

Die meistverwendeten Substrate für die GaN-Abscheidung sind Saphir oder SiC. Durch die unterschiedlichen Gitterkonstanten und thermischen Ausdehnungskoeffizienten entsteht eine Fehlanpassung und somit eine Verspannung in den Schichten.

Hydridgasphasenepitaxie (HVPE) ist ein Verfahren zur Herstellung von III-V-Verbindungshalbleitern aus den metallisch vorliegenden Quellen der Gruppe III Elemente und Wasserstoffverbindungen der Gruppe-V-Elemente des Halbleiterkristalls. Dabei werden Chlorwasserstoff HCl und Gallium bei hoher Temperatur, ca 600-800°C, zu Galliumchlorid umgesetzt. Dieses strömt weiter, trifft auf dem Saphir-Substrat mit gasförmigem Ammoniak zusammen und reagiert bei kontrolliertem Druck und hohen Temperaturen zu GaN. Typische Wachstumsraten, die mit guter Materialqualität erzielt werden, liegen zwischen 50 und 150  $\mu\text{m}/\text{h}$ . Anschließend werden diese dicken Schichten vom Substrat mittels Laser entfernt.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine freistehende GaN-Probe (H011139), hergestellt von E. Richter am Ferdinand-Braun-Institut in Berlin, mittels optischer Methoden untersucht. Diese Probe dient als Referenz für unverspanntes GaN.

Die metallorganische Gasphasenabscheidung (metallorganic vapor phase epitaxy, MOCVD) beruht auf der thermischen Dissoziation chemischer Vorstufen an der heißen Substratoberfläche. Ausgangsstoffe für die Abscheidung sind metallorganische Verbindungen (z.B. Trimethylgallium TEGa, Trimethylaluminium TMAI) und Hydride (z.B. Ammoniak) in fester oder flüssiger Form. Ein Trägergas (Wasserstoff oder Stickstoff) strömt durch einen mit diesen Substanzen gefüllten Behälter (Bubbler), belädt sich entsprechend des

## Kapitel 4. Probenstruktur

Dampfdrucks der Metallorganika und transportiert diese zum Reaktor. Im Reaktor zersetzen sich diese Ausgangsstoffe und reagieren zu den Nitridverbindungen.

Der Aufbau der GaN-Proben ist in Abbildung 4.1 links dargestellt. Die Abscheidung erfolgte auf einem Saphirsubstrat. Die darauffolgende Nukleationsschicht hat die Aufgabe, Nukleationszentren zur Verfügung zu stellen, um das laterale Wachstum des GaN zu fördern [46–48]. Den Abschluss bildet die eigentliche GaN-Schicht. Die Schichtdicken der untersuchten Proben sind in Tabelle 4.1 zu sehen.

Tabelle 4.1: Schichtdicken der GaN-Proben mit unterschiedlichen Nukleationsschichten

Probe	187	219	OSRAM	HVPE
$d_{\text{GaN-Nuk.}} \text{ (nm)}$	-	20	20	-
$d_{\text{AlN-Nuk.}} \text{ (nm)}$	30	-	-	-
$d_{\text{GaN}} \text{ (nm)}$	1207	1260	4750	350000

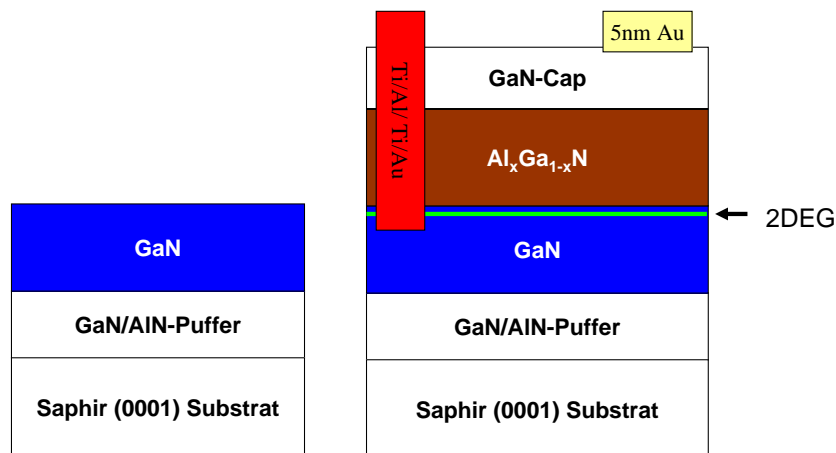


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung der GaN-Probe links und der Heterostruktur mit Kontakten rechts (nicht maßstabsgetreu).

Die untersuchten GaN-(187, 219) und HEMT-Proben aus dem Zentrum für Mikro- und Nanotechnologien (ZMN), hergestellt von K. Tonisch, wurden nach dem Schema in Abbildung 4.1 rechts mittels MOCVD-Technik gewachsen.

Im Vergleich zu den GaN-Proben wurde hier zusätzlich eine Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N-Schicht (braun) mit einer Dicke von ca. 30 nm aufgebracht, die abschließend von einer 2nm GaN-Deckschicht vor Kontamination geschützt wurde. Das

gesamte Wachstum geschah bei einem Druck von  $p = 50$  mbar. Sämtliche untersuchten Proben weisen Ga-Polarität auf.

Unterhalb der AlGa<sub>N</sub>-Schicht bildet sich an der Grenzfläche zum GaN das 2DEG (grün dargestellt) aus. Weitere Details zum Wachstum sind in der Diplomarbeit von K. Tonisch [46] nachzulesen. Die Schichtdicken aus der Ellipsometriemessung (Kapitel 6.1) für die einzelnen Schichten der Heterostrukturen sind in Tabelle 4.2 zusammengefasst.

Tabelle 4.2: Schichtdicken der Heterostrukturen mit GaN und AlN als Nukleationsschicht

Probe	178	199	202	275
$d_{\text{GaN-Nuk.}}$ (nm)	48	-	-	-
$d_{\text{AlN-Nuk.}}$ (nm)	-	27	32	31
$d_{\text{GaN}}$ (nm)	1296	1110	1187	1189
$d_{\text{AlGaN}}$ (nm)	26,9	25,5	26,3	26,1
$d_{\text{Cap}}$ (nm)	3,3	2,5	2,6	3,0

Auf die Oberfläche der Heterostrukturen wurden für die ER-Messungen ohmsche und Schottky-Kontakte aufgebracht. Als ohmscher Kontakt dient die Schichtfolge von 20 nm Titan, 80 nm Aluminium, 30 nm Titan und 100 nm Gold. Gründe für die Wahl dieser Materialien liegen in der guten Haftung von Ti auf GaN, der geringen Austrittsarbeit von Ti und der natürlichen Bildung einer wenige Monolagen dicken Oxid-Schutzschicht auf Al [49]. Gold dient zur Herabsetzung des elektrischen Widerstandes [50].

Die Ti/Al/Ti/Au-Kontakte werden bei einer Temperatur von 800°C für 40 Sekunden getempert, um eine Diffusion über Defekte in die GaN-Schicht hervorzurufen. Als semitransparenter Schottky-Kontakt wurde eine 5 nm dicke Goldschicht verwendet [51–54]. Damit wird die geforderte Beleuchtung der Photodiode von oben möglich. Der schematische Aufbau der Schottky-Dioden ist in Abbildung 4.1 veranschaulicht.

# Kapitel 5

## Untersuchungen an GaN

Für die Interpretation des Verhaltens der AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub>-Heterostrukturen ist die möglichst genaue Kenntnis des Spannungszustandes der Schichten im Temperaturbereich von 5 K bis 295 K notwendig. Mit Röntgenuntersuchungen werden zwar die Gitterkonstanten bestimmt, jedoch ist dies nur bei Raumtemperatur möglich. Zudem beträgt die Genauigkeit der Gitterkonstanten nur  $\pm 0,001 \text{ \AA}$ , was einer relativen Energieverschiebung des freien A-Exzitons von  $\pm 6 \text{ meV}$  entspricht. Im Gegensatz dazu ermöglichen optische Messungen eine Ermittlung der Übergangsenergien mit einer Messgenauigkeit von  $\pm 1 \text{ meV}$  im gesamten Temperaturbereich von 5 K bis 295 K. Ziel der Untersuchungen ist die Bestimmung der Verspannung der Ga<sub>N</sub>-Proben aus den exzitonischen Übergangsenergien. Die temperaturabhängige Bestimmung der Exzitonenergien der HVPE-Probe dient als Referenz für spannungsfreies Material. Der Einfluss des Saphir-Substrates und der zusätzlichen Ga<sub>N</sub>- bzw. Al<sub>N</sub>-Nukleationsschicht auf die Übergangsenergien wird mittels PL und PR durchgeführt. Mit Hilfe dieser zwei unabhängigen Messmethoden wird der Einfluss dieser zwei Schichten auf die Verschiebung der Exzitonenergien bestimmt. Anhand der Ergebnisse sind Rückschlüsse auf den temperaturabhängigen Spannungszustand der Proben möglich.

### 5.1 Photoreflexion

Im Spektralbereich um die Bandlücke des Ga<sub>N</sub> wurden temperaturabhängige Reflektivitätsmessungen von  $T = 5 \text{ K}$  bis Raumtemperatur an den vier Proben durchgeführt (siehe Abbildung 5.1). Im niederenergetischen Bereich sieht man Fabry-Perot-Oszillationen. Diese entstehen, weil die Ga<sub>N</sub>-Schicht



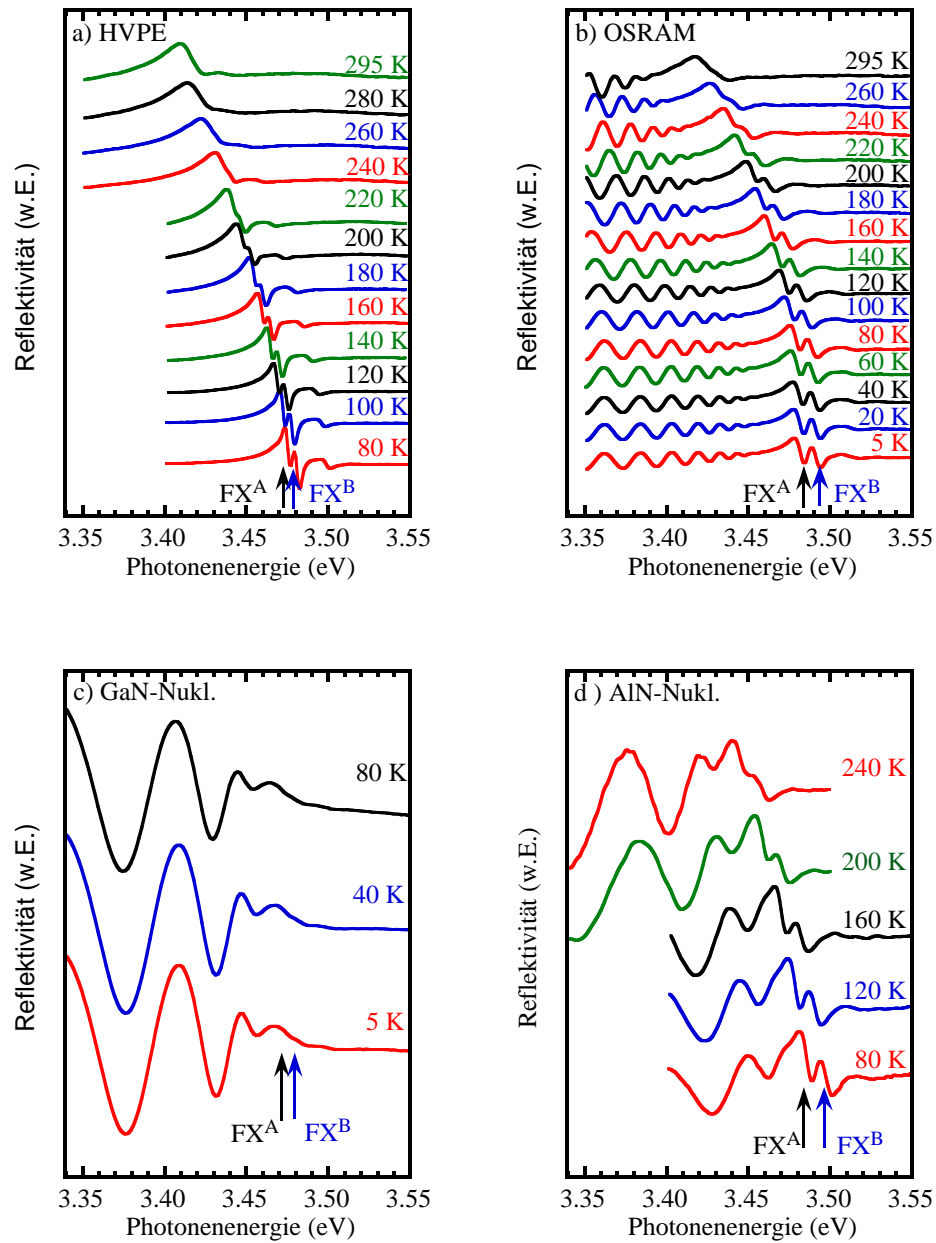


Abbildung 5.1: Temperaturabhängige Reflektivität der Proben a)OSRAM-5796, b)HVPE-H01139, c)ZMN-219(GaN-Nukl.) und d)ZMN-187(AlN-Nukl.); die Pfeile kennzeichnen die zwei Exzitonübergänge.

im Bereich unterhalb des Bandabstandes transparent ist und Reflexionen an der GaN/Substrat-Grenzfläche entstehen. Die HVPE-Probe weist diese Oszillationen nicht auf, denn diese Probe ist  $350\ \mu\text{m}$  dick. Die Kohärenzlänge

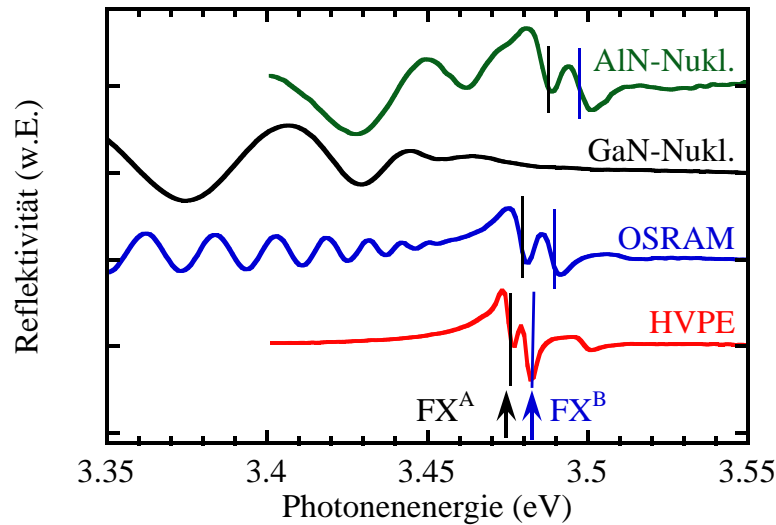


Abbildung 5.2: Vergleich der Reflektivität der Proben ZMN-187 (AlN-Nukl.), ZMN-219 (GaN-Nukl.), HVPE-H01139 und OSRAM-5796 bei  $T = 80$  K, die Pfeile kennzeichnen die zwei Exzitonübergänge.

der Xe-Lampe beträgt  $40 \mu\text{m}$  im Bereich von  $3,0 \text{ eV}$  und es können keine Interferenzerscheinungen entstehen.

Im Bereich zwischen  $3,47 \text{ eV}$  und  $3,5 \text{ eV}$  sieht man im Reflektivitätsspektrum zwei deutliche Signale, die dem freien A ( $\text{FX}^{\text{A}}$ )- und B ( $\text{FX}^{\text{B}}$ )-Exziton zugeordnet werden können. Für die HVPE-Probe erkennt man zusätzlich eine Struktur bei  $3,50 \text{ eV}$ , die durch das freie C ( $\text{FX}^{\text{C}}$ )-Exziton hervorgerufen wird. Für die anderen Proben kann dieses nicht eindeutig aufgelöst werden. Deshalb wurde auf eine Kennzeichnung in den Diagrammen verzichtet.

Die Exzitonенbindungsenergie liegt ab einer Temperatur von  $240 \text{ K}$  im Bereich der thermischen Energie und führt zu einer steigenden Verbreiterung der Übergänge. Weiterhin beobachtet man eine Verschiebung der Exzitonенlinien mit steigender Temperatur zu geringeren Energien.

Abbildung 5.2 zeigt einen Vergleich der Reflektivität der vier GaN-Proben mit den freien A- und B-Exzitonен, gekennzeichnet durch die durchgezogenen Linien für  $T = 80 \text{ K}$ . Die Exzitonенübergangsenergien steigen von der HVPE- zu der OSRAM- und zu der ZMN-Probe mit AlN-Nukleation an. Bei der GaN-Nukleation-Probe konnte aufgrund der starken Verbreiterung kein

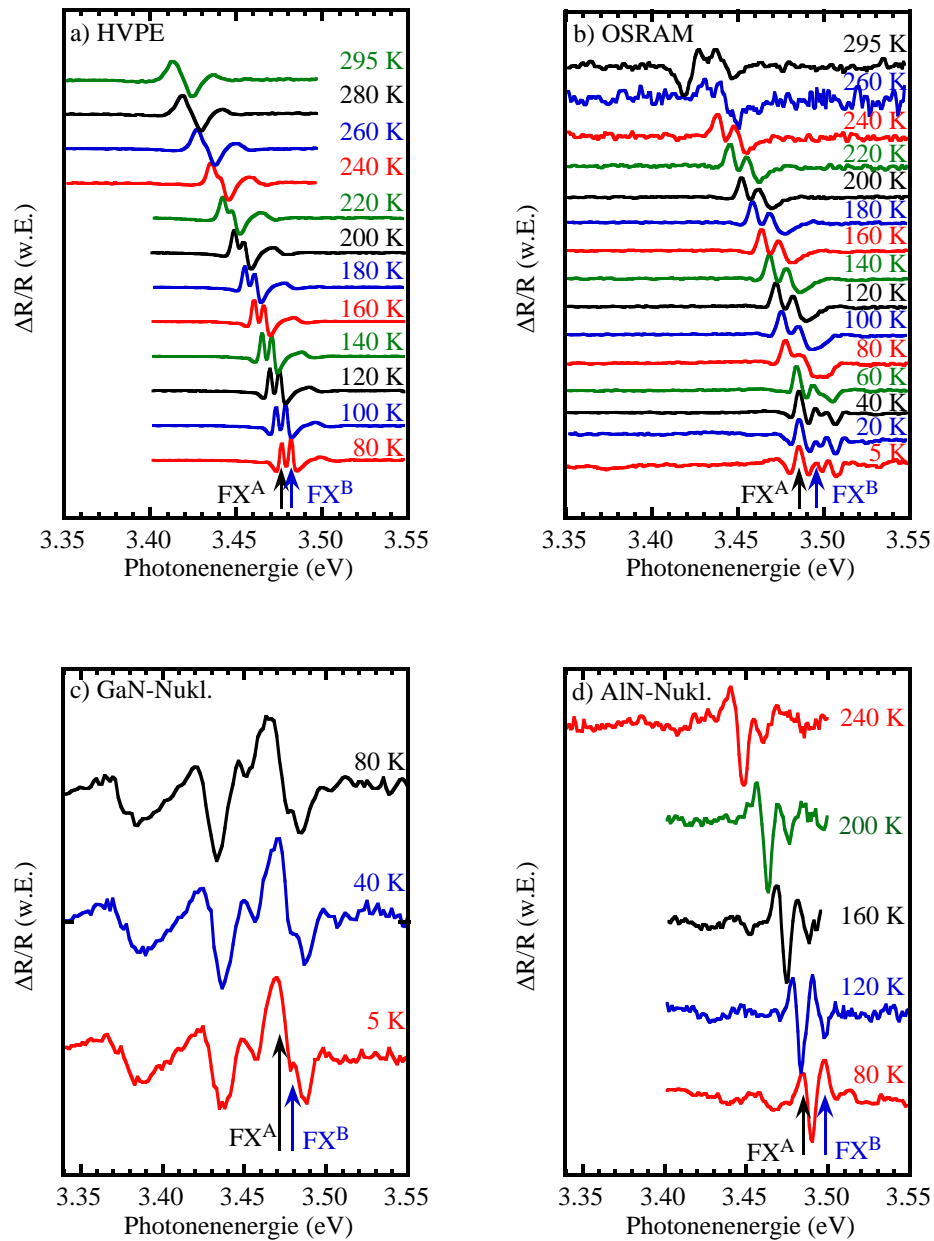


Abbildung 5.3: Temperaturabhängige Photoreflexion der Proben a)HVPE-H01139, b)OSRAM-5796, c)ZMN-219(GaN-Nukl.) und d)ZMN-187 (AlN-Nukl.) dargestellt, die Pfeile kennzeichnen die zwei Exzitonenübergänge.

Übergang aus dem Reflektivitätsspektrum bestimmt werden. Man kann davon ausgehen, dass die HVPE-Probe als Volumenkristall eine vernachlässigbar kleine intrinsische Verspannung aufweist. Die Abscheidung

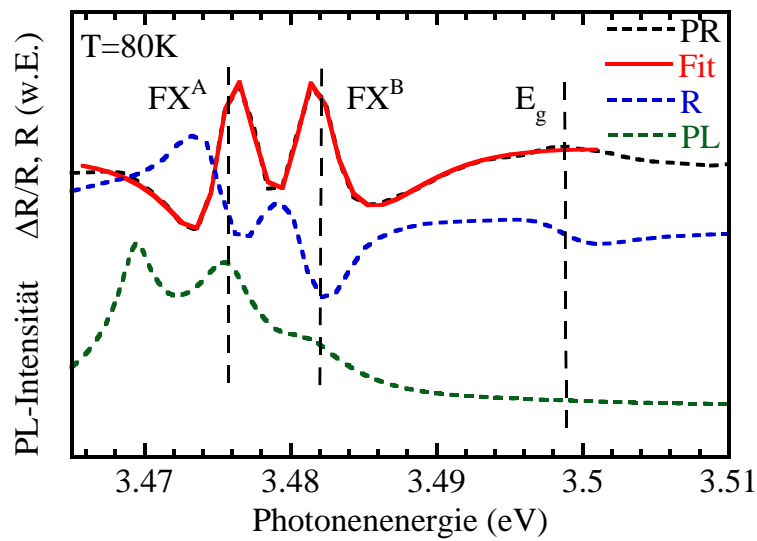


Abbildung 5.4: Anpassung der exzitonischen Übergänge in dem PR-Spektrum mit der ersten Ableitung zweier Lorentzoszillatoren für die HVPE-Probe für  $T = 80$  K nach Gleichung (3.17); exzitonische Übergänge und Bandlücke mit gestrichelten Linien im PR-, Reflexion- und PL-Spektrum gekennzeichnet

der GaN-Schichten auf einem Fremdsupstrat hingegen führt zu Verspannungen. Diese werden hervorgerufen durch die Gitterfehlpassung und die unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Schicht und Substrat. Eine Verspannung verursacht eine Verschiebung der Exzitonenergien. Für eine präzise Bestimmung dieser ist die Photoreflexion geeignet.

In Abbildung 5.3 sind die Photoreflexionsspektren der vier Proben temperaturabhängig dargestellt. Die exzitonischen Übergänge sind aufgrund der hohen Exzitonbindungsenergie von 25 meV mit dieser Methode bis Raumtemperatur auflösbar.

Die Probe 219 besitzt eine Nukleationsschicht aus LT-GaN unterhalb der zu messenden GaN-Schicht, wohingegen die Probe 187 auf einer AlN-Nukleation abgeschieden wurde. Diese bewirkt eine Verschiebung der exzitonischen Übergangsenergien zu höheren Energien, weil die Gitterkonstanten und die thermischen Ausdehnungskoeffizienten von AlN und GaN unterschiedlich groß sind.

Abbildung 5.4 zeigt beispielhaft die Anpassung des PR-Spektrum mittels erster Ableitung zweier Lorentzoszillatoren (Gleichung (3.17)). Weiterhin ist das Reflexionspektrum der HVPE-Probe bei  $T = 80$  K dargestellt und die

Übergangsenergien sind durch zwei gestrichelte Linien in der Abbildung markiert. Das PL-Spektrum verdeutlicht die hervorragende Übereinstimmung der zwei unabhängigen Messmethoden durch die identische energetische Position der Exzitonenübergänge. Die Übergangsenergie der HVPE-Probe bei  $T = 80$  K beträgt 3,475 eV und 3,482 eV für das A- bzw. B-Exziton. Mit der A-Exzitonenbindungsenergie folgt unmittelbar die Bandlücke von 3,499 eV. Die im Experiment bestimmten energetischen Lagen der Exzitonen sind im Anhang in Tabelle A.1 und A.2 für den gesamten Temperaturbereich zusammengefasst.

## 5.2 Photolumineszenz

### 5.2.1 Ergebnisse für $T \leq 80$ K

Für eine unabhängige Bestätigung der PR-Messergebnisse wurden PL-Messungen durchgeführt, um die Übergangsenergien der gebundenen und freien Exzitonen temperaturabhängig zu bestimmen. Der Bereich der tiefen Temperaturen ist für die Detektion der Exzitonen besonders geeignet.

Abbildung 5.5 zeigt ein Übersichtsspektrum der HVPE-Probe bei  $T = 5$  K eingeteilt in die Bereiche der Phononenrepliken, der Zweielektronensatelliten (2ES) und der Exzitonen beginnend bei niedrigen Energien. Die Maxima bei 3,485 eV und 3,480 eV werden dem freien B- bzw. A-Exziton im Grundzustand zugeordnet. Die breite Struktur bei 3,473 eV setzt sich aus den donatorgebundenen Exzitonen  $D_1^0X^A=3,4733$  eV und  $D_2^0X^A=3,4725$  eV zusammen und wird der flachen Donatorstörstelle des Siliziums bzw. des Sauerstoffs zugeordnet. Aus der Differenz zwischen  $FX^A$ - und den  $D_i^0X^A$ -Übergängen ergibt sich die Bindungsenergie der Exzitonen an die Donatoren von 6,7 meV und 7,5 meV für Silizium bzw. Sauerstoff. Freitas et al. [55] berichteten von einer Bindungsenergie von 6,2 meV bzw. 7 meV. Vergleicht man die Übergangsenergien der donatorgebundenen Exzitonen mit denen in Ref. 55 und 56, liegen diese ca. 1 meV höher, aber diese Differenz ist im Rahmen der Messgenauigkeit vertretbar. Die Halbwertsbreite der donatorgebundenen Exzitonen beträgt 0,94 meV und 0,73 meV für Sauerstoff bzw. Silizium. Dies bestätigt somit einen hohen Grad an Kristallqualität beim Wachstum. Die Intensität des  $D_{Si}^0X^A$  ist größer als bei Freitas und schließt möglicherweise auf einen höheren Anteil an Siliziumstörstellen im Vergleich zu Sauerstoff in der

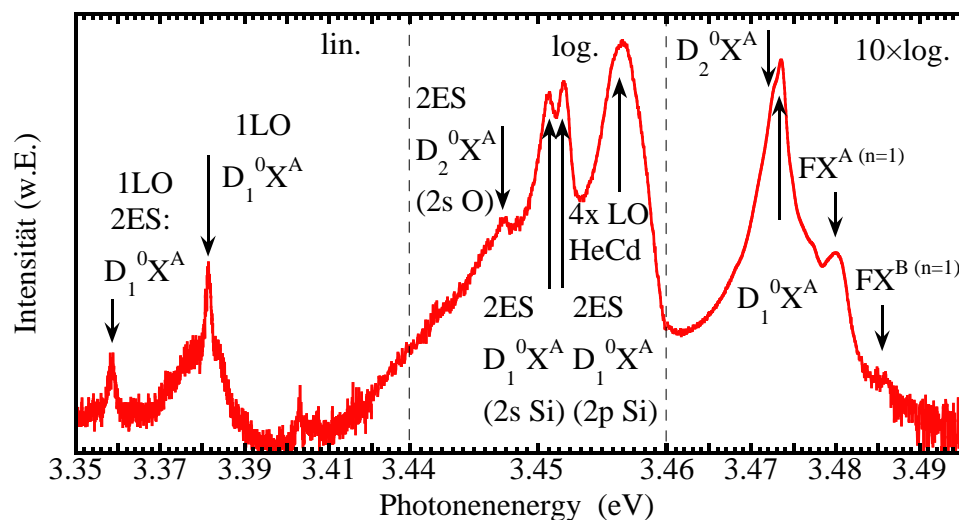


Abbildung 5.5: PL-Spektrum der HVPE-Probe bei  $T = 5$  K mit den freien A-, B-, den donatorgebundenen  $D_1^0X^A$ -,  $D_2^0X^A$ -Exzitonen, den 2ES- und Phononenübergängen; Skalierungsfaktoren sind im Diagramm oben rechts angegeben

Probe hin. Jedoch erwartet man in siliziumreichen Proben ein ausgeprägtes Signal des akzeptorgebundenen Exzitons bei 3,466 eV [33,57], welches bei der untersuchten HVPE-Probe nicht nachzuweisen war.

Im Bereich um 3,45 eV sind die sogenannten Zwei-Elektronen-Satelliten zu erkennen. Diese entstehen durch die Rekombination des donatorgebundenen Exzitons, wenn dabei ein Elektron des Donators in einen angeregten 2s (2p, 3s,...)-artigen Zustand angehoben wird. Das 2ES-Signal ist um die Differenz des angeregten Zustandes zum Grundzustand des Donators abgesenkt. Unter Annahme der Gültigkeit des Wasserstoffmodells und der Effektivmassenähnerung für die Exzitonen entspricht diese Differenz  $3/4$  der Bindungsenergie der Elektronen an den Donator. Die aus dem PL-Spektrum bestimmte Bindungsenergie kann nun weiterhin zur Identifikation der Störstellen genutzt werden. Die Bindungsenergien für Si auf einem Ga-Platz und O auf einem N-Platz wurden aus magneto-optischen Experimenten auf 30,2 meV bzw. 33,2 meV bestimmt [58]. Der 2ES-Übergang des  $D_1^0X^A$ -Exzitons befindet sich 22,3 meV tiefer bei 3,451 eV und ergibt eine Donatorbindungsenergie von 30 meV für Silizium. Die hervorragende Probenqualität ermöglicht die Auflösung der

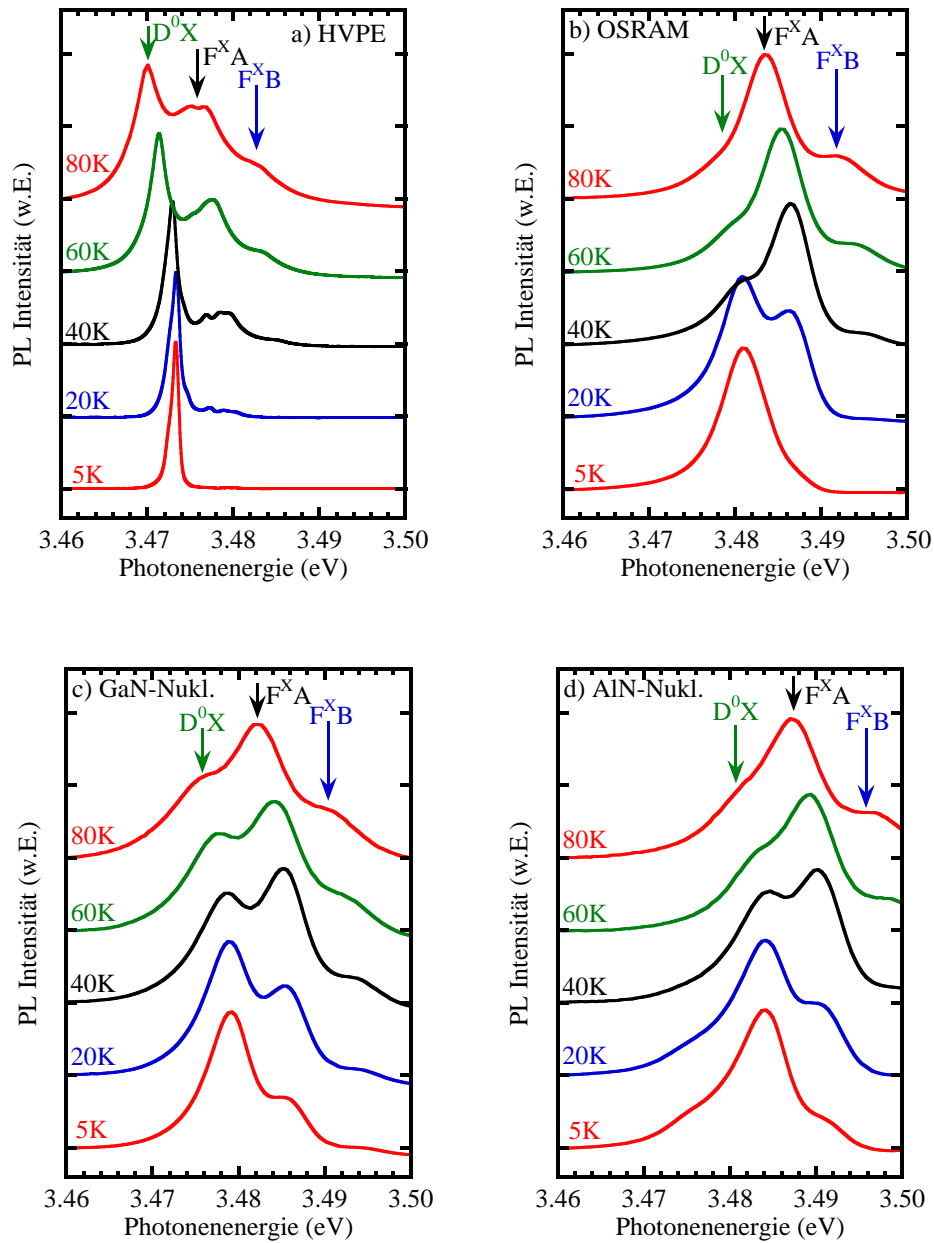


Abbildung 5.6: Temperaturabhängigkeit der PL-Spektren von  $T = 5$  K bis 80 K der Proben a) ZMN-219, b) ZMN-187, c) HVPE-H01139, d) OSRAM-5796; Donatorgebundenes Exziton ist mit grünem Pfeil und die freien A- und B-Exzitonen sind mit schwarzem bzw. rotem Pfeil gekennzeichnet

2ES-Übergänge der Si- und O-Donatoren im Bereich von 3,45 eV. Analog wird für Sauerstoff eine Übergangsenergie von 3,447 eV und eine Bindungs-

## Kapitel 5. Untersuchungen an GaN

energie von 33 meV ermittelt.

Das deutliche Signal bei 3,457 eV kann möglicherweise der vierfachen Phononenreplik der He-Cd-Laserlinie (3,815 eV) zugeordnet werden. Die longitudinal optische Phononenenergie (LO) im GaN beträgt 92 meV [59].

Das 1LO- $D_1^0X$ -Signal bei 3,381 eV entspricht der einfachen Phononenreplik des neutralen Si-Donators. Der 1LO-2ES- $D_1^0X$ -Übergang bei 3,358 eV hat seinen Ursprung in der einfachen longitudinalen optischen Phononenreplik (Verschiebung um 92 meV) vom 2ES-Übergang (Verringerung um 22,3 meV) des gebundenen Exzitons an Silizium.

Die Identifizierung von 2ES, freien bzw. gebundenen Exzitonen und Phononenrepliken in den PL-Spektrum bei 5 K verweist auf eine gute Wachstumsqualität der HVPE-Probe. Somit ist diese Probe als Referenz für die Bestimmung der Verspannung aus der Verschiebung der Exzitonenenergien von GaN-Proben mit Substrat hervorragend geeignet.

Abbildung 5.6 zeigt die temperaturabhängigen Untersuchungen der vier GaN-Proben im Bereich von 5 K bis 80 K. Bei tiefen Temperaturen ist der  $D^0X$ -Übergang dominant, weil die thermische Energie kleiner als die Exzitonenbindungsenergie (25 meV bei GaN) ist. Die Differenz zum freien A-Exziton beträgt für alle Proben 7 meV bei  $T = 5$  K. Die Störstellenbindungsenergie von Sauerstoff beträgt nach Freitas et al. [55] 7 meV und somit ist der neutrale Donator des gebundenen  $D^0X$ -Exzitons als Sauerstoff zu identifizieren. Mit steigender Temperatur sinkt die relative Signalintensität des gebundenen Exzitons und die des freien A-Exzitons steigt an. Da die thermische Energie bei Raumtemperatur ca. 25 meV beträgt, erwartet man für die freien Exzitonen im GaN thermische Stabilität bis  $T = 295$  K. Das donatorgebundene Exziton besitzt eine Bindungsenergie von 7 meV und ab einer Temperatur von ungefähr 80 K beginnen die Exzitonenbindungen an den Störstellen aufzubrechen. Bei höheren Temperaturen ist auch das freie B-Exziton erkennbar, jedoch sind die Übergänge stark verbreitert, so dass das C-Exziton nicht aufgelöst werden kann.

Ein Teil der Arbeit beschäftigt sich mit der Bestimmung der Temperaturabhängigkeit der exzitonischen Übergangsenergien aus Photolumineszenzmessungen. Abbildung 5.7 zeigt beispielhaft die Anpassung eines PL-Spektrums der HVPE-Probe bei  $T = 80$  K. Die Temperatur ist durch die Intensitätsverhältnisse untereinander besonders geeignet zur Auswertung der drei charakteristischen  $D^0X$ -,  $FX^A$ - und  $FX^B$ -Exzitonenübergänge. Der  $D^0X$ -



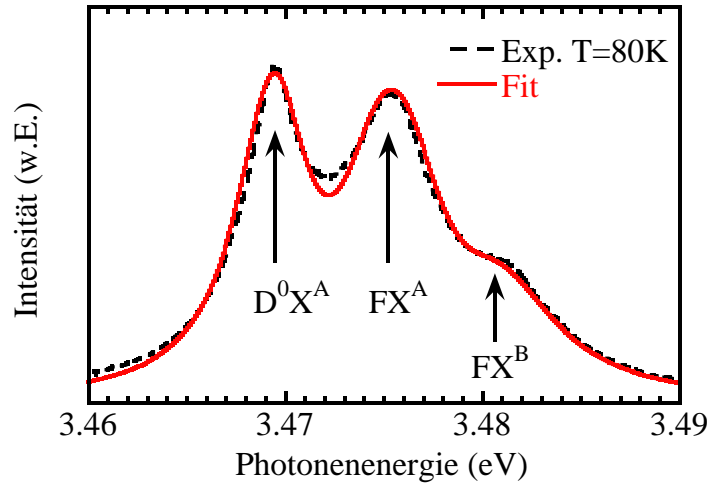


Abbildung 5.7: Anpassung des donatorgebundenen und des freien B-Exzitons mittels Lorentzoszillator, wohingegen das A-Exziton mit einem Gaussoszillator der HVPE-Probe bei  $T = 80$  K angeglichen wurde

und der  $\text{FX}^{\text{B}}$ -Übergang wurden jeweils mit einem Lorentzoszillator angepasst, wohingegen für das  $\text{FX}^{\text{A}}$ -Exziton die Anpassung mittels Gaußoszillator zum besten Ergebnis führte.

In Abbildung 5.8 sieht man einen Vergleich der energetischen Lage des A-Exzitons, bestimmt aus PL-Messungen (siehe Kapitel 3.6) im Bereich von 5 K bis 80 K, für die vier charakteristischen Proben. Die Energieverschiebung der Proben mit GaN- und AlN-Nukleation zu höheren Energien im Vergleich zur HVPE -Probe oder homoepitaktischem Material nach Thonke et al. [26] ist mit einer kompressiven Verspannung der Proben zu erklären.

Die Gitterkonstante für die Probe 187 beträgt  $c = 5,188 \text{ \AA}$ . Im Vergleich zur Gitterkonstante von unverspanntem GaN  $c = 5,185 \text{ \AA}$  [18] besitzt die Probe 187 somit eine Verspannung von  $\epsilon_{xx} = -1,19 \cdot 10^{-3}$ . Dies führt zu einer Erhöhung der Exzitonübergangsenergie ( $\text{FX}^{\text{A}}$ ) um 9,9 meV bei Raumtemperatur, berechnet nach Gleichung (2.17). Mit Hilfe der thermischen Ausdehnungskoeffizienten von GaN und Saphir [18, 60] kann man die Verspannung für  $T = 80 \text{ K}$  auf  $\epsilon_{xx} = -1,28 \cdot 10^{-3}$  bestimmen. Somit steigt die Bandlücke aufgrund der höheren Verspannung bei 80 K um 10,6 meV im Vergleich zu einer homoepitaktischen GaN-Probe an.

Der  $\text{FX}^{\text{A}}$ -Übergang der Probe mit AlN-Nukleationsschicht liegt 12,1 meV höher im Vergleich zur HVPE-Probe. Die Differenz der Übergangsenergie

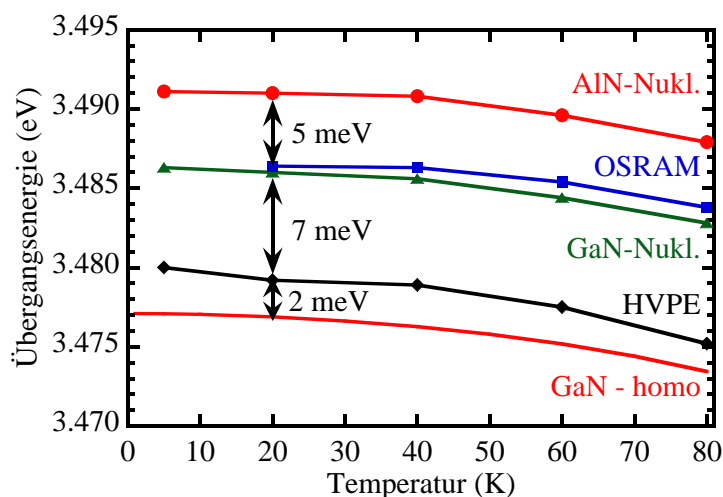


Abbildung 5.8: Temperaturabhängigkeit des  $\text{FX}^{\text{A}}$ -Übergangs von  $T = 5 \text{ K}$  bis  $80 \text{ K}$  für die verspannten Proben 187 (AlN-Nukl.), 219 (GaN-Nukl.) und OSRAM im Vergleich zu der unverspannten HVPE-Probe und homoepitaktischem GaN nach Thonke et al. [26]

aus der Berechnung und dem Experiment ergibt sich zu  $1,5 \text{ meV}$  und liegt im Rahmen der Messgenauigkeit. Die Gitterkonstante der Probe 219 wurde mit einer Röntgenmessung auf  $5,187 \text{ \AA}$  bestimmt. Die daraus resultierende Verspannung hätte eine Verschiebung von  $6 \text{ meV}$  bei  $80 \text{ K}$  zur Folge und liegt im Bereich der experimentell bestimmten Differenz der HVPE- und ZMN 259-Probe von  $7 \text{ meV}$ . Die Gitterkonstanten der OSRAM-Probe sind nicht bekannt, aber man kann tendenziell eine kompressive Verspannung nachweisen.

Die Verschiebung der Übergangsenergien der drei charakteristischen Exzitonen ist in Abbildung 5.9 für die unverspannte HVPE-Probe, die OSRAM (GaN-Nukl.)-Probe, sowie die Proben 219 (GaN-Nukl.) und 187 (AlN-Nukl.) bei  $T = 80 \text{ K}$  dargestellt. Der  $\text{D}^0\text{X}$ - und der  $\text{FX}^{\text{B}}$ -Übergang zeigen ebenfalls eine verspannungsbedingte energetische Verschiebung. Diese erfolgt im gleichem Maße wie es für das  $\text{FX}^{\text{A}}$ -Exziton bereits temperaturabhängig in Abbildung 5.8 gezeigt wurde. Die Ermittlung der biaxialen Verspannung  $\epsilon_{xx}$  erfolgt aus der Verschiebung der A-Exzitonen der drei verspannten Proben bezogen auf die unverspannte HVPE-Probe. Dabei wird die Formel

$$\epsilon_{xx} = \frac{E_{\text{FX}^{\text{A}}} - E_{\text{FX}^{\text{A}}_{\text{HVPE}}}}{-8,274 \text{ eV}}, \quad (5.1)$$

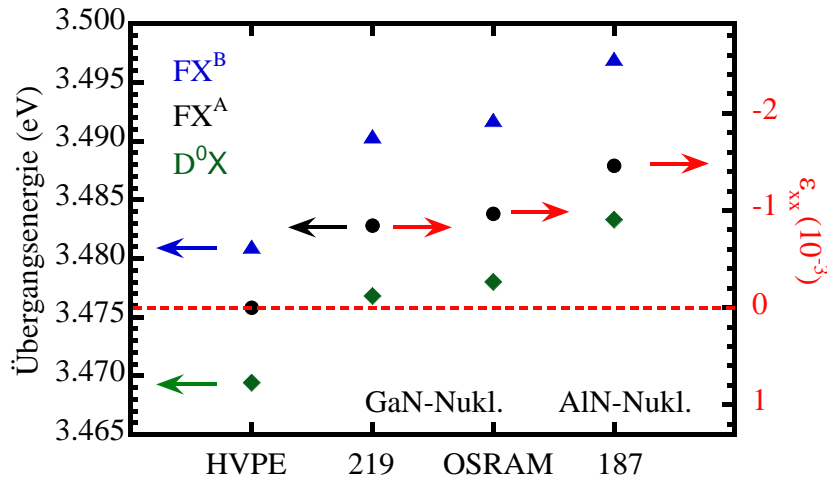


Abbildung 5.9: Abhängigkeit des  $D^0X$ -,  $FX^A$ - und  $FX^B$ -Exzitonübergangs von der Verspannung bei  $T = 80\text{ K}$  für die drei verspannten Proben auf GaN- bzw. AlN-Nukleationsschicht bezogen auf die unverspannte HVPE-Referenzprobe. Die schwarzen Punkte symbolisieren gleichzeitig  $E_{FX^A}$  und  $\epsilon_{xx}$ .

erhalten aus der Gleichung (2.17) und den Parametern aus Refs. 29 und 30, zur Berechnung der Verspannung verwendet. Eine genaue Ermittlung der Übergangsenergie des B-Exzitons zeigt im Vergleich zum A-Exziton eine geringfügig größere Energieverschiebung mit der Verspannung. In Gleichung (2.18) wird dies berücksichtigt und kann ebenfalls zur Bestimmung der Verspannung aus der Verschiebung der B-Exzitonenergie benutzt werden. Aufgrund der Übersichtlichkeit wurde auf eine Darstellung der Verspannung, ermittelt aus der B-Exzitonenergie, in Abbildung 5.9 verzichtet.

### 5.2.2 Ergebnisse für $T \geq 80\text{ K}$

Eine Bestimmung der Exzitonenergien im Temperaturbereich von 5 K bis 295 K wurde an der HVPE-Probe durchgeführt. Dazu ist in Abbildung 5.10 die Temperaturstaffel der Spektren und die Verschiebung der energetischen Lage der Exziton dargestellt. Auch hier ist bei tiefen Temperaturen das donatorgebundene Exziton deutlich ausgeprägt und mit steigender Temperatur nimmt die relative Signalintensität, vor allem des freien A-Exzitons zu. Bei  $T = 120\text{ K}$  übertrifft das A-Exziton die Intensität des  $D^0X$ -Übergangs und die thermische Energie verbreitert den A-Übergang mit steigender Tem-

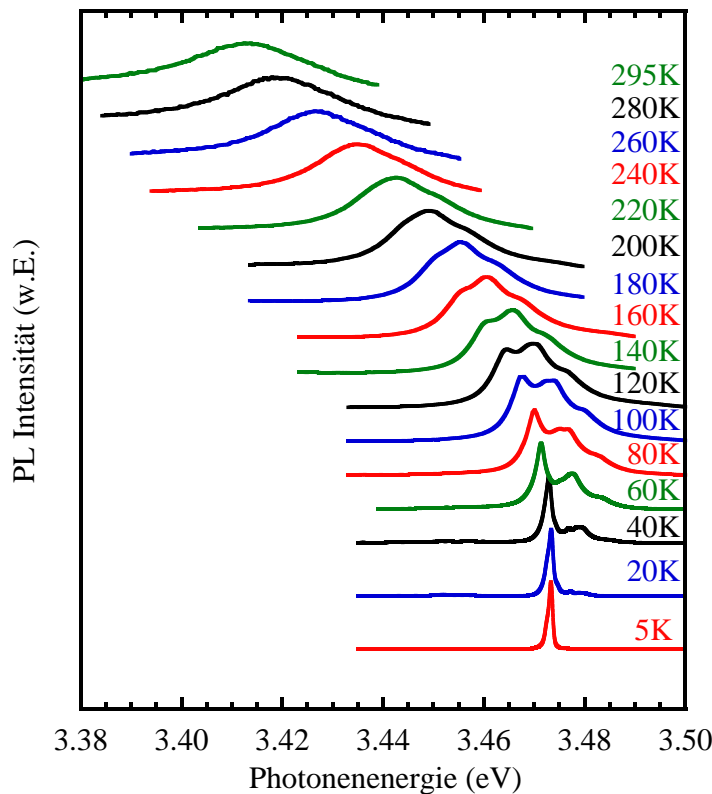


Abbildung 5.10: Temperaturabhängigkeit der PL-Spektren für die HVPE-Probe

peratur zusätzlich.

Abbildung 5.11 zeigt den Vergleich der PL-Ergebnisse mit homoepitaktischem GaN nach Thonke et al. [26]. Die ermittelten Energien wurden temperaturabhängig mit der Varshni-Formel (Gleichung (2.9)) berechnet. Die Parameter  $E_g(0) = 3,502 \text{ eV}$ ,  $\alpha = 0,79 \text{ meV/K}$  und  $\beta = 1000 \text{ K}$  von Thonke et al. [26] wurden für die Berechnung der Temperaturabhängigkeit der Exzitonübergänge verwendet.

Die experimentell bestimmten Übergangsenergien der HVPE-Probe liegen bei tiefen Temperaturen oberhalb der Literaturdaten. Bei Raumtemperatur sind jedoch die Übergangsenergien kleiner als für das homoepitaktische Material. Die relativ große Abweichung der Energien vom  $\text{FX}^{\text{A}}$ -Exziton bei Raumtemperatur entsteht dadurch, dass die energetische Lage der Exzitonen von Thonke nur bis 240 K experimentell bestimmt wurden. Die Ermittlung der Übergangsenergien bis Raumtemperatur wurde mit den erwähnten Parametern extrapoliert. Die in dieser Arbeit durchgeführten PL- und PR-Messungen weisen eine sehr gute Übereinstimmung für den gesamten Tem-

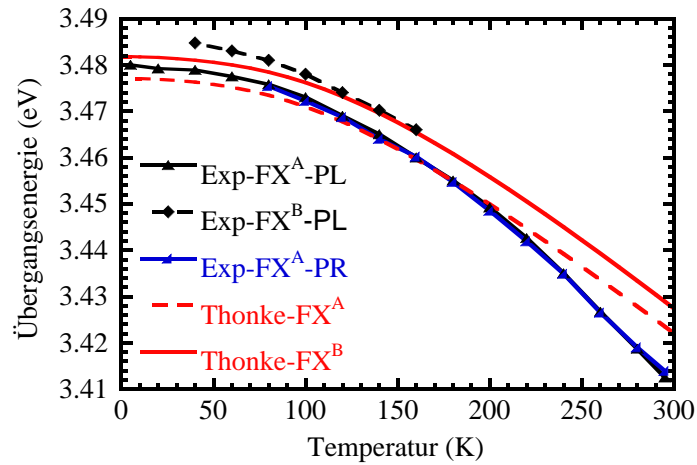


Abbildung 5.11: Temperaturabhängigkeit des FX<sup>A</sup>- und FX<sup>B</sup>-Übergangs von 5 K bis 295 K aus PL- und PR-Messungen für die HVPE-Probe im Vergleich mit experimentellen Daten für homoepitaktisches GaN nach Thonke [26]

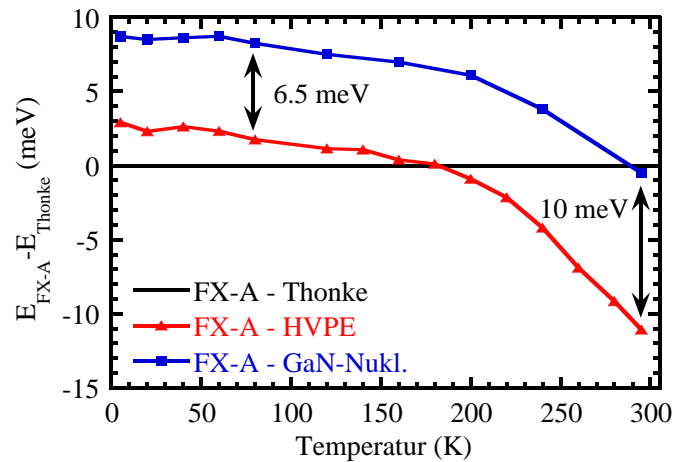


Abbildung 5.12: relative Verschiebung des A-Exzitonenübergangs im Temperaturbereich von  $T = 5$  K bis 295 K für HVPE- und GaN-Probe 219 bezogen auf homoepitaktische Schicht nach Thonke [26]

peraturbereich auf. Deshalb werden diese Daten im folgenden als Referenz für unverspanntes GaN angenommen. Dies wird auch durch die folgende Betrachtung unterstützt.

Abbildung 5.12 stellt die relative Energieverschiebung des A-Exzitons der HVPE- und der GaN/Saphir-Probe mit GaN-Nukleationsschicht, bezogen auf die Übergangsenergie nach Thonke [26], dar. Der temperaturabhängige Verlauf der Übergangsenergie der HVPE- und der ZMN-Probe stimmen gut überein. Es ist eine Blauverschiebung zwischen einer substratfreien und einer auf Saphir abgeschiedenen GaN-Schicht, wegen der unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten von GaN und Saphir, von 0,7 meV zu erwarten. Jedoch wird eine Verschiebung zwischen Raumtemperatur und 80 K von 3,5 meV beobachtet. Diese ist auf die Ungenauigkeit in der Bestimmung der Übergangsenergie bei Raumtemperatur von  $\pm 3$  meV durch den stark verbreiterten A-Exzitonübergang zurückzuführen. Somit liegt die Blauverschiebung durch Absenken der Temperatur im Rahmen der Messunsicherheit. Die Differenz bei 80 K zwischen Thonke und der Probe 219 liegt bei 8 meV. Diese ist sehr groß und kann nicht mit der Messungenauigkeit begründet werden. Weiterhin ändert sich die Verspannung von Raum- zu tiefen Temperaturen signifikant von unverspannt zu kompressiv und wird um ein Vielfaches überschätzt. Folglich ist die HVPE-Probe für die Bestimmung der Verspannung bestens geeignet, denn sie gibt den temperaturabhängigen Verlauf der Verspannung im Rahmen der Messunsicherheit gut wieder. Die Ursache für die stark abweichenden Daten in Ref. 26 kann hier nicht geklärt werden.

# Kapitel 6

## Untersuchungen an den AlGaN/GaN-Heterostrukturen

Die Charakterisierung der AlGaN-Proben setzt eine Kenntnis der Schichtdicken voraus. Dazu wurden Ellipsometriemessungen durchgeführt. Der hauptsächliche Teil dieses Kapitels dient der Analyse der FKO aus ER-Messungen, um die Feldstärke in der AlGaN-Barriere bestimmen zu können. Die spannungsabhängige Ermittlung der Feldstärke in der Barriere führt zu einer 2DEG-Dichte.

Die Bestimmung des Polarisationsgradienten an der AlGaN/GaN-Grenzfläche aus ER-Messungen erfordert die Kenntnis der Verarmungsfeldstärke und des Al-Gehaltes. Letzterer wird aus Röntgenmessungen in Kombination mit der optischen Bestimmung der Bandlücke ermittelt. Die Verarmung des Elektronengases liefert die temperaturabhängige Feldstärke zur Bestimmung des Polarisationsgradienten. Ein Vergleich mit theoretischen Berechnungen von  $\Delta P$  erfordert die Werte für den Verspannungszustand und die Gitterkonstanten der GaN- und AlGaN-Schicht.

### 6.1 Ellipsometrie

Für die Bestimmung der Schichtdicken und der Bandlücke von GaN und AlGaN wurden spektralellipsometrische Messungen durchgeführt. Dabei wurde bei verschiedenen Einfallswinkeln zwischen  $58^\circ$  und  $74^\circ$  die zwei charakteristischen Größen der Ellipsometrie  $\Psi$  und  $\Delta$  bestimmt. Zur Ermittlung der Schichtdicken der GaN-Proben wurde gemäß der jeweiligen Probenstruktur (Abbildung 4.1) ein entsprechendes Vielschichtmodell unter Berücksichtigung

der Grenzflächenschichten und Oberflächenrauhigkeit verwendet. Die verwendeten dielektrischen Funktionen von GaN und AlN sind in Ref. 61 zusammengefasst. Die Anpassung der experimentellen Daten mit Hilfe dieser DF liefert die Schichtdicken in Tabelle 4.1.

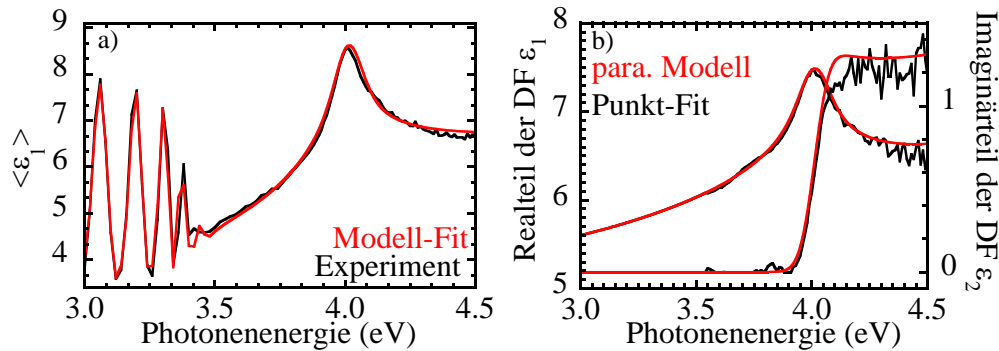


Abbildung 6.1: a) Darstellung des Realteils der effektiven dielektrischen Funktion einer AlGaIn-Probe ohne Deckschicht für einen Einfallswinkel von 58°; b) Anpassung des Real- und Imaginärteils der AlGaIn-Schicht mit einem parametrischen Modell an den Punkt-für-Punkt-Fit

Bei den Heterostrukturen befindet sich zusätzlich eine AlGaIn-Schicht auf der GaN-Schicht. Abbildung 6.1 a) zeigt den Realteil der effektiven DF  $\langle \epsilon_1 \rangle$  für eine Heterostruktur. Man erkennt, dass das Spektrum bei Raumtemperatur unterhalb der GaN-Bandlücke (3,44 eV) ein ausgeprägtes oszillatorisches Verhalten aufweist. Die Ursache ist, wie in den PR-Spektren, die Transparenz des GaN unterhalb der Bandlücke. Dies führt zur Entstehung von Schichtdickeninterferenzen (vergleiche Abbildung 3.3). Oberhalb der Bandlücke von GaN ist zusätzlich eine ausgeprägte Struktur zu erkennen, die der Bandlücke des AlGaIn zugeordnet wird. Abbildung 6.1 b) zeigt den Realteil  $\epsilon_1$  und den Imaginärteil  $\epsilon_2$  der AlGaIn-Schicht. Der Punkt-für-Punkt-Fit repräsentiert die unabhängige Anpassung von  $\epsilon_1$  und  $\epsilon_2$  für jede einzelne Photonenenergie im Rahmen des entwickelten Schichtmodells der Proben. Das parametrische Modell stellt eine analytische Kramers-Kronig-konsistente Beschreibung der DF über den gesamten Energiebereich dar. Die gute Übereinstimmung beider Kurven zeigt die Richtigkeit des verwendeten Schichtmodells und dessen hervorragende Beschreibung der optischen Eigenschaften der Probe. Die parametrische Anpassung ermöglicht den direkten Zugang zur energetischen



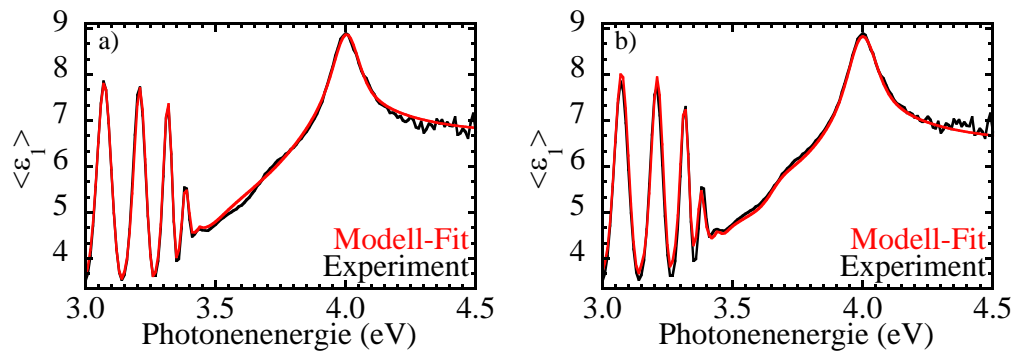


Abbildung 6.2: a) Realteil der effektiven dielektrischen Funktion einer AlGaIn-Schicht bei einem Einfallswinkel von  $58^\circ$  ohne und b) mit Deckschicht dargestellt

Lage und Verbreiterung des AlGaIn-Signals im Bereich der Bandlücke. Oberhalb der AlGaIn-Schicht wurden bei einigen Proben weitere 2 nm GaN abgeschieden um die Oberfläche vor Umwelteinflüssen wie zum Beispiel Luftsauerstoff zu schützen. Dazu wurde laut Wachstumsprotokoll das Ausschalten der TEGa-Zufuhr gegenüber der TMAI-Zufuhr lediglich um 15 Sekunden verzögert.

In Abbildung 6.2 a) ist die Anpassung des Realteils der effektiven dielektrischen Funktion beispielhaft für AlGaIn-Proben mit einer GaN-Deckschicht dargestellt. Es ist eine ausgeprägte Struktur bei 3,72 eV zu erkennen, die bei allen Messungen an Proben mit zusätzlicher Deckschicht festgestellt wurde. Die Anpassung mit GaN als abschließende Schicht liefert eine Abweichung in diesem Bereich. Das ausgeprägte Signal liegt zwischen den Bandlücken von GaN und  $\text{Al}_{0,218}\text{Ga}_{0,782}\text{N}$ . Dies lässt vermuten, dass diese Struktur durch eine Mischkristallbildung mit einem Al-Gehalt zwischen 0 % und 21,8 % bei dieser Probe entstanden ist. Gleichet man diese Struktur hingegen mit einem Aluminiumanteil im Bereich von 15 % in der obersten Schicht an, so stimmt das Modell besser mit dem Experiment überein (vergleiche Abbildung 6.2 b)). Weiterhin wurden Proben mit anderem Al-Anteilen ellipsometrisch vermessen und auch hier ist die Struktur bei 3,72 eV bei allen Proben zu erkennen. Baeumler et al. [62] berichteten ebenfalls von dieser Besonderheit in der Ellipsometriemessung und verwiesen als mögliche Ursache auf einen Band-zu-Band-Übergang der durch Zustände des 2DEG an der AlGaIn/GaN-Grenzfläche hervorgerufen wird. Diese Behauptung wird widerlegt durch

Messungen an AlGa<sub>N</sub>-Proben ohne Deckschicht, bei denen dieses Signal nicht zu erkennen ist. Die Schichtdicken für die untersuchten AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub>-Proben in Tabelle 4.2 zusammengefasst.

Da die Herkunft der Struktur durch Spektrellipsometrie nicht eindeutig zu klären ist, wurden daraufhin Photostrommessungen an den Proben durchgeführt, um unterschiedliche Interpretationsmöglichkeiten zu be- oder widerlegen.

## 6.2 Photostrom

Photostrommessungen wurden nach der Beschreibung in Kapitel 3.2 an verschiedenen Proben mit Ga<sub>N</sub>-Deckschicht temperaturabhängig durchgeführt. Im spannungslosen Fall existiert ein elektrisches Feld, was zur Trennung der erzeugten Elektron-Loch-Paare führt. Somit ist der Photostrom proportional zur Absorption der Ladungsträger im AlGa<sub>N</sub> und Ga<sub>N</sub> und ermöglicht Aussagen zur Feldstärkeabhängigkeit.

In Abbildung 6.3 ist die eingestrahlte Photonenenergie und das daraus resultierende Photostromsignal dargestellt. Allen Kurven gemeinsam ist das Maximum bei 4,0 eV, welches durch die Absorption des Lichtes im AlGa<sub>N</sub> entsteht. Die erzeugten Ladungsträger (LT) werden durch das bereits vorhandene elektrische Feld, verursacht durch die Polarisierung im AlGa<sub>N</sub>, getrennt und können somit zum Photostrom beitragen. Zwischen 1 V und -2 V ist kein nennenswertes Photostromsignal des darunterliegenden Ga<sub>N</sub> zu erkennen. Hier werden die LT nicht getrennt, sondern die Elektronen bleiben im Potentialtopf des 2DEG gefangen. Erhöht man die Spannung jedoch in negative Richtung, so wird das Elektronengas verarmt und ein elektrisches Feld im Ga<sub>N</sub> aufgebaut. Jetzt werden auch die hier erzeugten LT getrennt und das Photostromsignal im Spektralbereich des Ga<sub>N</sub> (3,44 eV) steigt drastisch an.

Die Proben 202 und 275 weisen unabhängig von der Temperaturmessung die Struktur, wie sie in der Ellipsometrie beobachtet wurde, auf. Bei 5 K liegt das Signal bei 3,8 eV und bei 80 K im Bereich von 3,78 eV. Die thermische Ausdehnung der Kristalle verschiebt die Bandlücke der Halbleiter. Bei  $T = 295$  K liegt die Struktur bei 3,72 eV und ist im Bereich der energetischen Position, die aus der Ellipsometriemessung bestimmt wurde.

Die Vermutung über die Ursache des Signals durch das 2DEG liegt nahe. Die

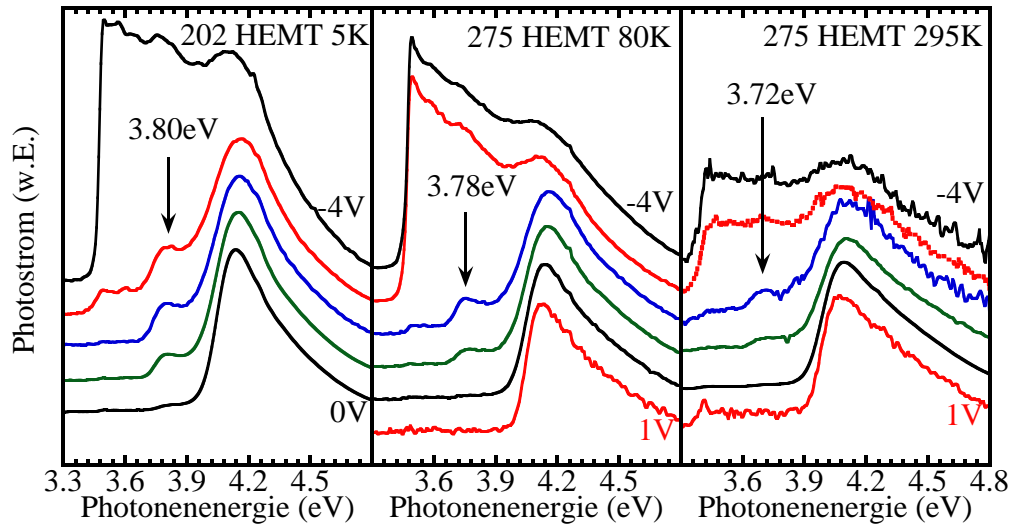


Abbildung 6.3: Photostromspektren bei verschiedenen Temperaturen und Spannungen für die AlGaIn/GaN-Heterostrukturen 202 und 275

2DEG-Dichte liegt bei positiven Spannungen im Bereich von  $7 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$ , wohingegen sich bei einer Spannung von  $-3 \text{V}$  das Elektronengas verarmt, das heißt der Bandverlauf geht in den Flachbandfall über. Die Struktur ist jedoch bei dieser Spannung deutlich zu erkennen, obwohl kein 2DEG vorhanden ist. Deshalb kann die Herkunft durch ein Elektronengas an der AlGaIn/GaN-GF ausgeschlossen werden. Der Verlauf der Elektronengasdichte in Abhängigkeit von der angelegten Gleichspannung wird im späteren Teil der Arbeit dargestellt.

Eine weitere mögliche Erklärung für dieses Maximum könnte sein, dass das GaN an der Oberfläche einen Quantengraben bildet, eingeschlossen von der AlGaIn-Barriere und der natürlichen Oxidschicht zwischen GaN und dem Oxid an der Oberfläche. Jedoch sieht man in den PC-Spektren keine Verschiebung der energetischen Position mit dem Verändern der Spannung. Deshalb handelt es sich um keinen Quantengraben, denn mit Erhöhen der negativen Spannung ändert sich die elektrische Feldstärke, und für die Energieeigenwerte ist dann eine Energieverschiebung aufgrund des Quanten-Stark-Effekts zu erwarten.

## 6.3 Elektroreflexion

### 6.3.1 Elektroreflexion an der Deckschicht

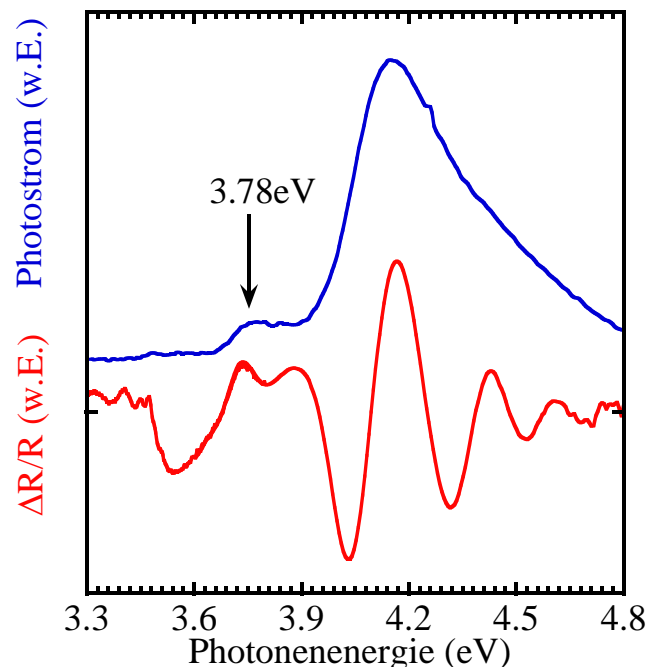


Abbildung 6.4: Darstellung der Photostromspektrums und der Elektroreflexionsmessung an der Probe 275 bei  $T = 80$  K und einer Gleichspannung von  $-1$  V

Ein ganz wesentlicher Teil dieser Arbeit ist die Bestimmung der internen elektrischen Felder und Elektronengasdichten an der AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub>-Grenzfläche der Heterostrukturen. Jedoch soll zunächst die Problemstellung des neu aufgetretenen Maximums aus der Ellipsometrie- und Photostrommessung mit Hilfe der Elektroreflexion abschließend behandelt werden.

Abbildung 6.4 zeigt die PC- und ER-Messung für die Probe 275 bei einer Temperatur von 80 K und einer angelegten Gleichspannung von  $-1$  V. Es wird deutlich, dass sich die Struktur aus der PC-Messung bei  $3,78$  eV an gleicher Energieposition im ER-Spektrum befindet. Bei der Energie von  $4,0$  eV ist die AlGa<sub>N</sub>-Bandlücke deutlich zu erkennen und oberhalb dieser befinden sich Oszillationen, die dem Franz-Keldysh-Effekt zugeschrieben werden.

Misst man die ER-Spektren für verschiedene Gleichspannungen, so ergibt sich das in Abbildung 6.5 dargestellte Bild. Die FKO, die im Spannungsbereich von  $1$  V bis  $-4$  V mit rot gestrichelten Linien markiert sind, stellen ein

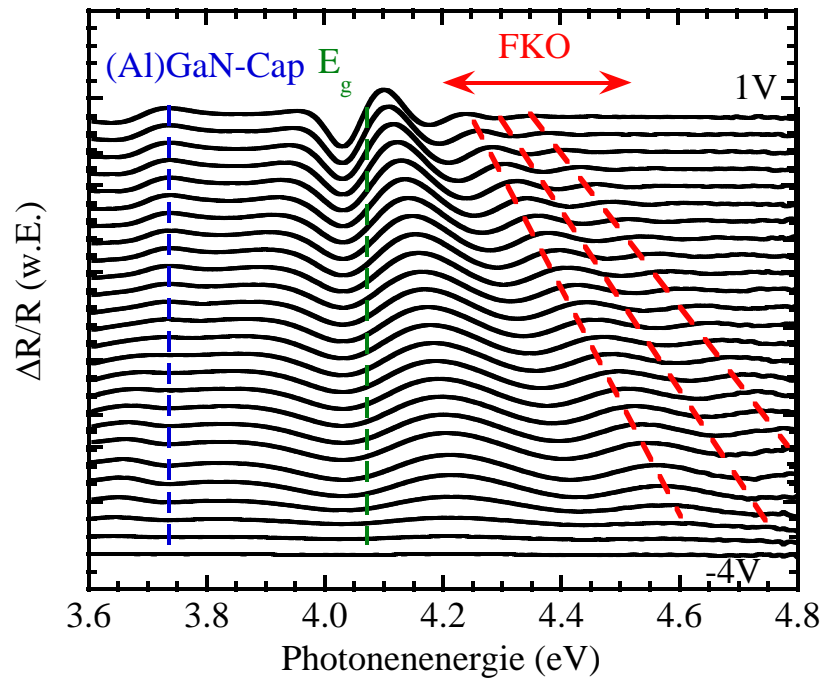


Abbildung 6.5: Spannungsabhängige ER-Serie mit gekennzeichneter Bandlücke, FKO und unbekannter Struktur bei 3,74 eV für  $T = 80$  K

Maß für die elektrische Feldstärke in der Barriere dar. Das Ansteigen des Abstandes und Verschieben der energetischen Lage der FKO im Energiebereich von 4,3 eV bis 4,8 eV indiziert ein Anwachsen der Feldstärke  $F$  in der AlGaIn-Schicht.

Die Bandlücke der 21,8%-Probe 275 liegt bei 4,0 eV, gekennzeichnet durch eine grün gestrichelte Linie, und unterhalb dieser ist im Bereich von 3,72 eV mit Hilfe einer blau gestrichelten die unbekannte Struktur markiert. In den PC-Messungen wurde gezeigt, dass sich die energetische Lage des Signals, abhängig von Spannung und Temperatur, nicht verändert.

Deshalb wurde für diese Photonenergie eine Analyse der Amplitude des ER-Signals, abhängig von der Gleichspannung, durchgeführt. Das Ergebnis ist in Abbildung 6.6 aufgetragen. Die Änderung des Signals von einem Maximum bei 0,6 V zu einem Minimum bei -3,6 V ist durch zwei blaue Pfeile angedeutet.

In Abbildung 6.7 a) ist der Bandverlauf des Leitungsbandes ohne äußere Spannung dargestellt. An der AlGaIn/GaN-Grenzfläche befindet sich das 2DEG. Durch Modulation um die Gleichspannung  $0 \text{ V} \pm \Delta U$  werden die Oberflächenfeldstärken  $F \pm \Delta F$  eingestellt. Dabei bewirkt eine positive Spannung

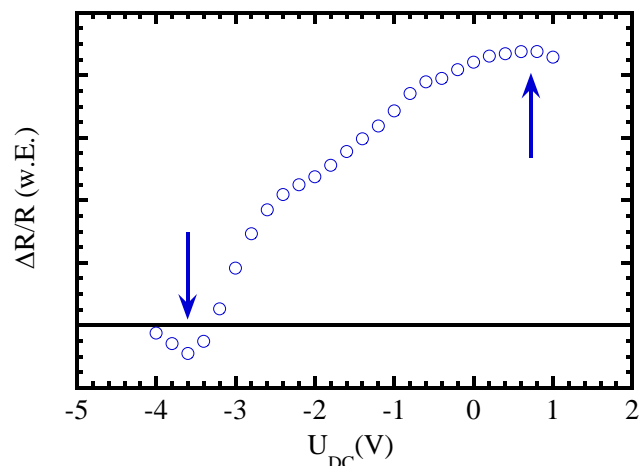


Abbildung 6.6: Rotation der ER-Amplitude für  $T = 80$  K bei veränderter äußerer Spannung für die Energieposition von 3,74 eV. Die Lage des Maximums und Minimums sind durch Pfeile gekennzeichnet

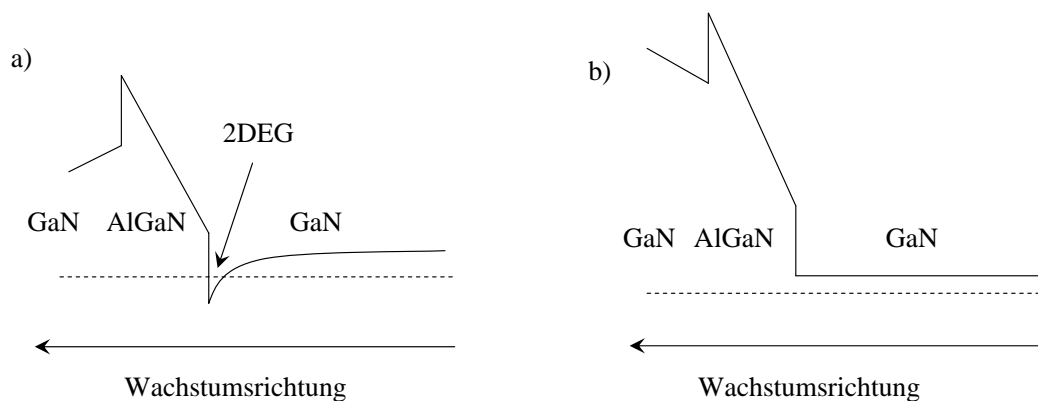


Abbildung 6.7: Bandschema des Leitungsbandes und eingezeichnete Fermienergie (gestrichelte Linie) für eine AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub>-Probe mit Ga<sub>N</sub>-Deckschicht a) im spannungslosen Fall und b) mit negativer Spannung an der Oberfläche

eine betragsmäßige Erhöhung der Feldstärke an der OF, wohingegen eine Absenkung um  $\Delta U$  diese verringert. Deutlich negative Spannungen bedeuten ein höheres Oberflächenpotential und eine höhere elektrische Feldstärke in der AlGa<sub>N</sub>-Barriere sowie einen Vorzeichenwechsel der Feldstärke in der Ga<sub>N</sub>-Deckschicht, was in Abbildung 6.7 b) verdeutlicht ist. Es kommt zur Verarmung des Elektronengases, und das Leitungsband wird nicht mehr an der Grenzfläche festgehalten. Dabei wird der Anstieg des Leitungsbandes an der OF geändert. Erhöht man nun die Spannung um  $+\Delta U$ , so sinken

das OF-Potential und auch  $F$  in der Deckschicht. Senkt man hingegen die Gleichspannung um den Modulationsanteil, so steigen das OF-Potential und  $F$  an. Der Wechsel im Vorzeichen der Feldstärke (des Leitungsbandanstiegs) in der Deckschicht führt letztendlich zu der beobachteten Phasendrehung des Signals um  $180^\circ$ . Würde das Signal bei  $3,72\text{ eV}$  durch das 2DEG hervorgerufen, müsste es ab der Verarmungsspannung (ca.  $-3\text{ V}$ ) verschwinden. Da es dies nicht tut, ergibt sich zwangsläufig die Schlussfolgerung, dass kein 2DEG oder die Ausbildung eines oberflächennahen Quantengrabens Ursache des Signals ist.

Somit kann die Ursache des Signals nur darin liegen, dass sich oberhalb der  $\text{Al}_{0,218}\text{Ga}_{0,782}\text{N}$ -Barrierenschicht eine AlGaN-Mischkristallschicht befindet, deren Al-Gehalt  $15 \pm 2\%$  beträgt. Um dies zu bestätigen, wurde bei einer weiteren Probe eine Wachstumsunterbrechung zwischen AlGaN- und Deckschicht eingeführt, um zu gewährleisten, dass sich kein Al in der Deckschicht befindet. Diese Prozessänderung erbrachte jedoch nicht den gewünschten Erfolg, denn die Struktur ist weiterhin in den Spektren zu erkennen.

Zusätzliche Augerelektronenspektroskopie- (Dr.-Ing. Ecke) und XPS (Photoelektronenspektroskopie mit Röntgenstrahlen)-Messungen (Dipl.-Ing. Himmerlich) konnten nicht zur Klärung des Sachverhaltes beitragen, weil deren Auflösungsvermögen in der Tiefe zu gering ist. Dadurch kann keine quantitative Aussage getroffen werden, ob das detektierte Al-Signal aus der Deckschicht oder aus der AlGaN-Barriere stammt.

Somit ist zu klären, woraus sich diese AlGaN-Schicht nach Abschalten des Al-Zuflusses im MOCVD-Reaktor ausbilden kann. Aluminium könnte durch die Wachstumstemperatur von  $1100^\circ\text{C}$  aus der Barriere in die GaN-Deckschicht diffundieren. Al kann ebenfalls von Ablagerungen aus den Zuleitungen, der Reaktorwand oder vom Suszeptor, Diffusion von Defekten aus dem AlGaN herrühren oder es handelt sich um eine lokal geänderte Zusammensetzung des AlGaN in der Deckschicht.

### 6.3.2 Feldstärkebestimmung aus den FKO

Abbildung 6.8 zeigt ein typisches ER-Spektrum bei  $U_{\text{DC}} = 0\text{ V}$ , welches durch die AlGaN-Barriere entsteht. In dieser Abbildung wird ein experimentell ermitteltes Spektrum (schwarz gestrichelte Linie) einem berechneten Spektrum angepasst, um die genaue energetische Lage der Bandlücke zu ermitteln. Die-

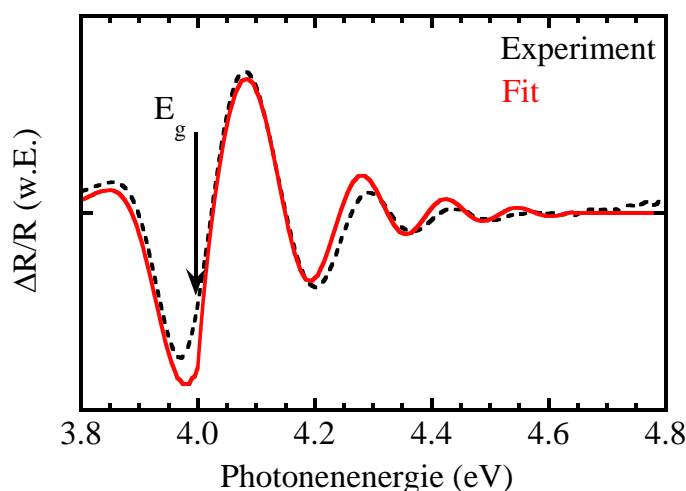


Abbildung 6.8: Anpassung des ER-Spektrums für Probe 275 bei  $T = 295$  K und  $U_{DC} = 0$  V

se beträgt hier  $E_g = 4,0$  eV. Die Abweichungen unterhalb der Bandlücke werden durch das Ga<sub>N</sub>-Signal verursacht, welches noch zum ER-Signal im Experiment beiträgt. Diese entsteht durch die Anpassung der Spektren im Bereich der Bandlücke mittels Linienformanalyse. Die leichte Differenz in den zwei Spektren oberhalb von  $E_g = 4,0$  eV betreffen die FKO, das heißt im Experiment ist die Dämpfung der Oszillationen stärker als die Abschwächung des Signals im Bereich der Bandlücke. Trotzdem ist die Anpassung für die Bestimmung der Bandlücke hinreichend, welche zur Auswertung der FKO, für die jeweilig angelegte äußere Spannung im Bereich von 1 V bis -6 V, nach Aspnes et al. [44] notwendig ist. Die Bestimmung der internen Feldstärke  $F$  in der AlGa<sub>N</sub>-Barriere erhält man aus einer separaten Ermittlung der energetischen Lage der Maxima und Minima der Oszillationen.

Mit Kenntnis des Algorithmuses für die Bestimmung der Bandlücken wurde dies analog für die Proben 178, 202 und 199 durchgeführt und in Abbildung 6.9 dargestellt. Diese zeigt ein Vergleich der ER-Spektren bei einer angelegten äußeren Gleichspannung von 0 V. Die Verschiebung der Bandlücken, gekennzeichnet durch schwarz gestrichelte Linien, von Probe 178 hin zu 199 sind deutlich zu erkennen.

Den Al-Gehalt kann man aus der optisch ermittelten Bandlücke bestimmen. Dazu wird mit Hilfe der Gitterkonstanten aus XRD-Messungen die Verspannung in der Probe nach Gleichung (2.14) und die daraus resultierende Verschiebung der Übergangsenergie nach Gleichung (2.17) bestimmt. Die ent-



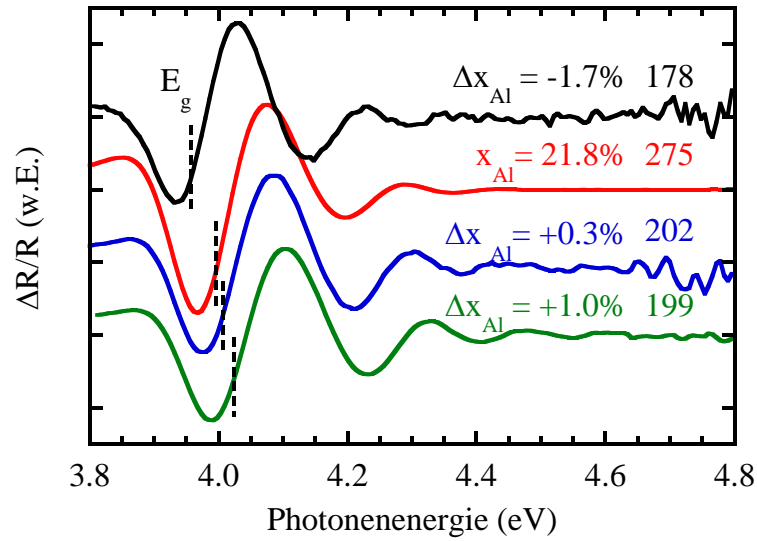


Abbildung 6.9: Darstellung der ER-Spektren für die ZMN-Proben bei  $U_{DC} = 1 \text{ V}$  und  $T = 295 \text{ K}$ ; Anordnung der Proben von oben nach unten mit steigendem Al-Gehalt, ermittelt aus der Bandlückenverschiebung, bezogen auf die Referenzprobe 275

stehende Zugverspannung durch das Abscheiden der AlGa<sub>N</sub>-Schicht auf GaN erhöht die experimentell bestimmte Bandlücke (4,0 eV aus Ellipsometrie- und ER-Messung) um 48 meV und somit steigt der Al-Anteil an. Für Probe 275 ergibt nach dieser Methode einen Al-Gehalt von 28 %.

Im Gegensatz dazu kann der Al-Gehalt, unter Beachtung des Verspannungszustandes der Probe, mit einer Genauigkeit von  $\pm 1\%$  aus Röntgenmessungen [46] bestimmt werden. Die Probe 275 wurde als Referenzpunkt mit einem Al-Gehalt von 21,8 % festgelegt. Die relative Änderung des  $x$ -Gehaltes wurde aus der Verschiebung der Bandlücken und mit Hilfe von Gleichung (2.8) berechnet.

Der optisch ermittelte Al-Gehalt widerspricht der XRD-Messung. Eine mögliche Begründung ist ein falsch bestimmter Bowing-Parameter, denn es gibt auch Arbeiten mit Werten, die von 0,9 eV abweichen [63–65]. Die Diskrepanz in der Bestimmung des Al-Gehaltes aus XRD- und optischen Messungen ermöglicht nur eine Aussage über die relative Änderung des Al-Gehaltes, bezogen auf die Referenzprobe 275.

Im oberen Teil der Abbildung 6.10 ist ein typisches ER-Spektrum bei  $U_{DC} = -1 \text{ V}$  gezeigt, welches von der AlGa<sub>N</sub>-Barriere stammt. Die Bandlücke liegt bei 4,0 eV und oberhalb dieser folgen die FKO, welche ein Maß für das inter-

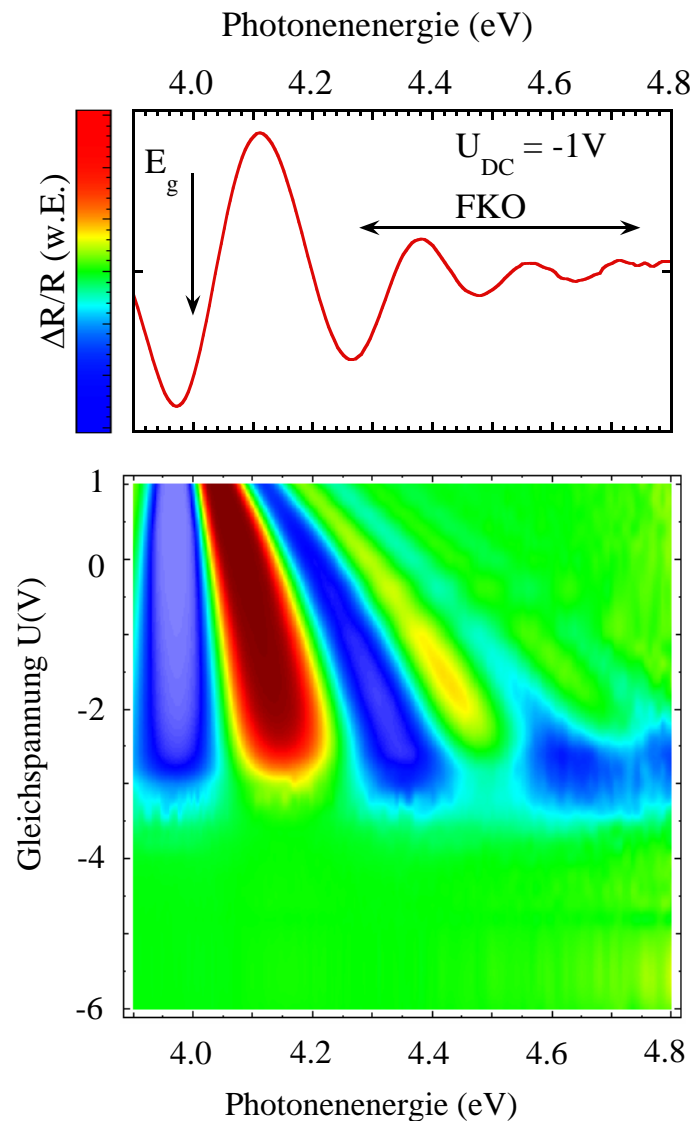


Abbildung 6.10: oben: ER-Spektrum mit Farbskala bei  $U_{DC} = -1$  V zur Darstellung der ER-Amplitude; unten: Darstellung der Elektroreflexionsmessung der Probe 275 bei  $T = 295$  K im Bereich von 1 bis -6 V

ne elektrische Feld sind. Die farbige Skala links in der Abbildung 6.10 zeigt die Farbkodierung für die ER-Amplitude und in der darunter befindlichen Abbildung ist diese abhängig von der angelegten Gleichspannung von 1 V bis -6 V und der Photonenergie dargestellt. Von 1 V bis -3 V steigt die Periode der FKO an und somit steigt die interne Feldstärke in der AlGa<sub>N</sub>-Barriere durch die wachsende äußere Gleichspannung ebenfalls an. Wird  $U_{DC}$  unter die Schwellspannung  $U_{th} = -3$  V verringert, so sinkt die ER-Amplitude dra-

Tabelle 6.1: Parameter der binären Nitridverbindungen GaN und AlN

Parameter	$E_g(300\text{ K})$ (eV)	$\varepsilon_r$	$m_e/m_{e0}$	$m_{hh}/m_{e0}$
GaN	3,447 <sup>a</sup>	10,4 <sup>c</sup>	0,22	1,89
AlN	6,213 <sup>b</sup>	8,5 <sup>d</sup>	0,33	3,57

<sup>a</sup>Ref. 26,<sup>b</sup>Ref. 66,<sup>c</sup>Ref. 67,<sup>d</sup>Ref. 68,

Ref. 24,69 Elektronen- und Löchermassen

stisch und die Abstände der Oszillationen bleiben konstant. Dieses Verhalten entsteht durch die Verarmung des 2DEG bei  $U_{th}$ , weil das Elektronengas das Leitungsband an der AlGaN/GaN-GF nicht mehr festhält. Eine weitere Verringerung der Gleichspannung nach der Verarmung des 2DEGs ändert  $F$  kaum, weil die Bandverbiegung tiefer in die Probe reicht. Deshalb geht das Leitungsband des GaN nahezu in den Flachbandfall über. Eine Phasendrehung des Exzitonensignals in dem Bereich von  $U_{th}$  bestätigt dies, denn das LB ist nicht mehr an der Hetero-GF festgehalten, somit wird der AlGaN- und GaN-Bereich der Probe moduliert.

Die experimentellen Daten dienen nun zur Analyse der FKO nach Ref. 44 und geben Auskunft über den Polarisationsgradienten an der GF. Zunächst wird die Energiedifferenz zwischen der Bandlücke und den FKO-Extrema  $(\frac{4}{3\pi}(E - E_g)^{3/2}) = f(\nu)$  (Gleichung (3.13)) über der Nummer des Extremums  $\nu$  dargestellt, um die elektrooptische Energie  $\hbar\Theta$  aus dem Anstieg der Geraden zu erhalten. Diese wiederum ermöglicht die Ermittlung der Feldstärke mit Hilfe von  $F = (\hbar\Theta)^{3/2} \frac{\sqrt{2\mu^*}}{e\hbar}$  (Gleichung (3.14)) mit der reduzierten effektiven Elektron-Loch-Masse  $\mu^*$ . Für AlGaN berechnen sich mit Kenntnis des Al-Gehaltes die effektiven Elektronen- und Löchermassen aus der linearen Interpolation zwischen denen von GaN und AlN (vergleiche Tabelle 6.1) und ergeben  $\mu^*$  (0,22 für Probe 275) nach Gleichung (2.11).

Dieses Auswerteverfahren wurde für den gesamten Gleichspannungsbereich und für die drei Proben 178, 199 und 275 mit leicht unterschiedlichem Al-Gehalt durchgeführt und in Abbildung 6.11 dargestellt. Da die spontane Polarisation quadratisch und die piezoelektrische linear vom  $x$ -Gehalt abhängt, folgt mit steigendem  $x$  unmittelbar eine höhere Polarisation in der AlGaN-Barriere und somit eine größere Feldstärke. Dies spiegelt sich in Abbildung 6.11 in einem größeren Anstieg der  $F - U$ -Charakteristik und einer steigen-

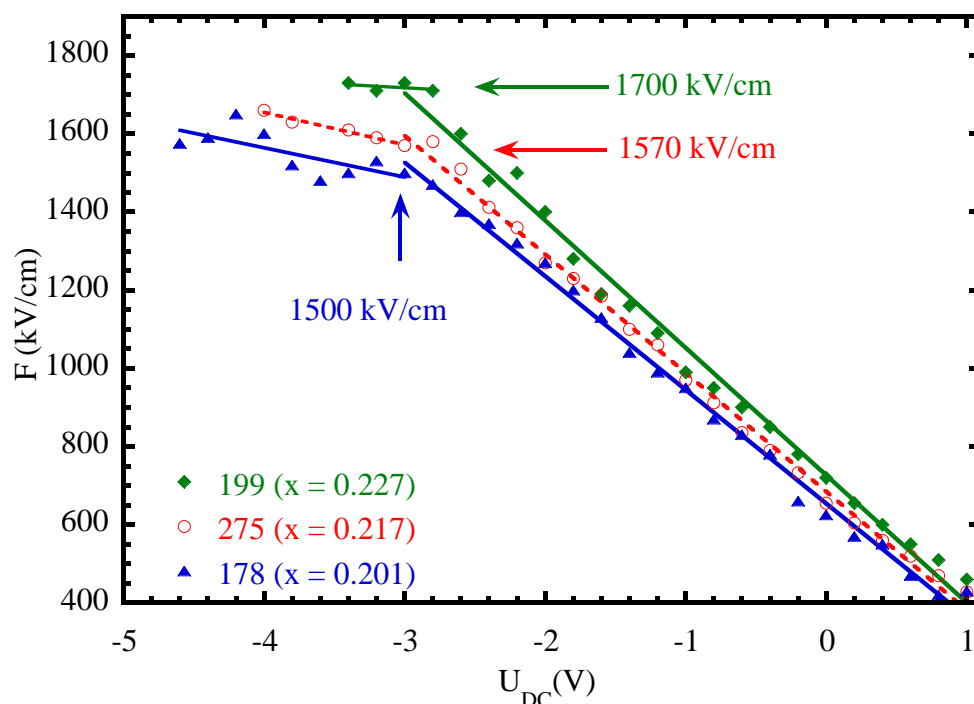


Abbildung 6.11: Darstellung der  $F-U$ -Charakteristik aus der Analyse der FKO in der AlGa<sub>N</sub>-Barriere bei Raumtemperatur; Verarmungsfeldstärke durch Pfeile gekennzeichnet

den Schwellspannung wider.

Die Grenzfeldstärke  $F(U_{\text{th}})$  dient zur Bestimmung der 2DEG-Dichte mit der Annahme, dass sich der Schottky-Kontakt an der Oberfläche und das 2DEG kapazitiv verhalten [70]. Die Kapazität des Plattenkondensators kann mit:

$$C = \varepsilon_0 \varepsilon_{\text{AlGaN}} \cdot \frac{A_{\text{AlGaN}}}{d} = \frac{Q}{U} \quad (6.1)$$

bestimmt werden. Aus dem Anstieg des  $F-U$ -Diagramms wird die Schichtdicke  $d$ , welche sich aus der Deckschicht und der AlGa<sub>N</sub>-Barriere zusammensetzt, ermittelt. Der Vergleich der Schichtdicken, bestimmt aus der  $F-U$ -Kurve und der Ellipsometriemessung, liefert für die Proben 178, 275 und 199 eine Dicke von 30 nm (34 nm), 29 nm (32 nm) bzw. 28 nm (30 nm). Die geringeren Schichtdicken aus der Ellipsometriemessung im Vergleich zum Plattenkondensatormodell entstehen durch die Lokalisierung des 2DEGs in der Ga<sub>N</sub>-Schicht ca. 2 nm entfernt von der AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub>-GF.

Nach weiteren Umformungen folgt für die Elektronengasdichte in Abhängigkeit von der Spannung die Gleichung:

$$N_{2\text{DEG}}(U_{\text{DC}}) \approx \varepsilon_0 \varepsilon_{\text{AlGaN}} \cdot \frac{F(U_{\text{DC}}) - F_{\text{th}}}{e}. \quad (6.2)$$

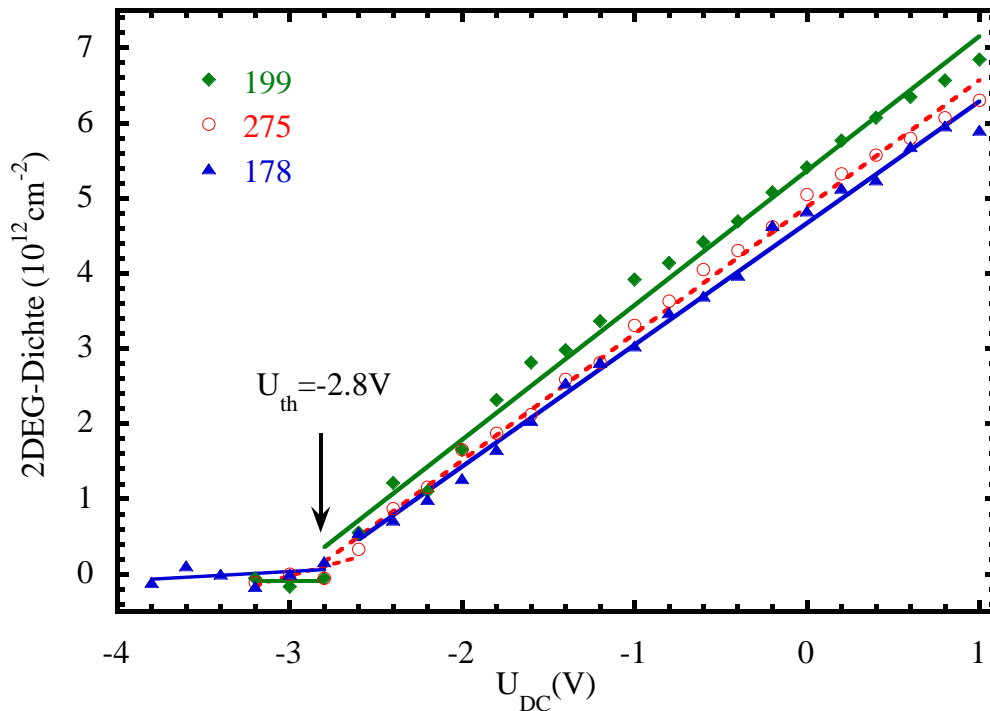


Abbildung 6.12: Darstellung der 2D-Elektronengasdichte abhängig von der Gleichspannung und Kennzeichnung der Schwellspannung

Es wurde mit einer relativen Dielektrizitätskonstanten und reduzierten Masse abhängig von  $x$  durch lineare Interpolation aus den Werten für GaN und AlN (Tabelle 6.1) gerechnet. Der berechnete Verlauf der Elektronengasdichte ist in Abbildung 6.12 für die drei untersuchten ZMN-Proben mit gekennzeichnete Schwellspannung dargestellt.

Aus dem Diagramm wird die Elektronengasdichte bestimmt, die in der Probe vorhanden ist, wenn kein äußeres elektrisches Feld anliegt. Mit Hilfe der Gleichung (2.38) ist eine schnelle Abschätzung der zu erwartenden experimentellen 2DEG-Dichte möglich. Für Probe 178 mit einem Al-Gehalt von 20,1% ergibt dies eine Dichte von  $5,4 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$ . Diese ist um einen Faktor drei größer als im Experiment, weil in dieser Gleichung nicht die reduzierende Wirkung auf die Deckschicht in der Elektronendichte berücksichtigt wird. Dabei muss außerdem das elektrostatische Potential an der zur Oberfläche gerichteten GaN/AlGa<sub>N</sub>-GF (ca. +2,4V bei den ZMN-Proben) berücksichtigt werden. Daraus wird die Elektronengasdichte für Probe 178 ohne äußere Störung auf den Wert von  $N_{2\text{DEG}} = 1,5 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$  bestimmt. Bei Hall-Messungen wurde eine 2DEG-Dichte von  $2 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$  ermittelt, welche in guter Übereinstimmung mit den ER-Messungen ist.

### 6.3.3 Temperaturabhängigkeit der internen elektrischen Feldstärke

Ein weiterer wichtiger Teil dieser Arbeit ist die temperaturabhängige Untersuchung der elektrischen Feldstärke, abhängig von der angelegten Gleichspannung. Damit folgt unmittelbar die Änderung der 2DEG-Dichte, hervorgerufen durch die ermittelte Schwellspannung.

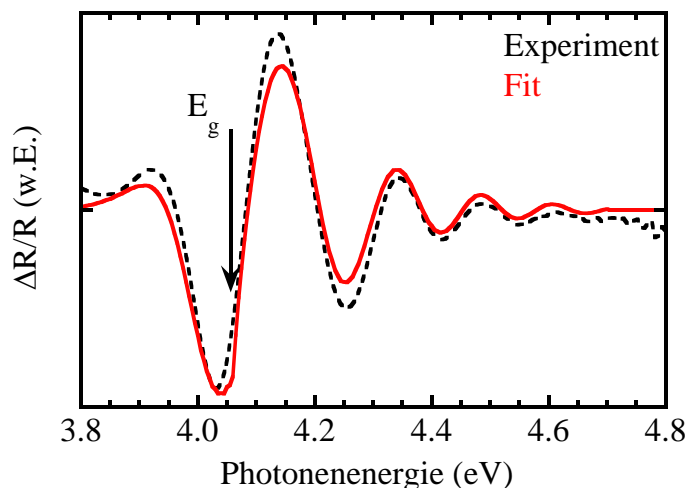


Abbildung 6.13: Anpassung des ER-Spektrums für Probe 275 bei  $T = 80$  K und  $U_{DC} = 0$  V

In Abbildung 6.8 wurde die Anpassung für  $T = 295$  K gezeigt, entsprechend für  $T = 80$  K ist diese für  $U_{DC} = 0$  V in Abbildung 6.13 dargestellt. Die energetische Lage der Bandlücke bei  $4,06$  eV ist durch einen Pfeil markiert. Wie bereits erwähnt, ist Ziel dieser Anpassung die Ermittlung der Bandlücke bei  $80$  K. Diese hat sich im Vergleich zur Raumtemperatur um  $60$  meV zu höheren Energien wegen der Verringerung der Oszillationsamplituden der Gitteratome um ihre Ruhelage verschoben.

Das ER-Spektrum für den AlGa<sub>N</sub>-Bereich bei  $T = 80$  K im Spannungsbereich von  $1$  V bis  $-6$  V ist in Abbildung 6.14 dargestellt. Man erkennt oberhalb der Bandlücke von  $4,06$  eV die Zunahme der Weite der FKO's mit sinkender Gleichspannung. Die Auswertung der Oszillationen erfolgt, wie oben bereits beschrieben, mit Hilfe der Gleichung (3.13).

Die Verarmung des Elektronengases erfolgt bei  $U_{DC} = -3,2$  V und liegt ungefähr  $0,2$  V negativer als bei Raumtemperatur, verursacht durch mögliche Spannungsabfälle in den Bahngebieten zwischen den beiden Kontakten. Im Vergleich zur Raumtemperaturmessung ist die Bandlücke bei  $80$  K um

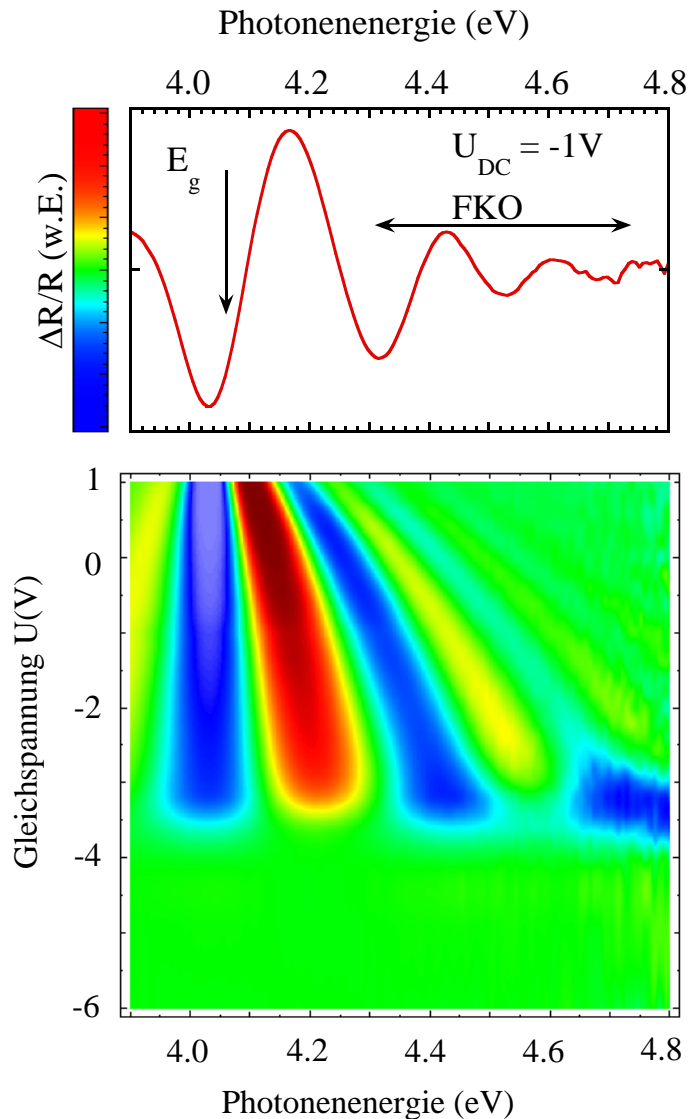


Abbildung 6.14: oben: ER-Spektrum mit Farbskala bei  $U_{DC} = -1V$  zur Darstellung der ER-Amplitude; unten: Darstellung der Elektroreflexionsmessung der Probe 275 bei  $T = 80 K$  im Bereich von 1 bis  $-6 V$

60 meV zu höheren Energien verschoben.

In Abbildung 6.15 a) sind die Feldstärken der Probe 275 für die Temperaturen von 80 K und 295 K abhängig von der äußeren Gleichspannung dargestellt. Die Kurve bei tiefen Temperaturen hat im Vergleich zur Messung bei Raumtemperatur einen geringfügig kleineren Anstieg, verursacht durch einen zusätzlichen Spannungsabfall in der Probe, aber außerhalb der AlGaIn-Barriere. Jedoch verringert sich die Schwellspannung mit sinkender Temperatur, wohingegen der Wert von  $F_{th}$  im Rahmen der Messgenauigkeit konstant

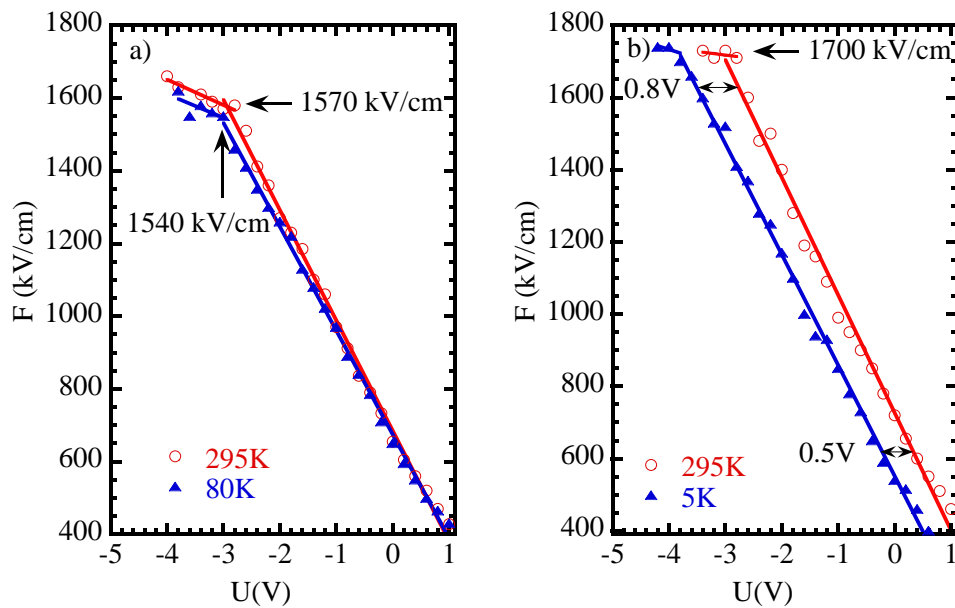


Abbildung 6.15: a) Elektrisches Feld abhängig von der Gleichspannung für Probe 275 für  $T = 295\text{ K}$  und  $80\text{ K}$ ; b)  $F - U$ -Diagramm für Probe 199 bei den Temperaturen  $295\text{ K}$  und  $5\text{ K}$ ; die Verarmungsfeldstärke des 2DEGs ist mit Pfeilen gekennzeichnet

bleibt.

Abbildung 6.15 b) zeigt für die Probe 199 die Feldstärke für die Temperaturen  $295\text{ K}$  und  $5\text{ K}$  abhängig von  $U_{\text{DC}}$ . Die Verschiebung der Feldstärke der  $5\text{ K}$ -Kurve um  $0,8\text{ V}$  im negativen bzw.  $0,5\text{ V}$  im positiven Spannungsbereich kann auch hier durch den Spannungsabfall außerhalb der AlGa<sub>N</sub>-Schicht (vergleiche Probe 275) entstehen.

Bei der Probe 199 befinden sich an den vier Ecken eines Rechtecks die ohmschen Kontakte und in der Probenmitte der Schottky-Kontakt, wohingegen bei der Probe 275 die ohmschen Kontakte zwei Kanten des Rechtecks bedecken und der Schottky-Kontakt sich weiterhin in der Mitte befindet. Somit ist die Weglänge der Ladungsträger durch die Probe im Falle von Probe 199 größer und die Spannung fällt auch in den Randgebieten ab. Eine weitere Ursache könnte die Kontaktgeometrie von ohmschem- und Schottkykontakt sein, die zu einem erheblichen Spannungsabfall bei tiefen Temperaturen führen. Hinzu kommt eine mögliche Erhöhung der Schottkybarriere bei tiefen Temperaturen [71]. Die zusätzlich beobachtete Parallelverschiebung kann möglicherweise durch teilweise unbesetzte Zustände von Oberflächenladungen bei tiefen Temperaturen entstehen, wodurch sich die Feldstärke in der



Barriere verringern würde.

Eine Verringerung von  $U_{\text{th}}$  um 0,8 V wurde bei Experimenten mit Wasserstoff an der Oberfläche beobachtet [72], aber eine Wasserstoffatmosphäre kann bei der Messung mit Helium bei 5 K ausgeschlossen werden.

Die temperaturabhängige Untersuchung der Feldstärke liefert eine konstante Abknickfeldstärke von 1700 kV/cm für die Probe 199 und 1540 kV/cm für Probe 275. Somit wurde bewiesen, dass  $F_{\text{th}}$  keine Funktion der Temperatur ist. Mit diesem Ergebnis kann man nun den Polarisationsgradienten an der AlGaN/GaN-GF bestimmen.

### 6.3.4 Ermittlung der Polarisationsgradienten an der Grenzfläche

Das elektrische Feld  $F_{\text{th}}$  in der Barriere für  $U_{\text{DC}} = U_{\text{th}}$  wird durch den Unterschied in der Polarisation von AlGaN und GaN hervorgerufen. Die Polarisation setzt sich aus der spontanen, hervorgerufen durch die Inversionsassymetrie des Wurtzitkristalls, und der piezoelektrischen Polarisation, wegen der Schichtverspannungen, zusammen (vergleiche Kapitel 2.3).

Mit Hilfe des Gaußschen Gesetzes und Gleichung (2.35), angewandt auf die AlGaN/GaN-GF, und anschließender Integration erhält man die Beziehung zwischen dem experimentell bestimmten  $F_{\text{th}}$  und  $\Delta P$ . Im Fall der Verarmung des Elektronengases ist das elektrische Feld im GaN Null und die Gleichung vereinfacht sich zu [70]:

$$\Delta P_{\text{exp}} = -\varepsilon_0 \varepsilon_{\text{AlGaN}} \cdot F_{\text{th}}. \quad (6.3)$$

Ein Vergleich der experimentellen mit der theoretischen Polarisationsladung erfordert die Kenntnis des Al-Gehalts und der Gitterkonstanten des AlGaN bzw. des GaN.

Die spontane Polarisation errechnet sich aus der Differenz der Gleichungen (2.24) für AlGaN und  $x = 0$  für GaN nach:

$$\Delta P_{\text{SP}} = -0,09x + 0,034x + 0,021x(1 - x). \quad (6.4)$$

Die piezoelektrische Polarisation des GaN folgt aus Gleichung (2.33) mit der Verspannung  $\epsilon_{xx}$  für GaN bzw. AlGaN mit der unverspannten Gitterkonstante  $a_0$  und der aus der XRD-Messung erhaltenen Gitterkonstanten  $a$ . Annähernd pseudomorphes Wachstum von AlGaN auf GaN, bestätigt

## Kapitel 6. Untersuchungen an den AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub>-Heterostrukturen

Tabelle 6.2: Gitterkonstante von Ga<sub>N</sub> und AlGa<sub>N</sub> sowie spontane und piezoelektrische Polarisationsgradienten zur Bestimmung von  $\Delta P_{\text{theo}}$  der ZMN-Proben bei Raumtemperatur; Schwellfeldstärke und daraus ermittelter Polarisationsgradient  $\Delta P_{\text{exp}}$

Probe	178	275	199
$x$	0,201	0,217	0,227
$a_{\text{GaN}}(\text{\AA})$	3,1868	3,1903	3,1845
$a_{\text{AlGaN}}(\text{\AA})$	3,1865	3,1906	3,1843
$\Delta P_{\text{SP}}(-10^{12}\text{e/cm}^2)$	4,89	5,37	5,63
$\Delta P_{\text{PE}}(-10^{12}\text{e/cm}^2)$	3,12	3,67	3,57
$\Delta P_{\text{theo}}(-10^{12}\text{e/cm}^2)$	8,01	9,04	9,20
$F_{\text{th}}(\text{kV/cm})$	1500	1570	1700
$\Delta P_{\text{exp}}(-10^{12}\text{e/cm}^2)$	8,30	8,66	9,37

durch die Messung der Gitterkonstanten mittels Röntgendiffraktometrie, verursacht eine Zugverspannung in der Barriere. Die Ermittlung von  $\Delta P_{\text{PZ}}$  an der Grenzfläche erfolgt durch Differenzbildung von Gleichung (2.30) und (2.33)

$$\begin{aligned} \Delta P_{\text{PE}} = & (-1.808\epsilon_{xx1} - 7.888\epsilon_{xx1}^2)x + (1-x)(-0.918\epsilon_{xx1} + 9.541\epsilon_{xx1}^2) \\ & + 0.918\epsilon_{xx} - 9.541\epsilon_{xx}^2. \end{aligned} \quad (6.5)$$

Mit der unverspannten AlGa<sub>N</sub>-Gitterkonstanten nach Gleichung (2.1) folgt für die Verspannungen:

$$\epsilon_{xx1} = \frac{a_{\text{AlGaN}} - a_{0\text{AlGaN}}}{a_{0\text{AlGaN}}}, \quad (6.6)$$

$$\epsilon_{xx} = \frac{a_{\text{GaN}} - a_{0\text{GaN}}}{a_{0\text{GaN}}}. \quad (6.7)$$

Der gesamte Polarisationsgradient an der Grenzfläche errechnet sich aus der Summe von spontaner und piezoelektrischer Polarisation. Die quantitativen Ergebnisse sind in Tabelle 6.2 zusammengefasst.

Dieser Sachverhalt ist für die drei ZMN-Proben und für zwei Proben aus Braunschweig in Abbildung 6.16 anschaulich dargestellt. Im Diagramm ist die Abhängigkeit des piezoelektrischen Polarisationsgradienten an der AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub>-GF mit einer blau gestrichelten Linie angedeutet. Da  $\Delta P_{\text{PE}}$  in erster Näherung hauptsächlich linear vom Al-Gehalt (vergleiche Gleichung (6.5)) abhängt, ist diese Linearität ebenfalls im Diagramm zu erkennen. Die

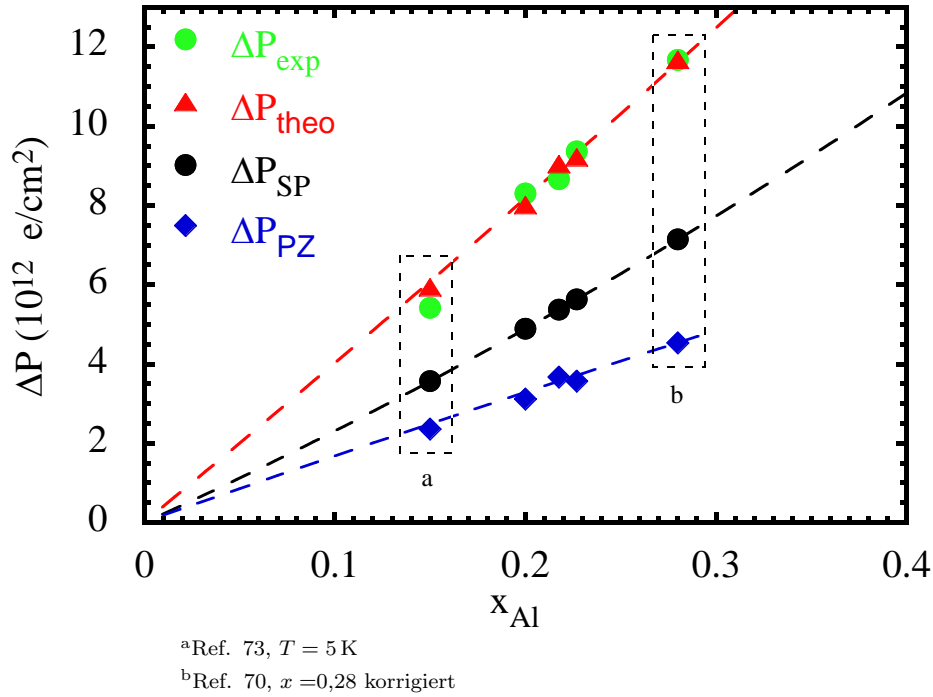


Abbildung 6.16: Darstellung der berechneten spontanen und piezoelektrischen Polarisationsgradienten an der AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub>-Grenzfläche verglichen mit dem experimentellen Wert für  $T = 295$  K; drei ZMN-Proben auf Saphirsubstrat und zwei aus den angegebenen Referenzen auf SiC

Abweichung der Werte des berechneten  $\Delta P_{PE}$  von der Gerade ist auf das nicht vollständig pseudomorphe Wachstum der AlGa<sub>N</sub>- auf die Ga<sub>N</sub>-Schicht zurückzuführen. Die schwarze Linie zeigt eine quadratische Abhängigkeit von  $\Delta P_{SP}$  vom Al-Gehalt, unabhängig von der jeweiligen Verspannung (vergleiche Gleichung (6.4)). Die Genauigkeit in der Bestimmung von  $F_{th}$  liegt bei  $\pm 50$  (kV/cm) und hat eine Änderung des experimentell ermittelten Polarisationsgradienten von  $\pm 3\%$  zur Folge. Die Bestimmung der Gitterkonstanten aus Röntgenmessungen mit einem Fehler von  $\pm 0,001$  Å verursacht eine Ungenauigkeit im theoretischen Polarisationsgradienten von  $\pm 2\%$ . Einen weiteren Einfluss auf  $\Delta P$  übt der Al-Gehalt aus. Wenn dieser sich um  $\pm 1\%$  ändert, folgt eine Abweichung von  $\Delta P_{theo}$  von  $\pm 6\%$ , wohingegen der Einfluss von  $x$  auf  $\Delta P_{exp}$  vernachlässigbar ist.

Abschließend lässt sich feststellen, dass die experimentell ermittelten Polarisationsgradienten unabhängig von der Temperatur gut mit den theoretisch berechneten Werten übereinstimmen.

# Kapitel 7

## Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurden die optischen Eigenschaften von GaN- und GaN/AlGaIn/GaN-HEMT-Strukturen mit Ga-Polarität untersucht. Einen Schwerpunkt bildete die Charakterisierung der Proben durch Photoreflexion, Photolumineszenz, Ellipsometrie und Elektroreflexion.

Ziel dieser Arbeit war die Bestimmung des Polarisationsgradienten an der AlGaIn/GaN-Heterogrenze in Abhängigkeit von der Temperatur. Dazu ist die Kenntnis der Verspannung der einzelnen Schichten notwendig. Als Referenz diente eine unverspannte freistehende GaN-Probe, die mit PL und PR zur Bestimmung der Übergangsenergien untersucht wurde. Der Vergleich mit einer homoepitaktischen GaN-Probe aus der Literatur zeigte Abweichungen der Exzitonenergien im Bereich von sehr tiefen Temperaturen und Raumtemperatur. Eine detaillierte Untersuchung der optischen Übergänge der HVPE-Probe bei 5 K ermöglichte die temperaturabhängige Bestimmung der Exzitonenergien aufgrund der guten Probenqualität.

Die Methode der Photoreflexion wurde benutzt, um die Übergangsenergien der freien A- und B-Exzitonen der GaN-Proben zu ermitteln. Die Verschiebung der Energien, abhängig von der Temperatur, kann mit der Varshni-Formel abgeschätzt werden. Messungen von  $T = 5$  K bis zur Raumtemperatur wurden durchgeführt, um eine Aussage zur Verspannung der GaN-Proben zu treffen.

Weiterhin wurden PL-Messungen an den Proben zur Bestätigung der Exzitonenergien aus dem PR-Experiment durchgeführt. Durch Messung der PL bei tiefen Temperaturen konnte der  $D^0X$ -Übergang dem Sauerstoff zugeordnet werden. Zusätzlich wurde neben der bandkantennahen Lumineszenz gelbe und blaue Störstellenlumineszenzen festgestellt, welche auf Defekte in

der Probe zurückzuführen sind.

Die Ellipsometriemessung an den GaN-Proben und den Heterostrukturen diente zur Bestimmung der Schichtdicken der einzelnen Proben. Dabei wurde eine zunächst unbekannte Struktur an GaN/AlGaN/GaN-Proben bei ca. 3,72 eV festgestellt. Bei Ellipsometriemessungen an Proben ohne GaN-Deckschicht verschwand diese Schulter. Anschließende temperaturabhängige Photostrom- und ER-Messungen dienten zur Klärung der Ursache des Signals. Als Konsequenz aus diesen Experimenten ergibt sich, dass beim Wachstum der abschließenden Deckschicht kein reines GaN entsteht, sondern eine dünne AlGaN-Schicht mit einem Al-Gehalt im Bereich von 15%. An den AlGaN/GaN-Strukturen wurden PL-Experimente im Temperaturbereich von 5 K bis 295 K durchgeführt und ebenfalls die drei charakteristischen Exzitonen vom GaN zu bestimmen. Mittels eines Vergleichs der Ergebnisse aus den PL- und PR-Experimenten im Bereich des GaN mit der HVPE-Probe konnten quantitative Aussagen über den Verspannungszustand der Proben abhängig von der Temperatur gemacht werden. Bei tiefen Temperaturen liegen die Übergangsenergien der Exzitonen höher, somit weisen die Schichten eine kompressive Verspannung auf.

Aus den ER-Experimenten an den HEMT-Strukturen wurden die FKOs zur genauen Bestimmung der internen elektrischen Felder in der Barriere analysiert. Damit wurden die 2DEG-Dichten abhängig von der äußeren Gleichspannung bestimmt. Messungen der ER-Spektren bei 5 K, 80 K und 295 K beweisen die Unabhängigkeit der Verarmungsfeldstärke des 2DEG von der Temperatur. Die temperaturunabhängigen Polarisationsgradienten an der AlGaN/GaN-Grenzfläche wurde aus dem Experiment mit Hilfe der Feldstärke im Bereich der Verarmung des Elektronengases bestimmt. Der Vergleich dieser Ergebnisse mit experimentellen Werten aus Röntgenmessungen, die den Al-Gehalt und die Gitterkonstanten der Proben liefern, zeigen leichte Abweichungen. Die Ursache dieser fehlenden Übereinstimmung liegt möglicherweise in einem falsch verwendeten Bowing-Parameter aus der Literatur.

In dieser Arbeit wurden die prinzipiellen Möglichkeiten der Elektreflexion zur Charakterisierung der AlGaN/GaN-Heterostrukturen gezeigt. Einen weiteren Schwerpunkt bildete die systematische Untersuchung von induzierten Effekten, welche durch die spontane und die piezoelektrische Polarisation hervorgerufen werden.

Weiterführende Experimente könnten eine Kontaktierung von Proben ohne GaN-Deckschicht und anschließende ER- bzw. Photostrommessungen beinhalten. Daraus wird ein erweitertes Verständnis des Einflusses der Deckschicht auf die Feldstärke und die 2DEG-Dichte der AlGaN-Proben erwartet. Weiterhin kann mit Hilfe dieser Untersuchungen die Ursache des Signals bei 3,72 eV bestätigt werden. Eine Untersuchung an GaN/AlGaN/GaN-Proben mit größerer GaN-Deckschichtdicke liefert womöglich Aufschluss über die Herkunft der Struktur bei 3,72 eV. Es ist zu erwarten, dass die Struktur bei geringeren Energien zu finden ist und sich die 2DEG-Dichte verringert. Eine Konsequenz aus den Abweichungen der Al-Gehaltbestimmung aus Röntgenmessungen und optischen Messergebnissen könnte eine systematische Untersuchung des Bowing-Parameters sein. Dazu sind Tieftemperaturmessungen mittels PL oder PR notwendig, um die Exzitonübergangsenergien zu bestimmen. Der Al-Gehalt ist z. B. mit Hilfe von Röntgenmessungen genau zu bestimmen, um mit diesen Ergebnissen den Bowing-Parameter zu ermitteln. Zum besseren Verständnis sollten die experimentellen Ergebnisse mit selbstkonsistenten Rechnungen unter Berücksichtigung von Schrödinger- und Poissongleichung untermauert werden. Im Bereich des 2DEG wären zusätzlich Vielteilcheneffekte zu diskutieren.

Für eine Vertiefung der Forschungen ist ein Wechsel des Substrates auf SiC oder Si statt Saphir denkbar. Dies würde einen deutlich anderen Verspannungszustand der Schichten bewirken. GaN z. B. wäre nicht mehr kompressiv, sondern zugverspannt. Aufgrund des Vorzeichenwechsels der piezoelektrischen Polarisation führt dies zu einer veränderten elektrischen Feldstärke. Eine wesentliche Verbesserung der Eigenschaften GaN-basierender Bauelemente wird erwartet, wenn GaN-Substrate guter Qualität vorliegen. Daher sollte in Ergänzung zu den Bauelemententwicklungen die vielversprechende Hydrid-Gasphasenepitaxie weiter verbessert werden.

Alle hier untersuchten Proben weisen Ga-Polarität auf. Es ist möglich, zum Vergleich auch stickstoffpolare Proben optisch zu untersuchen. Dabei ist zu erwarten, dass sich das 2DEG an der Oberfläche der GaN/AlGaN-Grenzfläche ausbildet. Die piezoelektrische und spontane Polarisation zeigen dann zur Oberfläche hin. Die 2DEG-Dichte würde bei N-polaren Proben, durch die höhere Grenzflächenrauigkeit beim Wachstum, geringer sein.

# Anhang A

## Fitresultate

### A.1 Photoreflexion

Tabelle A.1: Exzitonische Übergänge im GaN für die zwei ZMN-Proben in Abhängigkeit von der Temperatur; bestimmt aus PR-Spektren.

Probe	ZMN 187		ZMN 219	
$T(K)$	$E_{\text{FXA}}$ (eV)	$E_{\text{FXB}}$ (eV)	$E_{\text{FXA}}$ (eV)	$E_{\text{FXB}}$ (eV)
5	-	-	3,473	3,481
40	-	-	3,471	3,480
80	3,487	3,496	3,470	3,478
120	3,481	3,489	-	-
160	3,471	3,477	-	-
200	3,457	3,465	-	-
240	3,445	3,453	-	-

Tabelle A.2: Exzitonische Übergänge im GaN für die HVPE- und OSRAM-Probe in Abhängigkeit von der Temperatur; bestimmt aus PR-Spektren.

Probe	HVPE H01139		OSRAM 5796	
	$E_{\text{FX}^{\text{A}}}$ (eV)	$E_{\text{FX}^{\text{B}}}$ (eV)	$E_{\text{FX}^{\text{A}}}$ (eV)	$E_{\text{FX}^{\text{B}}}$ (eV)
5	-	-	3,486	3,496
20	-	-	3,485	3,495
40	-	-	3,485	3,494
60	-	-	3,485	3,494
80	3,475	3,482	3,479	3,489
100	3,472	3,479	3,476	3,486
120	3,469	3,476	3,473	3,485
140	3,464	3,471	3,469	3,482
160	3,460	3,466	3,464	3,477
180	3,455	3,462	3,459	3,472
200	3,448	3,456	3,455	3,466
220	3,442	3,450	3,446	3,457
240	3,435	3,444	3,439	3,451
260	3,426	3,438	3,432	3,442
280	3,419	3,426	-	-
295	3,414	3,420	3,426	3,436



## A.2 Photolumineszenz

Tabelle A.3: energetische Lage des A-Exzitons im GaN für die zwei ZMN-Proben, sowie die HVPE- und die OSRAM-Probe

Probe	ZMN 187	ZMN 219	HVPE H01139		OSRAM 5796
$T(K)$	$E_{\text{FX}^A}$ (eV)	$E_{\text{FX}^A}$ (eV)	$E_{\text{FX}^A}$ (eV)	$E_{\text{FX}^B}$ (eV)	$E_{\text{FX}^A}$ (eV)
5	3,491	3,486	3,480	-	-
20	3,491	3,486	3,479	-	3,486
40	3,491	3,486	3,479	3,485	3,486
60	3,489	3,484	3,477	3,483	3,485
80	3,488	3,483	3,476	3,481	3,484
100	-	-	3,473	3,478	-
120	-	-	3,469	3,474	-
140	-	-	3,465	3,470	-
160	-	-	3,460	3,466	-
180	-	-	3,455	-	-
200	-	-	3,449	-	-
220	-	-	3,443	-	-
240	-	-	3,435	-	-
260	-	-	3,427	-	-
280	-	-	3,419	-	-
295	-	-	3,412	-	-

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Elementarzelle . . . . .	9
2.2	Bandstruktur von Wurtzit GaN . . . . .	10
2.3	Bandstruktur nahe des $\Gamma$ -Punktes mit Einfluss von $\Delta_{\text{so}}$ und $\Delta_{\text{cr}}$	11
2.4	Bandstruktur von Wurtzithalbleitern am $\Gamma$ -Punkt . . . . .	12
2.5	relative Valenzbandenergien am $\Gamma$ -Punkt als Funktion von $\Delta_{\text{cr}}$	13
2.6	Relative Oszillatorstärken als Funktion von $\Delta_{\text{cr}}$ mit $\Delta_{\text{so}} =$ 18 meV . . . . .	14
2.7	A- und B-Exziton für die HVPE-Probe bei $T = 80$ K . . . . .	16
2.8	Exzitonische Übergangsenergien in Abhängigkeit von der Ver- spannung . . . . .	18
2.9	Exzitonienübergangsenergien abhängig von der Verspannung .	19
2.10	Atomlagen mit Ga-Polarität . . . . .	21
2.11	Darstellung eines wurtziten Kristalls . . . . .	22
2.12	Spontane Polarisierung abhängig vom $x$ -Gehalt . . . . .	23
2.13	Piezoelektrische Polarisierung abhängig vom $x$ -Gehalt . . . . .	25
2.14	AlGaIn/GaN Heterostruktur . . . . .	27
2.15	Bänderschema der AlGaIn/GaN-Heterostruktur . . . . .	28
2.16	Bänderschema der AlGaIn/GaN-Heterostruktur mit Cap . . .	29
3.1	ERMessplatz . . . . .	35
3.2	Strahlgeometrie bei Ellipsometrie . . . . .	38
3.3	Vielfachreflexion und Transmission . . . . .	39
3.4	Aufbau Ellipsometer . . . . .	40
3.5	Rekombinationsmechanismen in der PL . . . . .	42
3.6	PL-Messplatz . . . . .	44
4.1	Probenstruktur AlGaIn . . . . .	46
5.1	Temperaturabhängigkeit der Reflektivität der GaIn Proben . .	49

5.2	Vergleich der Reflektivität der GaN Proben . . . . .	50
5.3	Temperaturabhängigkeit der Photoreflexion der GaN-Proben .	51
5.4	Anpassung der Exzitonen der HVPE-Probe . . . . .	52
5.5	PL-Spektrum der HVPE-Probe . . . . .	54
5.6	Temperaturabhängigkeit der Photolumineszenz der GaN Probe	55
5.7	Anpassung des PL-Spektrums der HVPE-Probe . . . . .	57
5.8	Temperaturabhängigkeit von $FX^A$ . . . . .	58
5.9	Verschiebung der Exzitonübergänge abhängig von der Ver- spannung . . . . .	59
5.10	Temperaturabhängigkeit der GaN-PL-Spektren der HVPE- Probe . . . . .	60
5.11	Temperaturabhängigkeit von $FX^A$ und $FX^B$ für die HVPE-Probe	61
5.12	relative temperaturabhängige Verschiebung vom A-Exziton . .	61
6.1	Ellipsometriespektren von Proben mit und ohne Deckschicht .	64
6.2	Ellipsometriespektren von Proben mit und ohne Deckschicht .	65
6.3	temperaturabhängige Photostromspektren . . . . .	67
6.4	Vergleich von PC- und ER-Spektren . . . . .	68
6.5	Spannungsabhänigige ER-Serie, $T = 80$ K . . . . .	69
6.6	Rotationsspektrum für Probe 275 bei $T = 80$ K . . . . .	70
6.7	Bandschema des Leitungsbandes . . . . .	70
6.8	Anpassung des ER-Spektrums bei $T = 295$ K für Probe 275 . .	72
6.9	Bestimmung der Bandlücke von den ZMN-Proben . . . . .	73
6.10	Elektroreflexion der AlGaN Probe 275 bei $T = 295$ K . . . . .	74
6.11	$F - U$ -Diagramm . . . . .	76
6.12	$N - U$ -Diagramm . . . . .	77
6.13	Anpassung des ER-Spektrums bei $T = 80$ K für Probe 275 . .	78
6.14	Elektroreflexion der AlGaN Probe 275 bei $T = 80$ K . . . . .	79
6.15	Temperaturabhängige F-U-Diagramme . . . . .	80
6.16	Polarisation abhängig vom Al-Gehalt . . . . .	83

# Tabellenverzeichnis

4.1	Schichtdicken der GaN-Proben . . . . .	46
4.2	Schichtdicken der AlGaN-Proben . . . . .	47
6.1	Parameter der binären Nitridverbindungen GaN und AlN . . . . .	75
6.2	Polarisation und Gitterkonstanten der ZMN-Proben . . . . .	82
A.1	Exzitonische Übergänge im GaN von ZMN-Proben . . . . .	87
A.2	Exzitonische Übergänge im GaN von HVPE und OSRAM-Proben . . . . .	88
A.3	Exzitonische Übergänge im GaN . . . . .	89

# Literaturverzeichnis

- [1] Shuji Nakamura, Masayuki Senoh, Naruhito Iwasa, Shin ichi Nagahama, *High-power InGaN single-quantum-well-structure blue and violet light-emitting diodes*, Appl. Phys. Lett. **67**, 1868 (1995)
- [2] S. Nakamura, M. Senoh, N. Iwasa, S. Nagahama, *High-Brightness InGaN Blue, Green and Yellow Light-Emitting Diodes with Quantum Well Structures*, Jpn. J. Appl. Phys. **34**, L797 (1995)
- [3] S. Su, C. Hou, M. Yokoyama, S. Chenb, *Nitride-Based Blue-Light-Emitting Diodes with ITO-Covered Ni/Au Mesh p-Contacts*, J. Electrochem. Soc **153**, G87 (2006)
- [4] S. Nakamura, M. Senoh, S. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, H. Kiyoku, Y. Sugimoto, T. Kozaki, H. Umemoto, M. Sano, K. Chocho, *Continuous-wave operation of InGaN/GaN/AlGaIn-based laser diodes grown on GaN substrates*, Appl. Phys. Lett **72**, 2014 (1998)
- [5] U. Karrer, A. Dobner, O. Ambacher, M. Stutzmann, *AlGaIn-based ultraviolet light detectors with integrated optical filters*, J. Vac. Sci. Technol. **18**, 757 (2000)
- [6] D. Walker, E. Monroy, P. Kung, J. Wu, M. Hamilton, F. J. Sanchez, J. Diaz, M. Razeghib, *High-speed, low-noise metal–semiconductor–metal ultraviolet photodetectors based on GaN*, Appl.Phys.Lett **74**, 762 (1999)
- [7] M. A. Khan, A. Bhattacharai, J. N. Kuznia, D. T. Olson, *High electron mobility transistor based on a GaN-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N heterojunction*, Appl.Phys.Lett. **63**, 1214 (1993)
- [8] O. Ambacher, J. Majewski, C. Miskys, A. Link, M. Hermann, M. Eickhoff, M. Stutzmann, F. Bernardini, V. Fiorentini, V. Tilak, B. Schaff, L. F. Eastman, *Pyroelectric properties of Al(In)GaIn/GaN hetero- and quantum well structures*, J. Phys. Condens. Matter **14**, 3399 (2002)
- [9] N. Maeda, K. Tsubaki, T. Saitoh, N. Kobayashi, *High-temperature electron transport properties in AlGaIn/GaN heterostructures*, Appl. Phys. Lett. **79**, 1634 (2001)
- [10] S. Rajan, H. Xing, S. DenBaars, U. K. Mishra, D. Jena, *AlGaIn/GaN polarization-doped field-effect transistor for microwave power applications*, Appl.Phys.Lett **84**, 1591 (2004)

## LITERATURVERZEICHNIS

- [11] A. Osinsky Q. Chen R. Gaska, J. W. Yang, M. Asif Khana, A. O. Orlov, G. L. Snider, M. S. Shur, *Electron transport in AlGa<sub>N</sub>-Ga<sub>N</sub> heterostructures grown on 6H-SiC substrates*, Appl. Phys. Lett. **72**, 707 (1998)
- [12] R. Oberhuber, G. Zandler, P. Vogla, *Mobility of two-dimensional electrons in AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> modulation-doped field-effect transistors*, Appl.Phys.Lett **73**, 818 (1998)
- [13] H. C. Yang, T. Y. Lin, Y. F. Chen, *Nature of the 2.8-eV photoluminescence band in Si-doped Ga<sub>N</sub>*, Phys. Rev. B **62**, 12593 (2000)
- [14] O. Ambacher, J. Smart, J. R. Shealy, N. G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, W. J. Schaff, L. F. Eastman, R. Dimitrov, L. Wittmer, M. Stutzmann, W. Rieger, J. Hilsenbeck, *Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N- and Ga-face AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> heterostructures*, J. Appl. Phys. **85**, 3222 (1999)
- [15] M. Greve, *Optische Spektroskopie an ultraviolett-emittierenden Ga<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub>-Heterostrukturen*, Diplomarbeit, Technische Universität Braunschweig (2003)
- [16] M. Leszczynski, E. Litwin-Staszewska, J. Bak-Misiuk, J.Domagala, *Lattice-Constant of doped semiconductor*, Acta Physica Polonica A **88**, 837 (Nov 1995)
- [17] J. Hartwig, S. Grosswig, *Measurement of X-Ray-Diffraction angles of perfect monocrystals with high-accuracy using a single-crystal Diffractometer*, Phsica Status Solidi A **115**, 369 (Okt 1989)
- [18] C. Roder, S. Einfeldt, S. Figge, D. Hommel, *Temperature dependence of the thermal expansion of Ga<sub>N</sub>*, Phys. Rev. B **72**, 085218 (2005)
- [19] H. Angerer, D. Brunner, F. Freudenberg, O. Ambacher, M. Stutzmann, R. Höpler, T. Metzger, E. Born G. Dollinger, A. Bergmaier, S. Karsch, H.-J. Körner, *Determination of the Al mole fraction and the band gap bowing of epitaxial Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N films*, Appl. Phys. Lett. **71**, 1504 (Sept 1997)
- [20] F. Bernardini, V. Fiorentini, *Nonlinear macroscopic polariztion in III-V nitride alloys*, Phys. Rev. B **64**, 085207 (2001)
- [21] M. Suzuki, T. Uenoyama, *First-Principles Calculation of Effective Mass Parameters of Gallium Nitride*, Jpn. J. Appl. Phys. **34**, 3442 (1995)
- [22] J.H. Edgar, S. Strite, I. Akasaki, H. Amano, C. Wetzel, *Gallium Nitride and Related Semiconductors*, INSPEC 168ff (1999)
- [23] G.L. Bir, G.E. Pikus, *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors*, J. Wiley and Son (1974)
- [24] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, *Band parameters for nitrogen-containing semiconductors*, J. Appl. Phys. **94**, 3675 (2003)
- [25] C. Buchheim, R. Goldhahn, M. Rakel, C. Cobet, N. Esser, U. Rossow, D. Fuhrmann, A. Hangleiter, *Dielectric function and critical points of the band structure for AlGa<sub>N</sub> alloys*, phys. stat. sol. (b) **242**, 2610 (2005)

- [26] K.Thonke, K.Kornitzer, M.Grehl, R.Sauer, C.Kirchner, V.Schwegler, M.Kamp, M.Leszczynski, I.Grzegory, S.Porowski, *High-Resolution Polariton spectra and homoepitaxial GaN: Temperature dependence*, Proc.Int. Workshop on Nitride Semiconductors **IPAP Conf. Series 1**, 587
- [27] M. Tchernycheva, L. Nevou, L. Doyennette, F. H. Julien, E. Warde, F. Guillot, E. Monroy, E. Bellet-Amalric, T. Remmele, M. Albrecht, *Systematic experimental and theoretical investigation of intersubband absorption in GaN/AlN quantum wells*, Phys. Rev. B **73**, 125347 (2006)
- [28] W. Shan, B. D. Little, A. J. Fischer, J. J. Song, B. Goldenberg, W. G. Perry, M. D. Bremser, R. F. Davis, *Binding energy for the intrinsic excitons in wurtzite GaN*, Phys. Rev. B **54**, 16369 (1996)
- [29] W. Shan, R. J. Hauenstein, A. J. Fischer, J. J. Song, W. G. Perry, M. D. Bremser, R. F. Davis, B. Goldenberg, *Strain effects on excitonic transitions in GaN: Deformation potentials*, Phys. Rev. B **54**, 13460 (1996)
- [30] H. Y. Peng, M. D. McCluskey, Y. M. Gupta, M. Kneissl, N. M. Johnson, *Shock-induced band-gap shift in GaN: Anisotropy of the deformation potentials*, Phys. Rev. B **71**, 115207 (2005)
- [31] A. Poliana, M. Grimsditch, I. Grzegory, *Elastic constants of gallium nitride*, J. Appl. Phys. **79**, 3343 (1996)
- [32] K. Shimada, T. Sota, K. Suzuki, *First-principles study on electronic and elastic properties of BN, AlN, and GaN*, J. Appl. Phys. **84**, 4951 (1998)
- [33] K. Kornitzer, T. Ebner, K. Thonke, R. Sauer, C. Kirchner, V. Schwegler, M. Kamp, M. Leszczynski, I. Grzegory, S. Porowski, *Photoluminescence and reflectance spectroscopy of excitonic transitions in high-quality homoepitaxial GaN films*, Phys. Rev. B **60**, 1471 (1999)
- [34] O. Ambacher, B. Foutz, J. Smart, J.R. Shealy, N. G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, W. J. Schaff, L. F. Eastman, A.J. Sierakowski, R. Dimitrov, A. Mitchell, M. Stutzmann, *Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization in undoped and doped AlGaIn/GaN heterostructures*, J. Appl. Phys. **87**, 334 (2000)
- [35] J.P. Ibbetson, P.T. Fini, K.D. Ness, S.P. DenBaars, J.S. Speck, U.K. Mishra, *Polarization effects, surface states, and the source of electrons in AlGaIn/GaN heterostructure field effect transistors*, Appl.Phys.Lett. **77**, 250 (2000)
- [36] B. Jogai, *Influence of surface states on the two-dimensional electron gas in AlGaIn/GaN heterojunction field-effect transistors*, J.Appl.Phys. **93**, 1631 (2003)
- [37] C. Buchheim, *Photoreflection an AlGaIn/GaN-Heterostrukturen mit polarisationsinduziertem zweidimensionalen Elektronengas*, Diplomarbeit, Technische Universität Ilmenau (2003)
- [38] C. Buchheim, A.T. Winzer, R. Goldhahna, G. Gobsch, O. Ambacher, A Link, M. Eickhoff, M. Stutzmann, *Photoreflectance studies of (Al)Ga- and N-face AlGaInGaIn heterostructures*, Thin Solid Films **450**, 155 (2004)

## LITERATURVERZEICHNIS

- [39] B.O. Seraphin, R.B. Hess, *Franz-Keldysh-Effect above the fundamental edge in Germanium*, Phys. Rev. Lett. **14**, 138 (1965)
- [40] B.O.Seraphin, N.Bottka, *Band Structure Analysis from Elektro-Reflectance Studies*, Phys. Rev. **145**, 628 (1966)
- [41] B.O.Seraphin, N.Bottka, *Franz-Keldysh Effect of the Refractive Index in Semiconductors*, Phys. Rev. **139**, A560 (1965)
- [42] H.T. Grahn, *Introduction to semiconductor Physics*, Band 1, Kapitel Electroabsorption, 149 (World Scientific Publishing Co. Pte. LTd., 1999)
- [43] S. R. Kurtz, A. A. Allerman, D. D. Koleske, G. M. Peake, *Electroreflectance of the AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> heterostructure and two-dimensional electron gas*, Appl.Phys.Lett. **80**, 4549 (2002)
- [44] D.E. Aspnes, *Band nonparabolicities, broadening, and internal field distributions: The spectroscopy of Franz-Keldysh oscillations*, Phys. Rev. B **10**, 4288 (1974)
- [45] C. C. Kim, J. W. Garland, H. Abad, P. M. Raccah, *Modeling the optical dielectric function of semiconductors: Extension of the critical-point parabolic-band approximation*, Phys. Rev. B **45**, 11749 (1992)
- [46] K. Tonisch, *AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub>-Mischkristalle für die Sensorik*, Diplomarbeit, Technische Universität Ilmenau (2005)
- [47] K. Uchida, A. Watanabe, F. Yano, M. Kouguchi, T. Tanaka, S. Minagawa:, *Nitridation process of sapphire substrate surface and its effect on the growth of Ga<sub>N</sub>*, J. Appl. Phys. **79**, 3487 (1996)
- [48] H. Amano, N. Sawaki, I. Akasaki, Y. Toyoda, *Metalorganic vapor phase epitaxial growth of a high quality Ga<sub>N</sub> film using an Al<sub>N</sub> buffer layer*, Appl. Phys. Lett. **48**, 353 (1986)
- [49] A.C. Schmitz, A.T. Ping, M.A. Khan, Q. Chen, J.W. Yang, I. Adesida, *Schottky barrier properties of various metals on n-type Ga<sub>N</sub>*, Semicond. Sci. Technol. **11**, 1464 (1996)
- [50] Z. Fan, S. N. Mohammad, W. Kim, O. Aktas, A. E. Botchkarev, *Very low resistance multilayer Ohmic contact to n-Ga<sub>N</sub>*, Appl. Phys. Lett. **68**, 1672 (1996)
- [51] A.N. Bright, P.J. Thomas, M. Weyland, D.M Tricker, C.J. Humphreys, R. Davies, *Correlation of contact resistance with microstructure for Au/Ni/Al/Ti/AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> ohmic contacts using transmission electron microscopy*, J. Appl. Phys. **89**, 3143 (2001)
- [52] J. Chen, D.G. Ivey, J. Bardwell, Y. Liu, H. Tang, J.B. Webb, *Microstructural analysis of Ti/Al/Ti/Au ohmic contacts to n-AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub>*, J. Vac. Sci. Technol. **20**, 1004 (2002)



- [53] M.W. Fay, G. Moldovan, P.D. Brown, I. Harrison, J.C. Birbeck, B.T. Hughes, M.J. Uren, T. Martin, *Structural and electrical characterization of AuTiAl-Ti/AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> ohmic contacts*, J. Appl. Phys. **92**, 94 (2002)
- [54] A. Motayed, R. Bathe, M.C. Wood, O.S. Diouf, R.D. Vispute, S.N. Mohammad, *Electrical, thermal, and microstructural characteristics of Ti/Al/Ti/Au multilayer Ohmic contacts to n-type Ga<sub>N</sub>*, J. Appl. Phys. **93**, 1087 (2003)
- [55] J. A. Freitas, W. J. Moore, B. V. Shanabrook, G. C. B. Braga, S. K. Lee, S. S. Park, J. Y. Han, *Donor-related recombination processes in hydride-vapor-phase epitaxial Ga<sub>N</sub>*, Phys. Rev. B **66**, 233311 (2002)
- [56] D. Gogova, A. Kasic, H. Larsson, C. Hemmingsson, B. Monemar, F. Tuomisto, K. Saarinen, L. Dobos, B. Pécz, P. Gibart, B. Beaumont, *Strain-free bulk-like Ga<sub>N</sub> grown by hydride-vapor-phase-epitaxy on two-step epitaxial lateral overgrown Ga<sub>N</sub> template*, J. Appl. Phys. **96**, 799 (2004)
- [57] J. A. Freitas, *Optical studies of bulk and homoepitaxial films of III-V nitride semiconductors*, J. Cryst. Growth **281**, 168 (2005)
- [58] W. J. Moore, J. A. Freitas Jr., S. K. Lee, S. S. Park, J. Y. Han, *Magneto-optical studies of free-standing hydride-vapor-phase epitaxial Ga<sub>N</sub>*, Phys.Rev. B **65**, 081201 (2002)
- [59] A. Cingolani, M. Ferrara, M. Lugara, G. Scamarcio, *Continuous-wave operation of InGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub>-based laser diodes grown on Ga<sub>N</sub> substrates*, Solid State Communications, **58**, 823 (1986)
- [60] M. Lucht, M. Lerche, H.-C. Wille, Yu. V. Shvyd'ko, H. D. Rüter, E. Gerdau, P. Becker, *Precise measurement of the lattice parameters of alpha-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> in the temperature range 4.5-250 K using the Mössbauer wavelength standard*, J. Appl. Crystallography **36**, 1075 (2003)
- [61] R. Goldhahn, *Dielectric Function of Nitride Semiconductors: Recent Experimental Results*, Act. Phys. Pol. A **104**, 123 (2003)
- [62] M. Baeumler, S. Müller, K. Köhler, J. Wagner, *assessment of layer composition and thickness in ALGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> HEMT structures by spectroscopic ellipsometry*, Physica Status Solidi A **202**, 665 (2005)
- [63] H. Jiang, G. Y. Zhao, H. Ishikawa, T. Egawa, T. Jimbo, M. Umeno, *Determination of exciton transition energy and bowing parameter of AlGa<sub>N</sub> alloys in AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> heterostructure by means of reflectance measurement*, J. Appl. Phys. **89**, 1046 (2001)
- [64] S. R. Lee, A. F. Wright, M. H. Crawford, G. A. Petersen, J. Han, R. M. Biefeld, *The band-gap bowing of Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N alloys*, Appl.Phys.Lett **74**, 3344 (1999)
- [65] T. J. Ochalski, B. Gil, P. Lefebvre, N. Grandjean, M. Leroux, J. Massies, S. Nakamura, H. Morkoc, *Photoreflectance investigations of the bowing parameter in AlGa<sub>N</sub> alloys lattice-matched to Ga<sub>N</sub>*, Appl.Phys.Lett **74**, 3353 (1999)

## LITERATURVERZEICHNIS

- [66] E. Silveira, J.A. Freitas, O.J. Glembocki, G.A. Slack, J.A. Schowalter, *Excitonic structure of bulk AlN from optical reflectivity and cathodoluminescence measurements*, Phys. Rev. B **71**, 041201 (2005)
- [67] A.S. Barker, M. Ilegems, *Infrared Lattice Vibrations and Free-Electron Dispersion in GaN*, Phys. Rev. B **7**, 743 (1973)
- [68] Y. Goldberg, *Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe*, 31–47 (John Wiley Sons Inc., New York 2001)
- [69] M. Suzuki, T. Uenoyama, A. Yanase, *First-Principles Calculation of Effective Mass Parameters of AlN and GaN*, Phys. Rev. B **52**, 8132 (1995)
- [70] A. T. Winzer, R. Goldhahn, G. Gobsch, A. Link, M. Eickhoff, U. Rossow, A. Hangleiter, *Determination of the polarization discontinuity at the AlGaN/GaN interface by electroreflectance spectroscopy*, Appl.Phys.Lett **86**, 181912 (2005)
- [71] W. Mönch, *Electronic Properties of Semiconductor Interfaces* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2004)
- [72] A. T. Winzer, R. Goldhahn, G. Gobsch, A. Dadgar, A. Krost, O. Weidemann, M. Stutzmann, M. Eickhoff, *Electroreflectance spectroscopy of Pt/AlGaN/GaN heterostructures exposed to hydrogen*, Appl.Phys.Lett **88**, 024101 (2006)
- [73] A. T. Winzer, R. Goldhahn, G. Gobsch, D. Fuhrmann, A. Hangleiter, A. Dadgar, A.Krost, *Dielectric Function of GaN: Excitons and Electric Fields*, Phys. Rev. B **akzeptiert** (2006)

# Danksagung

An dieser Stelle möchte ich allen danken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Mein besondere Dank gilt

Herrn Prof. Dr. G. Gobsch für die Möglichkeit, meine Experimente in seinem Fachgebiet durchzuführen, und für sein stetes Interesse am Fortgang der Arbeit.

Mein größter Dank gebührt Dr. R. Goldhahn, der diese Arbeit betreut hat. Er nahm sich Zeit für ausführliche Diskussionen und war dank seiner langjährigen Erfahrungen auf dem Gebiet der optischen Spektroskopie ein stets fachkundiger Ansprechpartner.

K. Tonisch sei gedankt für die freundliche Bereitstellung der am ZMN hergestellten GaN- und AlGaN-Proben und für die zahlreichen Diskussionen der Messergebnisse.

Als Ansprechpartner für alle geräte- und messtechnischen Fragen im Labor diente Dr. N. Stein, der stets an der schnellen Lösung auftretender Probleme arbeitete.

Außerdem danke ich den Doktoranden im Fachgebiet A.T. Winzer, T. Erb und P. Schley, die jederzeit für Diskussionen, sei es fachlicher oder computertechnischer Natur, bereit standen.

Besonders möchte ich mich bei C. Buchheim bedanken, der mir stets bei der Erlangung der Messdaten betreut hat. Weiterhin bedanke ich mich bei Ihm für die Kontaktierung der Proben und die zahlreichen Diskussionen fachlicher Natur.

Allen noch nicht namentlich genannten Mitarbeitern des Fachgebietes Experimentalphysik I bin ich für das angenehme Arbeitsklima in der Arbeitsgruppe verbunden.

Schließlich bedanke ich mich bei meinen Eltern, ohne die das Studium nicht möglich gewesen wäre, für ihre großartige Unterstützung.

# Erklärung

Ich versichere, die vorliegende Arbeit selbständig und nur unter Zuhilfenahme der angegebenen Hilfsmittel angefertigt zu haben.

Ilmenau,

---

Thomas Klein