

**Optische und elektronische
Eigenschaften von
AlGaN/GaN-Heterostrukturen**

DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

vorgelegt der Fakultät für
Mathematik und Naturwissenschaften
der Technischen Universität Ilmenau

von Dipl.-Ing. Andreas T. Winzer
geboren am 22.12.1976 in Weimar

1. Gutachter: Prof. Dr. rer. nat. habil. Gerhard Gobsch
(Technische Universität Ilmenau)
2. Gutachter: PD Dr.-Ing. habil. Frank Schwierz
(Technische Universität Ilmenau)
3. Gutachter: Prof. Dr. rer. nat. habil. Alois Krost
(Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg)

Tag der Einreichung: 02.12.2007

Tag der wissenschaftlichen Aussprache: 28.10.2008

Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit behandelt die elektronischen Materialeigenschaften von AlGa_N/Ga_N-Heterostrukturen. Die Auswertung optischer Spektren mit komplexen Modellen ermöglichte erstmals die Bestätigung des theoretisch vorausgesagten Verlaufes der Polarisationsdiskontinuität (auch Polarisationsladung genannt) in Abhängigkeit vom Al-Gehalt durch zuverlässige Experimente. Weiterhin wurde festgestellt, dass die Polarisationsdiskontinuität im Bereich von 5 K bis Raumtemperatur konstant ist.

Das hier verwendete Verfahren basiert auf der Auswertung von Elektrofreflexions- (ER-)spektren und nutzt die spezifische Abhängigkeit der Schichtfeldstärke von der angelegten elektrischen Spannung. In dieser Arbeit wurde das Verfahren konsequent weiterentwickelt und übertrifft so alle alternativen Methoden in der Genauigkeit.

ER-Spektren von Gruppe-III-Nitriden weisen generelle Besonderheiten auf. In unmittelbarer Nähe zur Bandkante können ER-Spektren im Gegensatz zu schmallückigen Halbleitern (z.B. GaAs) nicht durch konstante Seraphinkoeffizienten beschrieben werden. Jedoch ergibt die Analyse der Franz-Keldysh-Oszillationen nach der Aspnes'schen Methode wie bei schmallückigen Halbleitern den korrekten Feldstärkebetrag.

Optische und insbesondere ER-Spektren von Gruppe-III-Nitridschichten lassen sich nur vollständig durch Berücksichtigung der Exzitonen im elektrischen Feld beschreiben. Dazu wurde in dieser Arbeit ein von Blossey vorgeschlagenes Modell auf die Nitride angewandt und in einer Software umgesetzt. Durch numerische Simulationen wurde festgestellt, dass die energetische Position der Exzitonenhauptresonanz und deren spektrale Breite näherungsweise einer linearen Abhängigkeit von der elektrischen Feldstärke folgen. Der dargestellte Ansatz zur Spektrensimulation ist dadurch einzigartig, dass man mit ihm Exzitonen in inhomogenen elektrischen Feldern quantitativ beschreiben kann. Die gute Übereinstimmung von berechneten und experimentellen Spektren bekräftigt die Zuverlässigkeit der in dieser Arbeit bestimmten Materialgrößen.

Die Wirkungsweise von AlGa_N/Ga_N-Heterostrukturen als chemische Sensoren wurde ebenfalls optisch untersucht. Werden Pt-kontaktierten Proben Wasserstoff ausgesetzt, erhöht sich die Dichte des zweidimensionalen Elektronengases um einige $10^{12}e/cm^2$ und die Schottkybarriere verringert sich um bis zu 0,85 V. Bei Proben mit unkontaktierter, freier Oberfläche führt die Benetzung mit einer polaren Flüssigkeit (Azeton) zu einer Potenzialerhöhung und zu einer Verringerung der Oberflächennettoladung.

Abstract

The electronic material properties of AlGaN/GaN heterostructures were investigated. The analysis of optical spectra by complex models allowed for the first time to confirm the theoretically predicted dependence of the polarisation discontinuity (also called polarisation charge) on the Al content by reliable experiments. Furthermore, it is shown that the polarisation discontinuity is constant over the temperature range from 5 K up to room temperature.

The method employed here is based on the analysis of electroreflectance (ER) spectra and exploits the specific dependence of the electric field strength within a layer on the applied electric voltage. In this work this method is consequently refined to surpass all alternative methods in accuracy.

ER spectra of group-III-nitrides possess some general peculiarities: (i) In direct proximity to the band gap they can not be described by constant Seraphin coefficients in contrast to small gap semiconductors (e.g. GaAs). (ii) Though, the analysis of the Franz-Keldysh oscillations by Aspnes' method yields the correct values of the electric field strength as it is the case for small gap semiconductors.

Optical and especially ER spectra of group-III-nitrides can only be described completely by taking into account for excitons in electric fields. For this a model proposed by Blossey was applied to nitride semiconductors and implemented into a software program. By extensive numerical simulations it was found that the energetic position of the exciton main resonance as well as its spectral width depend linearly on the electric field strength. The approach presented is unique since it allows for a quantitative description of excitons in inhomogeneous electric fields. The good agreement between experiment and simulation supports the reliability of the material properties presented in this work.

The operation of AlGaN/GaN heterostructures as chemical sensors was investigated by means of optical spectra too. If Pt contacted samples have been exposed to hydrogen the density of their two dimensional electron gases were raised by several $10^{12}e/cm^2$ while the Schottky barrier heights were lowered by up to 0.85 V. Wetting of the free surface of not contacted samples by a polar liquid (acetone) led to an increase of the surface potential and a decrease of the net surface charge density.

Inhaltsverzeichnis

Abkürzungsverzeichnis	vi
Symbolverzeichnis	vii
1 Einleitung	1
2 Eigenschaften der Gruppe-III-Nitride	5
2.1 Kristallstruktur und Polarität	5
2.2 Verspannung	7
2.3 Spontane und piezoelektrische Polarisierung	13
2.4 Polarisationsdiskontinuität und zweidimensionales Elektronengas .	16
2.5 Bandlückenenergien und optische Auswahlregeln	19
2.5.1 Volumenhalbleiter	19
2.5.2 Verspannte Schichten	22
3 Die dielektrische Funktion: Modelle, Numerik, Resultate	25
3.1 Modelle	25
3.1.1 Allgemeine Formulierung	26
3.1.2 Interbandübergänge ohne Wechselwirkung	28
3.1.3 Interbandübergänge im elektrischem Feld: Der Franz-Keldysh- Effekt	29
3.1.4 Exzitonen ohne Feldeinfluss: Elliotts Modell	31
3.1.5 Exzitonen im elektrischen Feld	34
3.2 Die numerische Umsetzung des Blossey-Modells	37
3.2.1 Die Berechnung von $f^2(0)$	38
3.2.2 Die Berechnung von $g^2(0)$	41
3.3 Resultate	42
3.3.1 Allgemeingültiges	42
3.3.2 Galliumnitrid	46
3.3.3 Aluminiumgalliumnitrid	51
4 Die Signalgröße der Elektro- und Photoreflexion	53
4.1 Allgemeine Formulierung	53

4.2	Seraphinkoeffizienten	55
4.3	Feldstärkebestimmung	58
5	Proben und Experimentelle Methoden	61
5.1	Probenaufbau	61
5.2	Vorcharakterisierung der Proben	65
5.3	Photolumineszenzspektroskopie	66
5.4	Elektro- und Photoreflexion, Photostrom	68
6	AlGaIn/GaN-Heterostrukturen mit Schottkykontakt	71
6.1	Die Bestimmung der Polarisationsdiskontinuität	72
6.1.1	Experimentelle Methode	72
6.1.2	Identifikationsmerkmale der 2DEG-Verarmung	74
6.1.3	Auswertung der ER-Spektren	77
6.2	Die Abhängigkeit der Polarisationsdiskontinuität vom Al-Gehalt .	79
6.3	Die Temperaturabhängigkeit der Polarisationsdiskontinuität . . .	83
6.3.1	Theorie	84
6.3.2	Experiment	85
6.4	Die Wirkung von Wasserstoff auf Pt/AlGaIn/GaN-Heterostrukturen	88
6.5	Die Modellierung feldabhängiger ER-Spektren	94
6.5.1	Vielschichtmodell	94
6.5.2	ER-Spektren der GaN-Kanalschicht	96
6.5.3	ER-Spektren der AlGaIn-Barrierenschicht	99
7	Unkontaktierte AlGaIn/GaN-Heterostrukturen	103
7.1	Photoreflexionsuntersuchungen bei Raumtemperatur	104
7.2	Temperaturabhängigkeit der Feldstärke in der AlGaIn-Barriere . .	107
7.3	Polare Flüssigkeiten auf der Oberfläche	112
8	Zusammenfassung und Ausblick	115
A	Anhang	117
	Literaturverzeichnis	117

Im Rahmen der Promotion veröffentlichte Arbeiten

- [1] A.T. Winzer, R. Goldhahn, C. Buchheim, O. Ambacher, A. Link, M. Stutzmann, Y. Smorchkova, U. K. Mishra, J. S. Speck, *Photoreflectance Studies of N- and Ga-face AlGa_N/Ga_N Heterostructures Confining a Polarisation Induced 2DEG*, Physica Status Solidi B **240**, 380 (2003).
- [2] C. Buchheim, A.T. Winzer, R. Goldhahn, G. Gobsch, O. Ambacher, A. Link, M. Eickhoff, M. Stutzmann, *Photoreflectance studies of (Al)Ga- and N-face AlGa_N/Ga_N heterostructures*, Thin Solid Films **450**, 155 (2004).
- [3] A.T. Winzer, R. Goldhahn, G. Gobsch, A. Dadgar, H. Witte, A. Krtschil, A. Krost, *Temperature dependence of the built-in electric field strength of AlGa_N/Ga_N heterostructures on Si(111) substrate*, Superlatt. Microstruct. **36**, 693 (2004).
- [4] R. Goldhahn, A.T. Winzer, V. Cimalla, O. Ambacher, C. Cobet, W. Richter, N. Esser, J. Furthmüller, F. Bechstedt, H. Lu, W.J. Schaff, *Anisotropy of the Dielectric Function for wurtzite In_N*, Superlatt. Microstruct. **36**, 591 (2004).
- [5] A.T. Winzer, R. Goldhahn, G. Gobsch, A. Link, M. Eickhoff, U. Rossow, A. Hangleiter, *Determination of the polarization discontinuity at the Al-Ga_N/Ga_N interface by electroreflectance spectroscopy*, Appl. Phys. Lett. **86**, 181912 (2005).
- [6] A. T. Winzer, R. Goldhahn, G. Gobsch, A. Dadgar, A. Krost, O. Weidemann, M. Stutzmann, M. Eickhoff, *Electroreflectance spectroscopy of Pt/AlGa_N/Ga_N heterostructures exposed to gaseous hydrogen*, Appl. Phys. Lett. **88**, 024101 (2006).
- [7] R. Goldhahn, P. Schley, A.T. Winzer, G. Gobsch, V. Cimalla, O. Ambacher, C. Rakel, M. Cobet, N. Esser, H. Lu, W.J. Schaff, *Detailed analysis of the dielectric function for wurtzite In_N and In-rich InAlN alloys*, Physica Status Solidi A **203**, 42 (2006).
- [8] R. Goldhahn, P. Schley, A.T. Winzer, C. Rakel, M. Cobet, N. Esser, H. Lu, W.J. Schaff, *Critical points of the band structure and valence band ordering at the Γ point of wurtzite In_N*, J. Cryst. Growth **288**, 273 (2006).

-
- [9] P. Schley, R. Goldhahn, A.T. Winzer, G. Gobsch, V. Cimalla, O. Ambacher, M. Rakel, C. Cobet, N. Esser, H. Lu, W.J. Schaff, *Transition energies and Stokes shift analysis for In-rich InGaN alloys*, Physica Status Solidi B **243**, 1572 (2006).
- [10] R. Goldhahn, P. Schley, A.T. Winzer, M. Rakel, C. Cobet, N. Esser, H. Lu, W. J. Schaff, *Transition energies and bowing parameters for In-rich In-GaN and InAlN alloys*, in K. Godehusen (Hg.), *BESSY Highlights 2005: Annual Report*, 153 (Berliner Elektronenspeicherring-Gesellschaft für Synchrotronstrahlung m.b.H, Berlin, 2006).
- [11] C. Buchheim, R. Goldhahn, A. T. Winzer, C. Cobet, M. Rakel, N. Esser, U. Rossow, D. Fuhrmann, A. Hangleiter, O. Ambacher, *Critical points of the bandstructure of AlN/GaN superlattices investigated by spectroscopic ellipsometry and modulation spectroscopy*, Physica Status Solidi C **3**, 2009 (2006).
- [12] A. T. Winzer, G. Gobsch, R. Goldhahn, D. Fuhrmann, A. Hangleiter, A. Dadgar, A. Krost, *Influence of excitons and electric fields on the dielectric function of GaN: Theory and Experiment*, Phys. Rev. B **74**, 125207 (2006).
- [13] C. Buchheim, R. Goldhahn, A.T. Winzer, G. Gobsch, U. Rossow, D. Fuhrmann, A. Hangleiter, F. Furtmayr, M. Eickhoff, *Stark shift of interband transitions in AlN/GaN superlattices*, Appl. Phys. Lett. **90**, 241906 (2007).
- [14] P. Schley, R. Goldhahn, A. T. Winzer, G. Gobsch, V. Cimalla, O. Ambacher, H. Lu, W. J. Schaff, M. Kurouchi, Y. Nanishi, M. Rakel, C. Cobet, N. Esser, *Dielectric function and Van Hove singularities for In-rich $In_xGa_{1-x}N$ alloys: Comparison of N- and metal-face materials*, Phys. Rev. B **75**, 205204 (2007).
- [15] R. Goldhahn, A. T. Winzer, A. Dadgar, A. Krost, O. Weidemann, M. Eickhoff (Editor's Choice), *Modulation spectroscopy of AlGaN/GaN heterostructures: The influence of electron-hole interaction*, Physic Status Solidi A **204**, 447 (2007).
- [16] R. Goldhahn, C. Buchheim, P. Schley, A.T. Winzer, H. Wenzel, *Optical constants of wurtzite group-III nitrides*, in J. Piprek (Hg.), *Nitride Semiconductor Devices: Principles and Simulation*, 95 (Wiley-VCH, Weinheim, 2007).

Abkürzungsverzeichnis

2DEG	zweidimensionales Elektronengas, <i>two-dimensional electron gas</i>
2DHG	zweidimensionales Löchergas, <i>two-dimensional hole gas</i>
A, B, C	optische Interbandübergänge $\Gamma_9^v \rightarrow \Gamma_7^c$, $\Gamma_{7+}^v \rightarrow \Gamma_7^c$ bzw. $\Gamma_{7-}^v \rightarrow \Gamma_7^c$
BM	Burstein-Moss
<i>c</i> -Achse	Kristallachse parallel zur [0001]-Richtung
C-U	spannungsabhängige Kapazitätsmessung
D ⁰ X ^A	donatorgebundenes Exziton
DAP	Donator-Akzeptor-Paarübergang
DF	dielektrische Funktion
DGL	Differenzialgleichung
ER	Elektroreflexion
ES	Elektronensatellit
FET	Feldeffekttransistor
FKO	Franz-Keldysh-Oszillationen
FX ^{A,B,C}	freie Exzitonenzustände aus der Kopplung des Γ_7^c -Leitungsbandes mit den Valenzbändern Γ_9^v , Γ_{7+}^v bzw. Γ_{7-}^v
HEMT	Feldeffekttransistor mit hoher Elektronenmobilität, <i>high electron mobility transistor</i>
LD	Laserdiode
LED	Lumineszenzdiode, <i>light emitting diode</i>
LO	longitudinales optisches Phonon
MBE	Molekularstrahlepitaxie, <i>molecular beam epitaxy</i>
MOVPE	metallorganische Gasphasenepitaxie, <i>metal organic chemical vapor phase epitaxy</i>
PC	Photostrom, <i>photo current</i>
PL	Photolumineszenz
PLE	Photolumineszenzanregung
PR	Photoreflexion
RLZ	Raumladungszone
SE	Spektralellipsometrie
SPR	selbstkonsistente Schrödinger-Poisson-Rechnung

Symbolverzeichnis

$\Re(f), \Im(f)$	Real- bzw. Imaginärteil von f
${}_2F_1$	eine hypergeometrische Funktion
Ai, Bi	Airyfunktionen
erf	Fehlerfunktion
α	thermischer Ausdehnungskoeffizient, erster Varshni-Parameter
$\alpha(\hbar\omega)$	Absorptionskoeffizient
β	zweiter Varshni-Parameter, dimensionslose Übergangsenergie im Blosseymodell
Γ	Verbreiterungsenergie der Lorentz- oder der Gaußfunktion
Δ_{AB}, Δ_{AC}	energetische Aufspaltung zwischen den Valenzbändern A und B bzw. A und C
Δ_{cr}, Δ_{so}	Kristallfeld-, bzw. Spin-Bahn-Energie
ΔP	Polarisationsdiskontinuität, -ladung
$\Delta R/R$	Elektroreflexionssignal
$\bar{\epsilon}(\hbar\omega)$	komplexe dielektrische Funktion
ϵ_∞	„Hochfrequenzdielektrizitätskonstante“
ϵ_0	Dielektrizitätskonstante des Vakuums
$\epsilon_1(\hbar\omega), \epsilon_2(\hbar\omega)$	Real-, bzw. Imaginärteil der dielektrischen Funktion in Einheiten von ϵ_0
ϵ_r	relative Dielektrizitätskonstante des Materials in Einheiten von ϵ_0
$\epsilon_{kl}, \epsilon_k$	Deformationstensor zweiter Stufe bzw. nach Voigt
$\epsilon_{ }, \epsilon_{\perp}$	Deformation in [0001]-Richtung bzw. senkrecht dazu
$\kappa(\hbar\omega)$	Extinktionskoeffizient
$\varkappa_i, \varkappa'_i$	dimensionslose Energieeigenwerte im Blosseymodell
λ	Wellenlänge
μ	reduzierte effektive Exzitonenmasse
μ_0	magnetische Feldkonstante
μ_{Dip}	elektrisches Dipolmoment
$\rho(\hbar\omega)$	kombinierte Zustandsdichte
$\rho(\vec{r})$	Ladungsdichte
$\sigma_{ }, \sigma_{\perp}$	mechanische Normalspannung mit dem Kraftvektor parallel zur [0001]-Richtung bzw. mit der Kraft senkrecht dazu

σ_{ij}, σ_i	mechanischer Spannungstensor zweiter Stufe bzw. nach Voigt
σ_0	Dichte geladenen Oberflächenzustände
Φ_B	Schottkybarrierenhöhe
Φ_0	Oberflächenpotenzial
$\phi_n(\vec{r})$	Wellenfunktion des n -ten Zustands
ω	Kreisfrequenz des Lichts
a	Gitterkonstante senkrecht zur [0001]-Richtung
a_B	Bohrradius
b	„bowing“-Parameter
C_{ijkl}, C_{ij}	Elastizitätstensor vierter Stufe bzw. nach Voigt
c	Gitterkonstante parallel zur [0001]-Richtung
c_0	Vakuumllichtgeschwindigkeit
\vec{D}	Vektor der elektrischen Verschiebungsflussdichte
D	Dicke der AlGaIn-Barriere
\vec{E}	Vektor der elektrischen Feldstärke des Lichts
E_F	Ferminiveau
E_n	Energie des n -ten Zustands
E_g	Bandlücke des Halbleiters
e	Elementarladung
e_{ki}	piezoelektrischer Tensor
\vec{F}, F	Vektor bzw. Betrag der elektrostatischen Feldstärke
F_{ion}	klassische Ionisationsfeldstärke des Exzitons
F_S	Schwellfeldstärke
$f_{\chi_i, \beta}(x), g_{\chi'_i, \beta}(x)$	Eigenfunktionen der Bloch-DGL
$\hbar\omega$	Photonenenergie
\hbar	reduziertes Planck'sches Wirkungsquantum
$\hbar\theta$	elektrooptische Energie
k	Ladungsträgerimpuls
\vec{k}_{opt}	Wellenzahlvektor
M	Impulsmatrixelement zwischen den Blochfunktionen des Valenz- und des Leitungsbandes
m_e^*, m_h^*	effektive Masse der Elektronen bzw. Löcher
m_0	Ruhemasse des Elektrons
$N_{2\text{DEG}}$	Flächendichte des zweidimensionalen Elektronengases
N_{Dip}	Flächendichte der Dipole
N_D^+	Donatorkonzentration

n	Nummer des quantenmechanischen Zustandes
$\bar{n}(\hbar\omega), n(\hbar\omega)$	komplexe bzw. reelle Brechzahl
\vec{P}	Vektor der Gesamtpolarisation
$P^{\text{SP}}, P^{\text{PE}}$	spontane bzw. piezoelektrische Polarisation
R	Reflektivität
R_y	Rydbergenergie
\vec{r}	Vektor der Ortskoordinate
T	Temperatur
t	Zeit
U_{gl}	Gleichspannung
U_{mod}	Modulationsspannung
U_{S}	Schwellspannung
u	Anion-Kationabstand in Einheiten von c in [0001]-Richtung
$V(\vec{r})$	elektrostatistisches Potenzial
x	Aluminiumgehalt, dimensionslose Ortskoordinate im Blosseymodell
z	Ortskoordinate in Wachstumsrichtung
z_{RLZ}	Tiefe der Raumladungszone

1 Einleitung

Elektronische Bauelemente auf der Basis weitlückiger Halbleiter wie GaN, AlN und ihrer Mischkristalle haben bereits ihre Überlegenheit gegenüber einigen konventionellen Bauelementen unter Beweis gestellt. Sie werden daher ein großes Marktpotenzial erlangen [17]. So wurden kommerziell erhältliche Mikrowellenverstärker realisiert, die gegenüber Galliumarsenid- oder Silizium-Bauelementen 6-fach leistungsstärker sind [18]. Außerdem werden Schaltkreise aus weitlückigen Halbleitern bei noch höheren Temperaturen als bisher einwandfrei funktionieren [19]. Dies verringert den Kühlaufwand, die Abmessungen und die Kosten der Komponenten und bringt bedeutende Vorteile für die Radartechnik und Breitbandkommunikation [17, 20].

Mit den Gruppe-III-Nitriden wurden effiziente Laser- (LD) und Leuchtdioden (LED) realisiert [21–23]. Durch Legierung von GaN mit InN und AlN kann der Spektralbereich vom nahen Infrarot (0,68 eV bzw. ca. 1800 nm) bis in das ferne Ultraviolett (6,213 eV bzw. ca. 200 nm) abgedeckt werden. Aktuelle Anwendungen sind weiße LEDs für Beleuchtungszwecke und blaue LDs zum Lesen und Beschreiben optischer Speichermedien [24, 25]. Ferner wird an der Entwicklung von LED-Farbdisplays, Detektoren zur Flammenüberwachung und ultravioletten Strahlungsquellen zur Wasserentkeimung gearbeitet [26, 27].

Dessen ungeachtet sind noch nicht alle Materialeigenschaften hinreichend gut quantifiziert. Eine der physikalisch interessantesten unter ihnen ist die Pyroelektrizität. Diese Eigenschaft zeichnet die Gruppe-III-Nitride mit hexagonaler Kristallstruktur gegenüber vielen anderen Halbleitern wie den Arseniden, Phosphiden, Antimoniden, Silizium und Germanium aus. Sie bewirkt eine makroskopische Polarisierung ohne ein von außen eingepprägtes elektrisches Feld. Aus ihr resultiert eine Polarisationsdiskontinuität ΔP an Grenzflächen,¹ welche ein Gegenstand dieser Arbeit ist. Durch die großen Beträge von ΔP entstehen in dünnen Nitridschichten wiederum elektrische Felder, die ein Vielfaches der Durchbruchfeldstärken von Si oder GaAs übersteigen können [28].

Der Wert von ΔP ist beispielsweise ausschlaggebend für die Charakteristik eines Feldeffekttransistors mit hoher Elektronenmobilität (HEMT). Durch die

¹Da ΔP die Einheit der elektrischen Flächenladungsdichte besitzt, wird auch von einer Polarisationsladung gesprochen.

Polarisationsladung an der AlGa_N/Ga_N-Heterogrenze entsteht ohne Dotierung ein steuerbarer Kanal mit einem zweidimensionalen Elektronengas (2DEG) hoher Dichte und Leitfähigkeit [29]. Auch bei der Dimensionierung von LEDs und LDs berücksichtigt man den Einfluss der Polarisation auf die Emissionswellenlänge [30].

ΔP wurden bisher aus ab-initio-Rechnungen gewonnen [31]. Gesicherte experimentelle Aussagen existieren jedoch nicht. Zwar wurde eine Reihe von AlGa_N/Ga_N- und InGa_N/Ga_N-Heteroübergängen mit kapazitiven Messmethoden [32–35] untersucht, dabei müssen aber schwer erfassbare Parameter, welche die Kontakt-konfiguration der Probe betreffen, angenommen werden. Dies ist der Genauigkeit abträglich.

In zwei Arbeiten wurde die Elektreflexions- (ER-)Spektroskopie als Alternative vorgeschlagen [36, 37]. Die Idee beruht darauf, dass ΔP die elektrische Feldstärke F unmittelbar beeinflusst und man F mit ER-Spektroskopie direkt bestimmen kann. Es werden lediglich die gut bekannten Ladungsträgermassen vorausgesetzt.

Die beiden Veröffentlichungen [36, 37] waren der Ausgangspunkt dieser Arbeit, um ΔP für AlGa_N/Ga_N-Paarungen mit maximaler Präzision bis zu einem Al-Anteil von 30% zu bestimmen. Außerdem sollte das Analyseverfahren für die ER-Spektren von Gruppe-III-Nitriden erstmals auf eine theoretisch gesicherte Grundlage gestellt werden. Denn bisher wurden die für schmallückige Halbleiter wie GaAs entwickelten Theorien [38, 39] kritiklos übernommen. Die dafür getroffenen Voraussetzungen gelten aber für die Gruppe-III-Nitride nicht, denn im Gegensatz zu schmallückigen Halbleitern spielen Exzitonen bei der Wechselwirkung mit Licht eine bedeutende Rolle. Bereits Anfang der 70-er Jahre sind numerische Modelle zur Beschreibung von Exzitonen in Halbleiterschichten mit elektrischem Feld bekannt [40–43]. Sie fanden nur vereinzelt Anwendung, da damals Supercomputer zur Spektrensimulation erforderlich waren. Heutzutage macht der Fortschritt in der Computertechnik und der mathematischen Programmierung dies jedoch praktikabel. Die Ziele dieser Arbeit lassen sich wie folgt zusammenfassen:

1. Erstmalige Berechnung des Einflusses elektrischer Felder auf die dielektrische Funktion von Nitridhalbleitern unter konsequenter Berücksichtigung der Elektron-Loch-Wechselwirkung nach einem Modell von Blossey [42, 43].
2. Vergleich der Ergebnisse für Ga_N und AlGa_N mit den Näherungsformeln der Ein-Elektronen-Theorie (Franz-Keldysh-Effekt) [44, 45].
3. Verifikation des theoretischen Modells durch Spektrensimulation und Vergleich mit experimentellen Ergebnissen für AlGa_N/Ga_N-HEMTs.

-
4. Quantitative Auswertung experimenteller Spektren zur Bestimmung elektronischer Parameter von AlGaN/GaN-Heterostrukturen insbesondere von ΔP und der Feldstärke in der AlGaN-Schicht F .
 5. Untersuchung des Einflusses der Temperatur auf ΔP und F .
 6. Vertiefung des Verständnisses der Wirkungsweise chemischer AlGaN/GaN-Sensoren durch Interpretation optischer Spektren, die unter dem Einfluss des zu detektierendem Stoffes (Wasserstoff, Azeton) aufgenommen wurden.

Nach einer Übersicht über die in dieser Arbeit relevanten Eigenschaften der Nitride in Kap. 2 wird in Kap. 3 das Blossy-Modell zuerst allgemein untersucht und dann speziell auf die Nitride angewandt. In Kap. 4 schließt sich die Darstellung der daraus zu erwartenden Konsequenzen für die ER-Spektroskopie an. Die hier untersuchten AlGaN/GaN-Heterostrukturen werden zusammen mit den experimentellen Aufbauten in Kap. 5 vorgestellt. Kapitel 6 behandelt die ER-Experimente an Pt-kontaktierten Proben. Die Spektren werden mit dem zuvor erlangten theoretischen Verständnis interpretiert und analysiert, so dass insbesondere der Zusammenhang zwischen ΔP und dem Al-Gehalt bzw. der Temperatur mit bisher unerreichter Genauigkeit aufgeklärt wird. In Kap. 7 wird der Wert von F an unkontaktierten Proben in Abhängigkeit des Al-Gehaltes und der Temperatur untersucht und bezüglich des Zusammenhangs zwischen Oberflächenladung und Al-Gehalt bzw. zwischen Polarisation und mechanischer Verspannung diskutiert. Experimente zu den Sensormechanismen von AlGaN/GaN-Heterostrukturen schaffen am Ende der Kap. 6 und 7 einen Bezug zur aktuellen angewandten Forschung an diesem Materialsystem. Im Kap. 8 werden die wichtigsten Ergebnisse zusammen mit einem Ausblick auf zukünftige Forschungsaufgaben präsentiert.

2 Eigenschaften der Gruppe-III-Nitride

2.1 Kristallstruktur und Polarität

Die beiden wichtigsten Kristallstrukturen der Gruppe-III-Nitride sind die hexagonale Wurtzitstruktur (α -Phase) und die kubische Zinkblendestruktur (β -Phase), wobei die Wurtzitstruktur die thermodynamisch stabile ist [46]. Für die allgemeine stöchiometrische Verbindung gilt $\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$ mit $0 \leq x \leq 1$ und $0 \leq y \leq 1$. Wegen der großen Unterschiede zwischen den Elektronegativitäten der Elemente (In: 1,78 Ga: 1,81 Al: 1,61 N: 3,04) besitzt die Bindung stark ionischen Charakter. Die Bindungsgeometrie wird durch die sp^3 -Hybridisierung der Valenzelektronen der Bindungspartner vorgegeben: jedes Kation (Indium, Gallium oder Aluminium) befindet sich im Zentrum eines Tetraeders, an dessen vier Ecken jeweils ein Anion (Stickstoff) platziert ist. Das gleiche gilt entsprechend für das Anion. In beiden Kristallstrukturen sind die Tetraeder so in Ebenen angeordnet, dass beide Atomsorten jeweils die dichteste Kugelpackung einnehmen (siehe Abb. 2.1). Der Unterschied zwischen den beiden Kristallstrukturen liegt darin, ob sich wie in der Wurtzitstruktur die Stapelreihenfolge nach jeder zweiten Ebene (2H) oder wie in der Zinkblendestruktur erst nach jeder dritten Ebene (3C) wiederholt. Senkrecht zu diese Ebenen verläuft in der Wurtzitstruktur in hexagonaler Notation die [0001]-Richtung bzw. in der Zinkblendestruktur die [111]-Richtung. Es existiert weiterhin eine Kochsalzstruktur, jedoch nur unter sehr hohem Druck [47]. Da in dieser Arbeit nur hexagonales Material untersucht wird, beschränken sich die Betrachtungen im Folgenden auf die Wurtzitstruktur.

Das Fehlen der Inversionssymmetrie in hexagonalem Material zieht eine Anisotropie in den optischen, mechanischen, thermischen und piezoelektrischen Eigenschaften, den effektiven Ladungsträgermassen sowie eine zusätzliche Aufspaltung der Valenzbänder nach sich. Die c -Achse (in [0001]-Richtung) stellt eine Vorzugsachse dar. Die Einheitszelle zusammen mit den Gitterachsen in der Basalebene ist in Abb. 2.1 dargestellt. Zur Erläuterung der Notation der Miller-Bravais-Indizes sei auf [48] verwiesen. Die Geometrie der Wurtzitstruktur wird durch drei Parameter beschrieben: die Gitterkonstanten a und c , welche jeweils

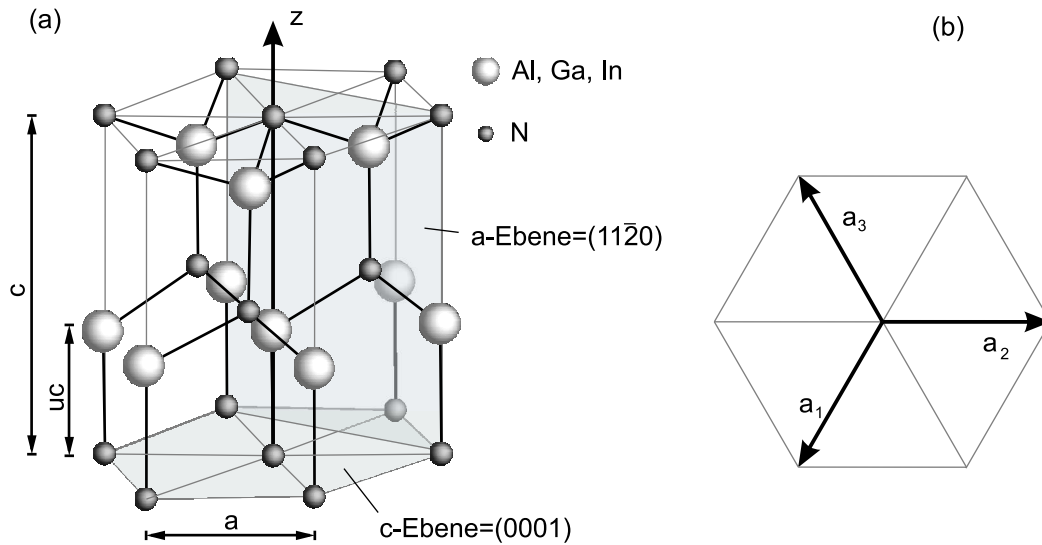


Abb. 2.1: (a) Einheitszelle der Gruppe-III-Nitride mit Wurtzitstruktur. (b) Gitterachsen in der Basalebene.

die Kantenlänge des Hexagons in der Basalebene bzw. seine Höhe angeben, sowie durch den internen Gitterparameter u , welcher das Verhältnis des Anion-Kation-Bindungsabstands entlang der $[0001]$ -Richtung in Einheiten von c angibt. In einem idealen Kristall ist sein Wert $u_{id} = 3/8 = 0,375$ und das Verhältnis der Gitterkonstanten beträgt $c/a = \sqrt{8/3} = 1,633$. Während in diesem Fall die Bindungslängen und Bindungswinkel zwischen den nächsten Nachbaratomen gleich sind, ist der Abstand zu den übernächsten Nachbarn entlang der c -Achse um 13% kürzer als der zu den übernächsten Nachbarn in der Basalebene.

Die experimentell bestimmten Parameter der binären Gruppe-III-Nitride sind in Tab. 2.1 angegeben. Für die Gitterkonstanten der Mischkristalle gilt dabei die Vegard'sche Regel [49]. Die Nitride besitzen keine ideale Wurtzitstruktur, d.h. man findet interne Gitterparameter u , die deutlich größer als u_{id} sind. In den ternären Legierungen $Al_xIn_yGa_{1-x-y}N$ kann u durch eine quadratische Abhängigkeit mit Hilfe eines „Bowlingparameters“ beschrieben werden [31].

Die am besten untersuchte Wachstumsrichtung ist diejenige entlang der c -Achse, d.h. senkrecht zur (0001) -Ebene. Dabei kann der Kristall entweder in die $[0001]$ -Richtung oder in die entgegengesetzte $[000\bar{1}]$ -Richtung auf dem Substrat aufgewachsen sein. Die Atomlagensequenzen der beiden polaren „Gesichter“ sind unterschiedlich (siehe Abb. 2.2). Man definiert daher zwei Polaritäten, je nachdem, welche Atomsorte in den Doppellagen, die durch die Bindungen entlang der c -Achse getrennt sind, oben liegt. Besitzt die Oberfläche Metallpolarität, befinden sich die Kationen oben. Dabei zeigt die $[0001]$ -Richtung vom Kristallvolumen

	AlN	GaN	InN
a (Å)	3,112	3,189	3,545
c (Å)	4,982	5,185	5,703
u	0,382	0,377	0,375

Tab. 2.1: Gitterparameter der binären Gruppe-III-Nitride in Wurtzitstruktur [29, 57, 58].

zur Oberfläche. Im Gegensatz dazu befinden sich bei der Stickstoffpolarität die Anionen oben und die $[000\bar{1}]$ -Richtung zeigt zur Oberfläche. Aufgrund der unterschiedlichen physikalischen und chemischen Eigenschaften kann die Polarität der Oberfläche eindeutig bestimmt werden [50].

Verglichen mit anderen III-V-Halbleitern wie z.B. GaAs weisen AlN und GaN die Besonderheit auf, dass sie generell mit Metallatomen terminiert sind. Die Terminierung mit Stickstoffatomen ist energetisch ungünstig, da diese bevorzugt die starke N–N-Bindung eingehen, N_2 bilden und dabei von der Oberfläche desorbieren. Für beide Polaritäten wurden verschiedene Rekonstruktionen in Abhängigkeit von der Oberflächenstöchiometrie beobachtet [51–53]. Die Polarität hat entscheidenden Einfluss auf die elektronischen und damit optischen Eigenschaften von Nitridschichten, da durch sie z.B. festgelegt ist, ob sich an der obersten Grenzfläche einer Heterostruktur ein Elektronen- oder aber ein Löchergas ausbilden kann. Die Polarität hängt sowohl vom verwendeten Substrat als auch von den Wachstumsbedingungen ab. So kann man mit der Abscheidung von GaN auf Saphirsubstrat beide Polaritäten erzielen, wohingegen sich meist Metallpolarität durch die Abscheidung von AlN-Nukleationsschichten oder von nur mehreren Monolagen dünnen Al-Schichten herausbildet [54, 55]. Vorausgesetzt es werden keine besonderen Vorkehrungen getroffen, wie das Einfügen ultradünner Metallschichten [56], ändert sich die Polarität bei weiteren Epitaxieprozessen nicht mehr. Somit können nitridische Heterostrukturen mit definierter Polarität hergestellt werden.

2.2 Verspannung

Epitaktische Schichten aus Gruppe-III-Nitriden weisen gegenüber Volumenkristallen große Unterschiede in den Gitterkonstanten auf, welche auf mechanische Verspannung der Schicht bzw. die Deformation der Einheitszelle des Kristalls zurückzuführen sind. Dies führt zu Änderungen der meisten Eigenschaften. Optische Daten und die Parameter elektronischer Bauelemente lassen sich nur verstehen, wenn die Verspannungen der einzelnen Filme berücksichtigt werden. Umgekehrt kann, komplementär zu Röntgenuntersuchungen, die Verspannung aus opti-

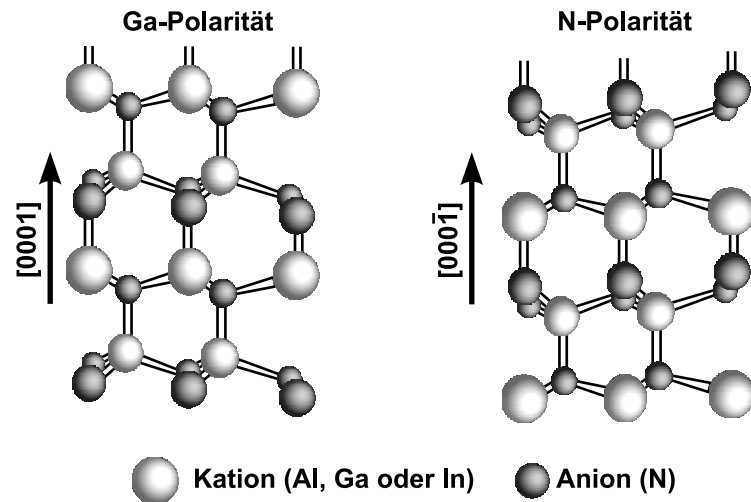


Abb. 2.2: Polarität der c-Ebene der Nitride (nach [29]).

schen Spektren bestimmt werden. Für die Gitterdeformation existieren mehrere Ursachen:

Gitterfehlpassungen Werden Nitridschichten verschiedener Zusammensetzung aufeinander abgeschieden, besitzen sie i.A. unterschiedliche Gitterkonstanten in der Wachstumsebene. Bei Raumtemperatur hat z.B. AlN auf (0001)-GaN eine Fehlanpassung von 2,4% [59, 60]. Für $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ auf GaN ist die Gitterfehlpassung proportional zum Al-Gehalt x (Vegard'sches Gesetz). Bei der Abscheidung einer dünnen Schicht auf einer dicken findet pseudomorph verspanntes Wachstum statt, d.h. die obere Schicht nimmt die a -Gitterkonstante der darunter liegenden an. In diesem Fall wird die Gitterfehlpassung vollständig in biaxiale Verspannung in der Wachstumsebene umgesetzt. Wird weiter abgeschieden, erfolgt oberhalb einer kritischen Schichtdicke durch Kristallbruch oder Versetzungsbildung eine partielle oder vollständige Verspannungsrelaxation [61]. Es kommt hinzu, dass Nitridheterostrukturen im Gegensatz zu den Arseniden und Phosphiden überwiegend auf Fremdsubstraten (meist Al_2O_3 , SiC oder Si) abgeschieden werden, die ebenfalls andere Gitterkonstanten oder sogar andere Bravaisgitter besitzen. Anstelle eines pseudomorphen Wachstums erfolgt die Ausbildung eines Koinzidenzgitters, bei dem nur jede i -te Netzebene des epitaktischen Films mit jeder j -ten Netzebene des Substrates übereinstimmt [62]. Daraus resultieren Verspannungen während des Wachstums und eine hohe Defektdichte, welche wiederum die Parameter von Bauelementen aus solchen Heterostrukturen verschlechtern. Man begegnet diesen Problemen mit Nukleations- oder

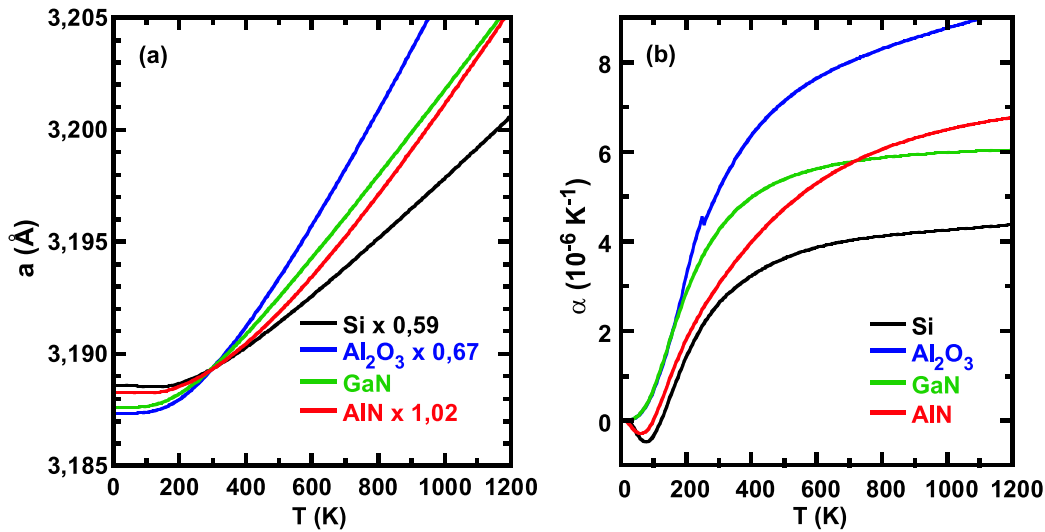


Abb. 2.3: Thermische Ausdehnungskoeffizienten von Al₂O₃, Si, AlN und GaN.

Saatschichten aus AlN [63, 64] und Pufferschichten [65], welche die Fehlanpassung möglichst angleichen. Ideal wären GaN-Substrate, die gegenwärtig von einigen Herstellern¹ kommerziell angeboten werden. Diese sind aber wegen der extremen Herstellungsbedingungen zur Zeit noch nicht kommerziell konkurrenzfähig.

Thermische Verspannung Bei den jeweiligen Wachstumstemperaturen sind GaN-Filme in Heterostrukturen auf 6H-SiC-Substrat druckverspannt, während jene auf Al₂O₃-Substrat zugverspannt sind. Demgegenüber weisen diese Filme bei Raumtemperatur und darunter typischerweise das entgegengesetzte Verhalten auf: Strukturen auf 6H-SiC Substrat sind gewöhnlich druck- und jene auf Al₂O₃-Substrat zugverspannt [66]. Diese Phänomene lassen sich durch die Unterschiede in der thermischen Ausdehnung erklären. Der lineare Ausdehnungskoeffizient ist durch die relative Änderung der Abmessung l mit der Temperatur T definiert:

$$\alpha = \frac{1}{l} \frac{dl}{dT} . \quad (2.1)$$

Für c -achsenorientiertes Material sind die thermischen Fehlanpassungen in der Basalebene von Bedeutung, d.h. $l = a$. α wird meist als konstant angenommen, was jedoch insbesondere unterhalb der Raumtemperatur nicht

¹z.B. Cree (USA), TopGaN (Polen), Kyma (USA) oder Sumitro Electric (Japan)

zutritt. Die Temperaturabhängigkeiten der Gitterkonstanten für die in dieser Arbeit wichtigen Substrate Al_2O_3 und Si und für AlN und GaN sind in Abb. 2.3 (a) dargestellt. Zur besseren Vergleichbarkeit sind sie bei $T = 295\text{ K}$ auf den Wert von GaN normiert worden. In Abb. 2.3 (b) sind die Ausdehnungskoeffizienten abgebildet. Diese Daten bilden die Grundlage, um später das Temperaturverhalten der Messergebnisse interpretieren zu können. Für Si geben Lyon *et al.* im Temperaturbereich $6 \leq T \leq 340\text{ K}$ Daten an, die durch Messungen mit einem hochgenauen Kapazitätsdilatometer an einem 10 cm langen polykristallinen Stab erzielt wurden [67]; für höhere Temperaturen wurden Daten von Glazov und Pashinkin für einkristallines Si herangezogen [68]. Die verwendete Methode war dabei wie für die weiter angeführten Daten die Röntgenbeugung. Die Daten für Al_2O_3 im Bereich $4,5\text{ K} \leq T \leq 250\text{ K}$ stammen aus hochgenauen Messungen am DESY/HASYLAB (Hamburg) [69]. Für Temperaturen $T > 250\text{ K}$ wurden Daten von Leszczynski *et al.* [70] verwendet. Roder *et al.* haben Ergebnisse für homoepitaktische GaN-Schichten veröffentlicht [59], welche als zuverlässiger angesehen werden als die älteren Werte von Reeber und Wang von Pulverproben [71]. Im Gegensatz dazu wurden für AlN die Ergebnisse von Reeber und Wang von Pulverproben verwendet [60], da die Daten von Paszkowicz *et al.* [72] große Streuung aufweisen. Ergebnisse von einkristallinem AlN wurden bisher nicht veröffentlicht. Werte für AlGaN-Mischkristalle werden in dieser Arbeit durch eine lineare Interpolation der GaN- und AlN-Daten gewonnen.

Dotierung und Defekte Gitterdefekte, Dotierstoff- und andere Fremdatome verändern ebenfalls die Geometrie der Einheitszelle, indem sie zu hydrostatischer Verspannung führen. Die Streuung der Raumtemperatur-Gitterkonstanten von GaN aufgrund dieses Effektes kann bis zu 1% betragen [73]. Beispielsweise sind in Ge, Si und GaAs solche Änderungen typischerweise in der Größenordnung von ppm² [73, 74]. Die experimentellen Befunde sprechen dafür, dass zwar die Gitterkonstanten verschoben werden, die thermischen Ausdehnungskoeffizienten jedoch gleich bleiben [59].

Piezoelektrische Kopplung Für schwach piezoelektrische Materialien werden die Beziehungen zwischen der Verspannung und der Deformation durch das Hooke'sche Gesetz, d.h. durch einen linearen Zusammenhang der beiden Größen beschrieben. Die Nitridhalbleiter sind starke piezoelektrische Materialien, das bedeutet dass elektrische Felder, seien sie spontan erzeugt oder selbst durch Gitterdeformation entstanden, auf die Verspannung zurück-

²ppm= 10^{-6} , „parts per million“

wirken. Diese Kopplung führt beispielsweise bei der technologisch wichtigen $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{N}/\text{GaN}$ -Heterostruktur zu einer ca. 18% geringeren Dehnung der c -Gitterkonstanten des $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{N}$ gegenüber dem ungekoppelten Fall [58]. Jedoch gilt zu beachten, dass dies nur für sehr große Feldstärken zutrifft, und die elektrischen Felder in solchen Strukturen zum überwiegenden Teil durch ein Elektronengas abgeschirmt werden.

Das Hooke'sche Gesetz beschreibt den linearen Zusammenhang zwischen den von außen wirkenden Kräften oder Spannungen σ_{ij} und der Verzerrung bzw. Deformation des Kristalls ϵ_{kl} :

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l=1}^3 C_{ijkl} \epsilon_{kl} . \quad (2.2)$$

Dabei bilden die Elastizitätskonstanten C_{ijkl} einen Tensor vierter Stufe. Symmetrieüberlegungen erlauben eine reduzierte Darstellung durch einen 6×6 -Tensor zweiter Stufe gemäß der Indizierung nach Voigt [75]: $xx \rightarrow 1$; $yy \rightarrow 2$; $zz \rightarrow 3$; $yz, zy \rightarrow 4$; $zx, xz \rightarrow 5$; $xy, yx \rightarrow 6$. Die 6×6 -Matrix der elastischen Konstanten für einen hexagonalen Kristall ist gegeben durch:

$$C_{ij} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix} . \quad (2.3)$$

Da hexagonale Kristalle in ihrer Basalebene isotrop sind, ist die Komponente C_{66} , welche die Scherung in der Basalebene beschreibt, gemäß

$$C_{66} = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \quad (2.4)$$

mit den Konstanten C_{11} und C_{12} verknüpft [75]. Die Tensorcomponenten für AlN, GaN und InN sind in Tabelle 2.2 aufgeführt. Da die Herstellung von InN im Vergleich zu AlN und GaN schwierig ist, liegen, soweit dem Autor bekannt, keine experimentellen Daten vor. Soll die piezoelektrische Kopplung mit berücksichtigt werden, wird in Gl. 2.2 ein Zusatzterm eingefügt (siehe z.B. [76]):

$$\sigma_i = \sum_{j=1}^6 C_{ij} \epsilon_j - \sum_{k=1}^3 F_k e_{ki} . \quad (2.5)$$

Hierbei sind e_{ki} und F_k jeweils der piezoelektrische Tensor und der Vektor der elektrischen Feldstärke.

Da die in dieser Arbeit untersuchten Strukturen ausschließlich (0001)-orientiert sind, betrachten wir jetzt die Zusammenhänge zwischen Verspannung und Deformation in diesem speziellen Fall. Dünne Schichten in Halbleiterheterostrukturen wachsen i.A. pseudomorph auf. Das bedeutet, dass sie die beiden Gitterkonstanten der darunter liegenden Schicht in der Wachstums- (Basal-)Ebene annehmen. Die sich dabei einstellenden Gitterkonstanten a und c weichen von denen der unverspannten Schicht a_0 und c_0 ab. Es wird weiter angenommen, dass die Verspannung in der Basalebene isotrop ist, d.h. $\epsilon_1 = \epsilon_2$. In der Basalebene ist die Deformation durch

$$\epsilon_{\parallel} = \epsilon_1 = \epsilon_2 = \frac{a - a_0}{a_0}, \quad (2.6)$$

senkrecht zur Basalebene durch

$$\epsilon_{\perp} = \epsilon_3 = \frac{c - c_0}{c_0} \quad (2.7)$$

gegeben. Wegen der Isotropie in der Wachstumsebene treten keine Scherkräfte auf, d.h. $\sigma_4 = \sigma_5 = \sigma_6 = 0$. Daraus folgt

$$\epsilon_4 = \epsilon_5 = \epsilon_6 = 0. \quad (2.8)$$

Aus diesen Betrachtungen ergibt sich, dass von den Gleichungen 2.2 und 2.3 nur noch

$$\begin{pmatrix} \sigma_{\parallel} \\ \sigma_{\perp} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} + C_{12} & C_{13} \\ 2C_{13} & C_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{\parallel} \\ \epsilon_{\perp} \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

Tab. 2.2: Experimentelle und theoretische Komponenten des elastischen Tensors der Gruppe-III-Nitride [31].

	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{13} (GPa)	C_{33} (GPa)	C_{44} (GPa)
AlN (exp.)	410	140	100	390	120
GaN (exp.)	370	145	110	390	90
InN (theo.)	223	115	92	224	48

erhalten bleibt. Da sich der Kristall beim pseudomorphen Wachstum entlang der Wachstumsrichtung ([0001]) ungehindert ausdehnen oder zusammenziehen kann, wirken senkrecht zur Basalebene keine Kräfte ($\sigma_{\perp} = 0$), womit

$$\epsilon_{\perp} = -2 \frac{C_{13}}{C_{33}} \epsilon_{\parallel} \quad (2.10)$$

gilt. Dieser Zusammenhang wird später wichtig sein, wenn die Verspannung der dünnen AlGa_xN-Deckschichten in den untersuchten Heterostrukturen benötigt wird.

2.3 Spontane und piezoelektrische Polarisation

Die Wurtzitstruktur ist die Kristallstruktur mit der höchsten Symmetrie, bei der *spontane Polarisation* noch auftreten kann, man spricht auch von Pyroelektrizität. Pyroelektrische Kristalle sind immer auch *piezoelektrisch*. Die Summe von spontaner und piezoelektrischer Polarisation ergibt eine totale makroskopische Polarisation ohne von außen angelegte elektrische Felder.

Anders als bei ferroelektrischen Kristallen kann die spontane Polarisation nicht durch elektrische Felder umgekehrt werden. Ihr Vektor zeigt immer in $[000\bar{1}]$ -Richtung. Sie resultiert aus einem effektiven Dipolmoment aufgrund der großen Unterschiede in den Elektronegativitäten der Bindungspartner und des Fehlens der Inversionssymmetrie im Kristall (siehe Kapitel 2.1). Bernardini und Fiorentini haben den Betrag der spontanen Polarisation P^{SP} der ternären Gruppe-III-Nitride theoretisch untersucht und finden für ein und die selbe Komposition einen linearen Zusammenhang zwischen dem zellinternen Parameter u und P^{SP} [57]. Da u nichtlinear von der Mischkristallzusammensetzung abhängt, ist auch das Verhalten von P^{SP} nichtlinear. Für die ternären Verbindungen werden folgende Abhängigkeiten angegeben [31]:

$$P_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}^{\text{SP}} = [-0,090x - 0,034(1-x) + 0,021x(1-x)]\text{Cm}^{-2} \quad (2.11\text{a})$$

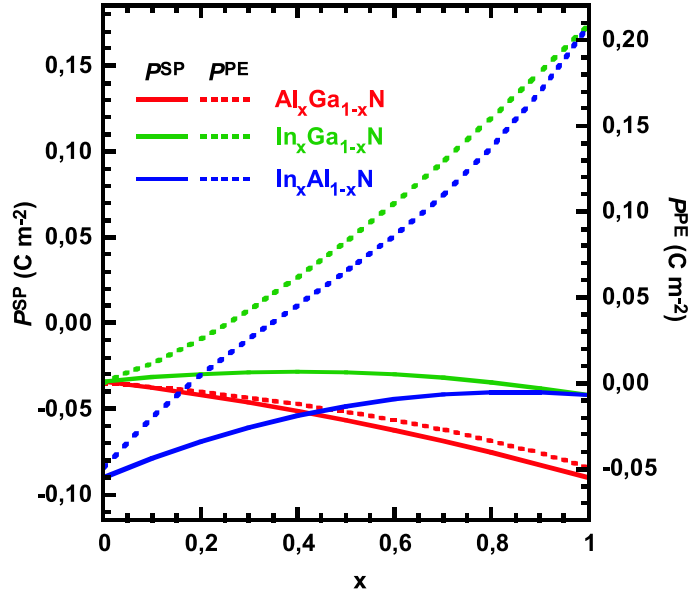
$$P_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}^{\text{SP}} = [-0,042x - 0,034(1-x) + 0,037x(1-x)]\text{Cm}^{-2} \quad (2.11\text{b})$$

$$P_{\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}}^{\text{SP}} = [-0,090x - 0,042(1-x) + 0,070x(1-x)]\text{Cm}^{-2} . \quad (2.11\text{c})$$

Die so berechneten Verläufe von P^{SP} sind in Abb. 2.4 mit den durchgezogenen Linien in Abhängigkeit von den Legierungszusammensetzungen dargestellt.

Wie in Kapitel 2.2 erläutert wurde, sind epitaktische Schichten i.A. verspannt, ihre Einheitszelle ist deformiert. Daraus resultiert eine verspannungsinduzierte pie-

Abb. 2.4: Spontane und piezoelektrische Polarisierung (Annahme: pseudomorphes Wachstum auf unverspanntem GaN) der ternären Nitride. P^{SP} ist mit durchgezogenen Linien, P^{PE} mit gestrichelten Linien gekennzeichnet.



piezoelektrische Polarisierung mit den Vektorkomponenten P_i^{PE} . In linearer Näherung ist P_i^{PE} durch den piezoelektrischen Tensor e_{ij} mit ϵ_j verknüpft:

$$P_i^{\text{PE}} = \sum_{j=1}^6 e_{ij} \epsilon_j. \quad (2.12)$$

In hexagonalen Materialien hat e_{ij} die Form [48]

$$e_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.13)$$

Wegen Gl. 2.8 hat der Vektor P_i^{PE} nur eine Komponente entlang der c -Achse, welche im Folgenden mit P^{PE} abgekürzt wird. Mit den Gleichungen 2.6 und 2.10 ergibt sich ihr Betrag zu

$$P^{\text{PE}} = 2 \left(e_{31} - \frac{C_{13}}{C_{33}} e_{33} \right) \frac{a - a_0}{a_0}. \quad (2.14)$$

In Tab. 2.3 sind theoretische Ergebnisse aus [31] für die binären Nitride zusammengefasst. Neuere experimentelle Untersuchungen unterstützen diese Daten [77]. Aufgrund der Vorzeichen von e_{31} und e_{33} ergibt sich, dass P^{PE} in zugverspannten

	e_{31} (C/m ²)	e_{33} (C/m ²)	e_{15} (C/m ²)
AlN	-0,53	1,50	-0,48
GaN	-0,34	0,67	-0,30
InN	-0,41	0,81	

Tab. 2.3: Komponenten des piezoelektrischen Tensors der Gruppe-III-Nitride [31].

Schichten immer negatives und in druckverspannten Schichten immer positives Vorzeichen hat. Im ersten Fall wird also die Gesamtpolarisation erhöht, während sie im zweiten Fall verringert wird. Heterostrukturen aus Kombinationen binären Nitridschichten spielen bei der Realisierung von Bauelementen eine große Rolle. Um P^{PE} zu berechnen, kann man in Gleichung 2.14 die jeweiligen Materialparameter linear zwischen denen der binären Nitride interpolieren. Daraus folgt ein nichtlinearer Zusammenhang zwischen P^{PE} und der Mischkristallzusammensetzung. Es hat sich allerdings gezeigt, dass C_{ij} und e_{ij} bei großen Gitterdeformationen nicht mehr konstant sind. Es ist daher besser, für eine $A_xB_{1-x}N$ -Verbindung zuerst P^{PE} der beiden binären Nitride nach

$$P_{\text{AlN}}^{\text{PE}} = \begin{cases} -1,808\epsilon_{\parallel} + 5,624\epsilon_{\parallel}^2 & : \epsilon_{\parallel} \geq 0 \\ -1,808\epsilon_{\parallel} - 7,888\epsilon_{\parallel}^2 & : \epsilon_{\parallel} < 0 \end{cases} \quad (2.15a)$$

$$P_{\text{GaN}}^{\text{PE}} = -0,918\epsilon_{\parallel} + 9,541\epsilon_{\parallel}^2 \quad (2.15b)$$

$$P_{\text{InN}}^{\text{PE}} = -1,373\epsilon_{\parallel} + 7,559\epsilon_{\parallel}^2 \quad (2.15c)$$

zu berechnen und dann erst linear mit

$$P_{\text{ABN}}^{\text{PE}}(x) = xP_{\text{AN}}^{\text{PE}}(\epsilon_{\parallel}(x)) + (1-x)P_{\text{BN}}^{\text{PE}}(\epsilon_{\parallel}(x)) \quad (2.16)$$

zu interpolieren [31]. Beispielhaft sind so berechnete Verläufe von P^{PE} in Abb. 2.4 (unterbrochene Linien) dargestellt. Der Berechnung der Verspannung liegt die Annahme pseudomorphes Wachstum auf einer unverspannten GaN-Unterlage zugrunde. Für AlGa_xN-Filme auf GaN ist P^{PE} vergleichsweise klein und sein Betrag wächst näherungsweise wie der Betrag von P^{SP} mit größer werdendem Al-Gehalt an. Im Gegensatz dazu überwiegt bei Filmen, die In enthalten, für die meisten Zusammensetzungen der Anteil von P^{PE} an der Gesamtpolarisation, da hier die Gitterfehlanspannungen besonders groß sind.

2.4 Polarisationsdiskontinuität und zweidimensionales Elektronengas

Bei der epitaktischen Abscheidung von Nitridfilmen unterschiedlicher Zusammensetzung werden aufgrund der Polarisationsdiskontinuitäten Ladungen an den Grenzflächen induziert. Diese beeinflussen den Bandkantenverlauf und damit die elektronischen und optischen Eigenschaften maßgeblich. Freie Ladungsträger, die durch die Ionisation von Oberflächenzuständen, Defekten oder Dotieratomen bereitgestellt werden, werden durch die Grenzflächenladung angezogen. Es entsteht ein zweidimensionales Löcher- (2DHG) bzw. Elektronengas (2DEG) ohne dass an dieser Stelle eine Modulationsdotierung vorhanden sein muss. Der Effekt wird z.B. im polarisationsinduzierten Feldeffekttransistor (HEMT) ausgenutzt [78].

Der Verläufe von Leitungs- und Valenzbändern in Heterostrukturen setzen sich aus den jeweiligen Bandkantendiskontinuitäten und dem ortsabhängigen elektrostatischen (Hartree-)Potenzial $V(\vec{r})$ zusammen. Die Poissongleichung ist durch

$$\varepsilon_0 \nabla \varepsilon_r(\vec{r}) \nabla V(\vec{r}) = -\rho(\vec{r}) + \nabla \vec{P}(\vec{r}) \quad (2.17)$$

gegeben. Dabei bezeichnet ε_0 die Dielektrizitätskonstante des Vakuums, ρ ist die Ladungsträgerdichte und $\vec{P} = \vec{P}^{\text{SP}} + \vec{P}^{\text{PE}}$ repräsentiert die *permanente* Gesamtpolarisation. Da $\nabla \vec{P}$ als Quellterm eingeht, entspricht es einer Dotierungsdichte. Im Gegensatz zu \vec{P} kann auch eine *vorübergehende* Polarisation durch die elektrische Feldstärke F induziert werden. Dies wird durch die materialspezifische Dielektrizitätskonstante ε_r beschrieben. Für die Verschiebungsflussdichte folgt in dieser Notation

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \vec{F} + \vec{P}. \quad (2.18)$$

In einem epitaktischen Schichtsystem mit Wachstum in z -Richtung ändere sich die Polarisation an einer Heterogrenze sprunghaft am Ort $z = z'$. Nach Gl. (2.17) ist die Polarisationsdiskontinuität, d.h. die Differenz der permanenten Gesamtpolarisationen benachbarter Schichten in z -Richtung $\Delta P = P(z' + 0) - P(z' - 0)$, gleichbedeutend mit einer polarisationsinduzierten Flächenladungsdichte. Dabei liegt $z' + 0$ ober- und $z' - 0$ unterhalb der Grenzfläche. Verwendet man die Theoriewerte zur Berechnung, erhält man für pseudomorph abgeschiedenes AlN auf GaN $\Delta P = 0,11 \text{ C/m}^2 = 6,6 \times 10^{13} \text{ e/cm}^2$. Die an der Oberflächen dieser Struktur induzierte Ladung ist mit $\Delta P = -0,139 \text{ C/m}^2 = -8,68 \times 10^{13} \text{ e/cm}^2$ noch größer.

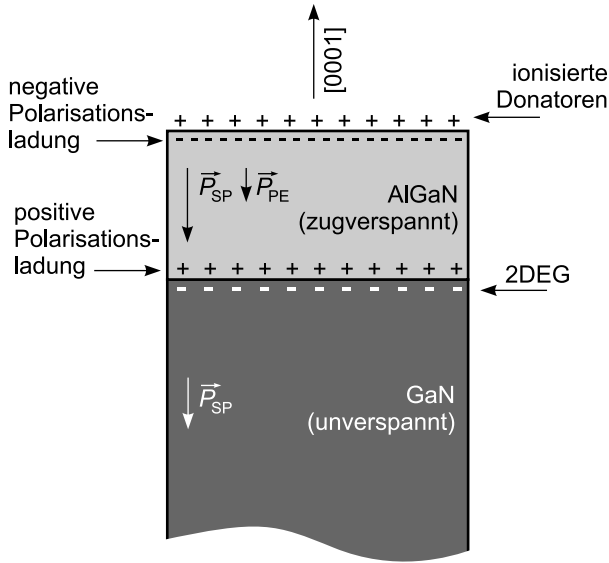


Abb. 2.5: Richtung von spontaner und piezoelektrischer Polarisationsrichtung für AlGaIn/GaN-Heterostrukturen. An Heterogrenzen und an der Oberfläche werden Flächenladungen entsprechend der jeweiligen Polarisationsdiskontinuität induziert.

Ohne das Vorhandensein kompensierender Flächenladungen folgt nach Gl. (2.18) und aus der Stetigkeit der Normal- (z) -Komponenten der Verschiebungsdichte an der Grenzfläche

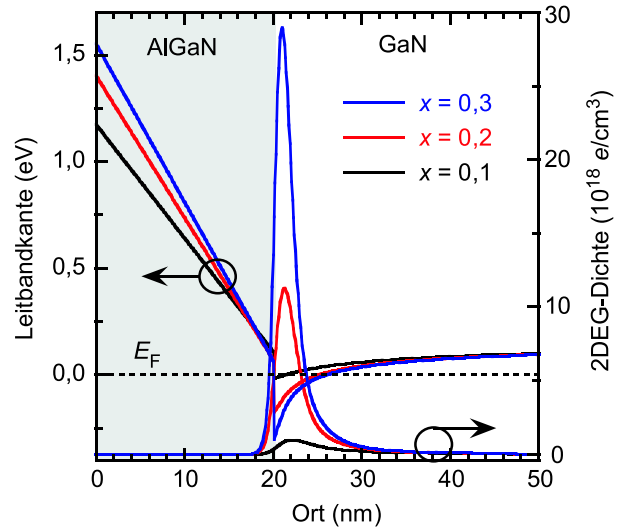
$$\epsilon_0 \epsilon_r(z' + 0)F(z' + 0) - \epsilon_0 \epsilon_r(z' - 0)F(z' - 0) = -\Delta P. \quad (2.19)$$

Der Betrag von $F(z' + 0) - F(z' - 0)$ kann Werte von mehreren MV/cm annehmen. Anders als die Gesamtpolarisation ist ΔP experimentell leicht zugänglich, da die elektronischen Parameter von Heterostrukturen durch den Wert von ΔP maßgeblich beeinflusst werden. Die Beträge der Polarisationsdiskontinuitäten verschiedener Heterogrenzen werden derzeit in zahlreichen Veröffentlichungen diskutiert [5, 6, 32–37, 79–81]. Dabei liegen die experimentellen Werte tendenziell unter den theoretisch vorausgesagten. Eine Methode zur präzisen Bestimmung von ΔP wird auf Grundlage von Gl. (2.19) in Abschnitt 6.1.2 abgeleitet.

Abbildung 2.5 stellt den Aufbau einer typischen AlGaIn/GaN-Heterostruktur dar. Die feste, positive Polarisationsladung an der AlGaIn/GaN-Heterogrenze zieht freie Elektronen an, welche ein 2DEG bilden. Die Elektronen werden nach einem Modell von Ibbetson *et al.* [82] von Oberflächendonatoren freigegeben. Die ionisierten Donatoren kompensieren zum Großteil die negative Polarisationsladung an der Oberfläche. Trotzdem herrscht in der AlGaIn-Schicht ein sehr großes Feld, dessen Vektor vom Substrat zur Oberfläche gerichtet ist.

Die statischen elektronischen Eigenschaften solcher Heterostrukturen lassen sich durch selbstkonsistentes Lösen der Schrödinger- und der Poissongleichung

Abb. 2.6: Berechnete Verläufe der Leitungsbandkanten und der Elektronendichte von $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ -Heterostrukturen mit verschiedenen Al-Gehalten. Referenzenergie ist das Fermienergie E_F .



(SPR) berechnen. Zu diesem Zweck wurde ein MATLAB-Programm entwickelt. Das numerische Iterationsschema entspricht weitgehend dem von Nakov [83] vorgeschlagenen. In dieser Arbeit wird jedoch nicht nur die Schrödinger- sondern auch die Poisson-Gleichung mit der Methode der finiten Differenzen (siehe z.B. [84]) gelöst. Außerdem wird ΔP nach Jogai [85] als zusätzlicher Quellterm in der Poissongleichung berücksichtigt. Das Diskretisierungsgitter ist für beide Differentialgleichungen dasselbe.

Errechnete Leitungsbandkanten- und Elektronendichteverläufe für AlGaN/GaN -Heterostrukturen sind in Abb. 2.6 gezeigt. Die Al-Gehalte ($x = 0,1; 0,2$ und $0,3$) liegen im Bereich der in dieser Arbeit experimentell untersuchten Proben. Die Dicke der AlGaN -Barriere ist 20 nm . Die Leitungsbanddiskontinuität beträgt 70% der Bandlückendifferenz zwischen GaN und AlGaN [29]. Das Oberflächenpotenzial wird durch einen Ni-Schottkykontakt vorgegeben; die Barrierenhöhen wurden aus den Daten von [86] und [87] interpoliert. Mit dem Al-Gehalt steigt auch die Flächenladungsdichte des 2DEGs ($N_{2\text{DEG}}$) von $0,75$ über $4,4$ auf $8,9 \times 10^{12} \text{ e/cm}^2$. Der Grund ist die Erhöhung von ΔP (siehe Abb. 2.4). Die Feldstärke in der Barriere steigt leicht von $F = 540$ über 670 auf 740 kV/cm . Dies ist auf die Vergrößerung der Schottkybarrierenhöhe und die Vertiefung des 2DEG-Potenzialgrabens zurückzuführen.

2.5 Bandlückenenergien und optische Auswahlregeln

2.5.1 Volumenhalbleiter

Die wurztitischen Gruppe-III-Nitride sind direkte Halbleiter mit einer ausgesprochen starken Absorptionsanisotropie in der Umgebung der fundamentalen Bandlücke. Die Ursachen liegen einerseits in der energetischen Aufspaltung der Valenzbänder am Γ -Punkt der Brillouinzone und andererseits in der Symmetrie der dazugehörigen Wellenfunktionen. Das am Γ -Punkt 6-fach entartete Valenzband wird durch die Kristallfeld- und die Spin-Bahn-Wechselwirkung in ein zweifach entartetes Valenzband mit Γ_9 -Symmetrie und zwei jeweils zweifach entartete Valenzbänder mit Γ_7 -Symmetrie aufgespalten. Für die Diskussion der Auswahlregeln spielt die Spin-Orientierung (Entartung) keine Rolle. Deshalb wird im Folgenden immer nur von einem Band gesprochen, obwohl dieser Zustand doppelt auftritt. Die Wechselwirkungsparameter für das Kristallfeld (Δ_{cr}) und für die Spin-Bahn-Kopplung (Δ_{so}) bestimmen im quasi-kubischen Modell nach Hopfield [88] die Absolutlagen der drei Valenzbandmaxima:

$$\Gamma_9^{\text{v}} = \Delta_{\text{cr}} + \frac{\Delta_{\text{so}}}{3} \quad (2.20\text{a})$$

$$\Gamma_{7\pm}^{\text{v}} = \frac{\Delta_{\text{cr}} - \frac{\Delta_{\text{so}}}{3}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\Delta_{\text{cr}} - \frac{\Delta_{\text{so}}}{3}}{2}\right)^2 + 2\left(\frac{\Delta_{\text{so}}}{3}\right)^2}. \quad (2.20\text{b})$$

Für die Relativlagen Δ_{AB} und Δ_{AC} der Valenzbänder zueinander gilt:

$$\Delta_{\text{AB/AC}} = \Gamma_9^{\text{v}} - \Gamma_{7\pm}^{\text{v}} = \frac{\Delta_{\text{cr}} + \Delta_{\text{so}}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\Delta_{\text{cr}} + \Delta_{\text{so}})^2 - \frac{8}{3} \Delta_{\text{cr}} \Delta_{\text{so}}}. \quad (2.21)$$

Die Spin-Bahn-Energien der Nitride sind positiv; in der Literatur werden für InN, GaN und AlN Werte von jeweils 5 meV [89], 18 meV [90] und 19 meV [89] angegeben. Die experimentellen Werte für Δ_{cr} betragen jeweils 24 meV [7,8], 10 meV [90] und -230 meV [91] aus Experimenten abgeschätzt. Wenn Δ_{cr} und Δ_{so} , wie bei InN und GaN, positiv sind, wird das oberste Valenzband ohne zusätzliche Verspannung immer durch Γ_9^{v} gebildet. Die $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ -Legierungen zeigen ein anderes Verhalten. Das Γ_{7-}^{v} -Band wird zum höchstenergetischen, wenn Δ_{cr} sein Vorzeichen ändert. Dieses Verhalten wird in Abb. 2.7(a) gezeigt, in dem die relativen Lagen der drei Valenzbänder als Funktion von Δ_{cr} für $\Delta_{\text{so}} = 18$ meV aufgetragen

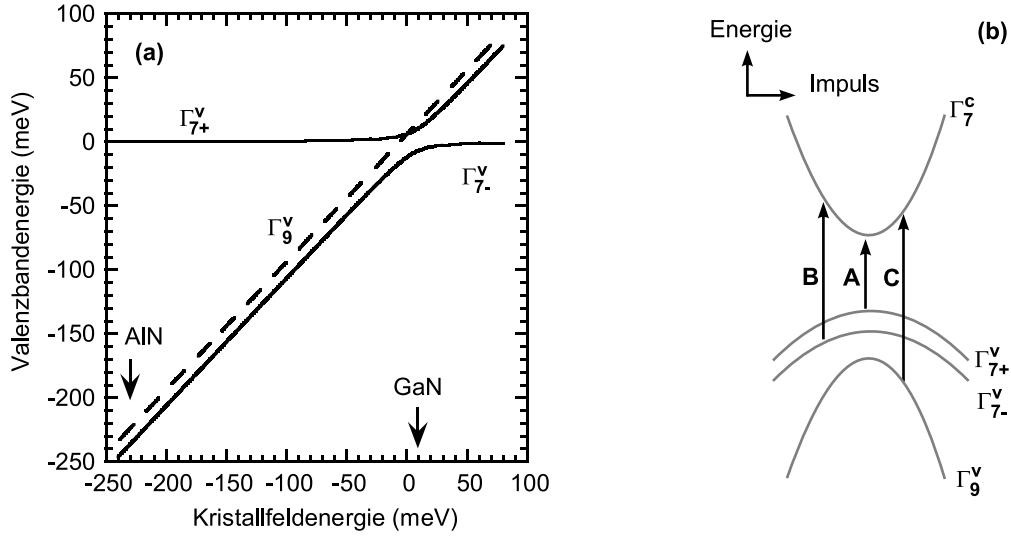


Abb. 2.7: (a) Relative Lage der Valenzbandenergien am Γ -Punkt der Brillouinzone als Funktion des Kristallfeldparameters für eine Spin-Bahn-Energie von 18 meV. (b) Bezeichnung der optischen Übergänge von den drei Valenzbändern ins Leitungsband.

sind. Nimmt man eine lineare Abhängigkeit von Δ_{cr} vom Al-Gehalt an,³ findet der Wechsel bei $x = 0,05$ statt. Ähnliches kann für die AlInN-Legierungen erwartet werden.

Die optischen Übergänge von den drei Valenzbändern ins Leitungsband werden mit A ($\Gamma_9^v \rightarrow \Gamma_7^c$), B ($\Gamma_{7+}^v \rightarrow \Gamma_7^c$) und C ($\Gamma_{7-}^v \rightarrow \Gamma_7^c$) bezeichnet. Der Übergang A ist nur für senkrecht zur optischen (c)-Achse polarisiertes Licht (ordentlicher Strahl, $\vec{E} \perp [0001]$) erlaubt. B und C tragen auch in der anderen Polarisation (außerordentliches Strahl, $\vec{E} \parallel [0001]$) bei. Sie tun dies jedoch mit vom Polarisationszustand abhängigen Anteilen. Dies ist in Abb. 2.8 dargestellt. Zusammen mit den Bandkantenenergien aus Abb. 2.7 ergeben sich folgende fundamentale Zusammenhänge:

1. Aus einem positiven Δ_{cr} resultiert eine höhere Energie der Absorptionskante für außerordentlich polarisiertes Licht (B-Übergang) im Vergleich zu ordentlich polarisiertem (A-Übergang).
2. Der relative Anteil von B zur außerordentlichen Absorption wird schwächer mit größer werdendem Δ_{cr} .
3. Für negative Δ_{cr} wird die niedrigste Absorptionskante immer durch den B-Übergang bestimmt. Er dominiert für $\vec{E} \parallel [0001]$, ist jedoch für $\vec{E} \perp [0001]$

³Zu dieser Abhängigkeit existieren bisher keine exakten Daten.

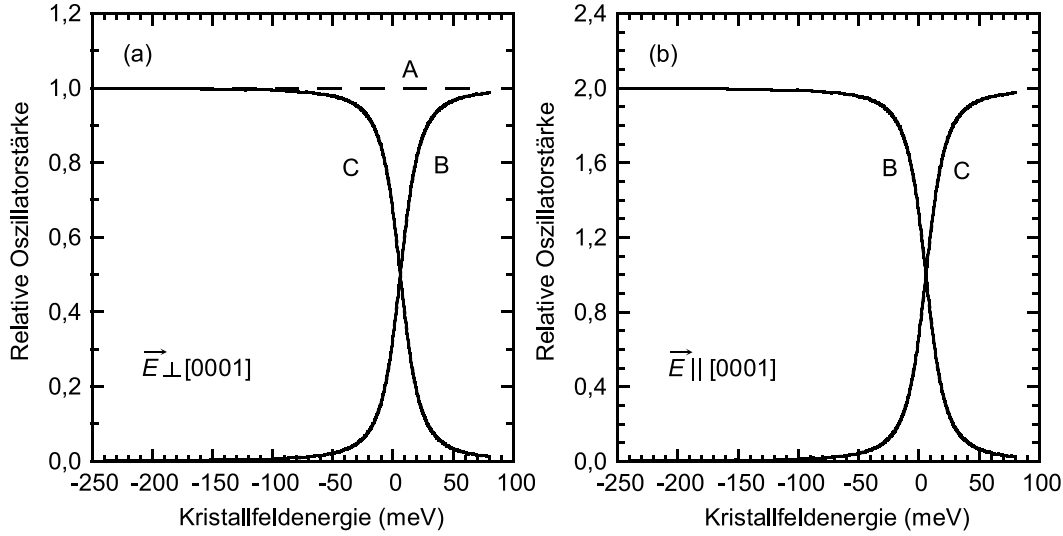


Abb. 2.8: Relative Oszillatorstärken der optischen Übergänge der drei Valenzbänder in das Leitungsband für (a) senkrecht ($\vec{E} \perp [0001]$) und (b) parallel ($\vec{E} \parallel [0001]$) zur optischen (c -)Achse polarisiertes Licht.

sehr schwach gegenüber A. Deshalb bestimmt bei c -achsenorientiertem AlN unter senkrechtem Lichteinfall typischerweise der A-Übergang das Verhalten im Bereich der Absorptionskante.

Da die hier dargestellten Untersuchungen weitgehend mit ordentlich polarisiertem Licht durchgeführt wurden, beziehen sich die Angaben der Bandlückenenergien E_g von GaN und AlGaIn immer auf den A-Übergang.

Kornitzer *et al.* [92] haben für praktisch verspannungsfreies, homoepitaktisches GaN die mit den drei Interbandübergängen verbundenen exzitonischen Übergänge untersucht. Diese Zustände werden gewöhnlich mit FX^A , FX^B und FX^C bezeichnet und entstehen jeweils aus den Valenzbändern mit Γ_9^v -, Γ_7^- - und Γ_7^+ -Symmetrie und dem Γ_7^c -Leitungsband [93]. Die Temperaturabhängigkeit der Interbandübergangsenergie $E_{g,A} \hat{=} \Gamma_9^v \rightarrow \Gamma_7^c$ (siehe Abb. 2.7) wurde in [92] durch die empirische Varshni-Relation

$$E_{g,A}(T) = 3,5019 \text{ eV} - \frac{0,79 \text{ meV/K} \times T^2}{T + 1000 \text{ K}} \quad (2.22)$$

ausgedrückt. Für die Interbandübergänge B und C müssen $\Delta_{AB} = 4,5 \text{ meV}$ bzw. $\Delta_{AC} = 23,5 \text{ meV}$ addiert werden.

Für $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ -Legierungen wird die Abhängigkeit der Bandlücke von der Zusammensetzung mit einer quadratischen Interpolation angegeben:

$$E_g(x) = xE_g^{\text{GaN}} + (1-x)E_g^{\text{AlN}} - bx(1-x). \quad (2.23)$$

dabei ist b der „bowing“ Parameter. Die Angaben zu b schwanken in diesem Mischkristallsystem zwischen positiven und negativen Werten, wie in [94] gezeigt wird. In neueren Arbeiten wird ein Wert um 0,9 eV [95] angegeben.

2.5.2 Verspannte Schichten

Bisher wurden die elektronischen Übergänge verspannungsfreier Nitride betrachtet. Wie in Abschnitt 2.2 ausgeführt wurde, verursacht das pseudomorphe Wachstum dünner Filme auf dickem volumenartigem Material wegen der Differenz der Ausdehnungskoeffizienten verschiedener Schichten zueinander oder zum Substrat eine biaxiale Verspannung. Dies führt zu einer charakteristischen Verschiebung der Übergangsenergien. Biaxiale Druck- ($\epsilon_{\parallel} < 0$) bzw. Zugverspannung ($\epsilon_{\parallel} > 0$) haben dabei die gleiche Wirkung wie eine Vergrößerung bzw. Verkleinerung des Kristallfeldparameters. Die Proportionalität wird mit den Deformationspotenzialen D_i beschrieben und Δ_{cr} aus Gl. 2.20 wird durch

$$\Delta_{\text{cr}} \rightarrow \Delta_{\text{cr}} + D_3\epsilon_{\perp} + 2D_4\epsilon_{\parallel}. \quad (2.24)$$

ersetzt [96]. Peng *et al.* [97] untersuchten die druckabhängigen Verschiebungen der optischen Übergänge der freien Exzitonen (FX) von GaN bei Raumtemperatur. Die besondere Messanordnung gestattete die präzise Ermittlung der Deformationspotenziale. Zusammenfassend kamen die Autoren zu folgenden Abhängigkeiten:

$$\Delta\text{FX}^{\text{A}} = \Delta E_{\text{g,A}} = -8,27 \text{ eV} \cdot \epsilon_{\parallel} \quad (2.25\text{a})$$

$$\Delta\text{FX}^{\text{B/C}} = 14,0 \text{ meV} - 9,78 \text{ eV} \cdot \epsilon_{\parallel} \pm \sqrt{\frac{1}{4} (4,0 \text{ meV} - 3,01 \text{ eV} \cdot \epsilon_{\parallel})^2 + 2 \cdot (6,0 \text{ meV})^2}. \quad (2.25\text{b})$$

Dabei sind die deformationsabhängigen Verschiebungen $\Delta\text{FX}^{\text{A}}$, $\Delta\text{FX}^{\text{B}}$ und $\Delta\text{FX}^{\text{C}}$ gleich den Verschiebungen der Übergänge A, B bzw. C. Die entsprechenden Verläufe sind in Abb. 2.9 dargestellt. Der relativ kleine Einfluss der Verspannung auf die Exzitonenbindungsenergie ist zur Zeit noch nicht hinreichend geklärt und wird im Weiteren vernachlässigt.

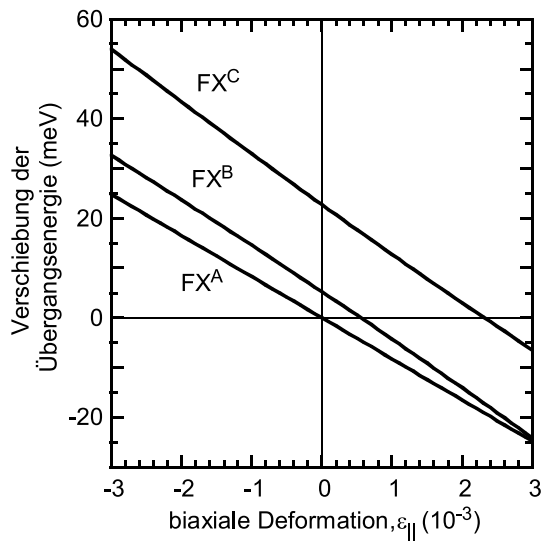


Abb. 2.9: Energieverschiebungen der freien Exzitonen von GaN in Abhängigkeit von der biaxialen Gitterdeformation.

3 Die dielektrische Funktion: Modelle, Numerik, Resultate

In diesem Kapitel wird ein Modell vorgestellt, mit dem erstmals die komplexe exzitonische dielektrische Funktion (DF) von Nitriden im elektrischen Feld vollständig berechnet wird. Die zu diesem Zweck geschriebene Software ermöglicht es, sowohl die DF als auch Elektro- und Photoreflexionsspektren realer Schichtsysteme aus Nitridhalbleitern in angemessener Zeit und komfortabel zu simulieren (siehe Kap. 4). Damit wird eine weit fortgeschrittenere Interpretation experimenteller Spektren als bisher erreicht (siehe Kap. 6).

Das Kapitel beginnt in Abschnitt 3.1 mit der Darstellung etablierter Modelle der Photonenabsorption durch die Erzeugung eines Elektron-Loch-Paares. Dabei gehen wir von der einfachen Interbandabsorption aus und gelangen unter Berücksichtigung der Coulomb-Wechselwirkung und des statischen Feldes schrittweise zu Blosseys Modell [42]. Die effiziente numerische Umsetzung dieses Modells mit einer modernen technischen Programmiersprache (MATHEMATICA) wird in Abschnitt 3.2 dargestellt. Neue theoretische Erkenntnisse sowohl allgemeiner Art als auch speziell für die Gruppe-III-Nitride werden in Abschnitt 3.3 behandelt.

3.1 Modelle

Die Berechnung der DF hat zum Ausgangspunkt, dass die Absorption eines Photons der Energie $\hbar\omega$ mit der Generierung eines Wannierexzitons in der Nähe eines dreidimensionalen M_0 -kritischen Punktes der Bandstruktur verbunden ist. Weiterhin wird das Folgende vorausgesetzt:

1. An der Bildung von Exzitonen sind jeweils nur ein Leitungs- und ein Valenzband beteiligt. Die Valenzbänder sind nicht entartet und können separat betrachtet werden; ihre jeweiligen Beiträge zur Photonenabsorption beeinflussen sich nicht gegenseitig.
2. Das Leitungsband ist leer und das Valenzband ist vollständig mit Elektronen gefüllt.

3. Die Bänder sind isotrop und parabolisch. Die Effektivmassennäherung ist gültig.
4. Im Endzustand wechselwirken das Elektron und das Loch höchstens über die Coulombwechselwirkung, das makroskopische elektrische Feld oder beides.

Diese Voraussetzungen werden später in Abschnitt 3.3.2 diskutiert.

In dieser Arbeit werden je nach zugrunde liegender Elektron-Loch-Wechselwirkung vier Fälle unterschieden (vgl. die Übersicht in Tab. 3.1): Ohne jede Wechselwirkung ergibt sich das einfache Interbandmodell. Der Franz-Keldysh-Effekt beschreibt den Einfluss statischer elektrischer Felder auf die Interbandabsorption. Elektron-Loch-Paare, die die Coulomb-Anziehung spüren, werden als Exzitonen bezeichnet. Ihre Erzeugung durch Photonenabsorption wird in Elliotts Theorie beschrieben. Der Einfluss beider Wechselwirkungen wird durch Blosseys Modell behandelt. Die drei erstgenannten Modelle sind noch analytisch behandelbar. Sie treffen jedoch auf die in dieser Arbeit untersuchten dünnen GaN- und AlGaN-Schichten nur unzureichend zu, weil weder das elektrische Feld noch die Coulomb-Wechselwirkung in einer korrekten Beschreibung der optischen Eigenschaften vernachlässigbar sind. Die Berücksichtigung beider Effekte in Blosseys Modell hat zur Konsequenz, dass numerische Rechnungen notwendig sind.

3.1.1 Allgemeine Formulierung

Die komplexe DF $\bar{\varepsilon}(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ beschreibt die linearen optischen Eigenschaften eines Materials in Abhängigkeit von der Photonenenergie $\hbar\omega$ der eingestrahlten elektromagnetischen Welle. Realteil und Imaginärteil der DF stehen durch die Kramers-Kronig-Beziehung

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (3.1a)$$

Tab. 3.1: Zweibandmodelle zur Beschreibung der Photonenabsorption in direkten Halbleitern.

Modell	Wechselwirkung	
	statisches Feld	Coulomb-Anziehung
Interband (Abschnitt 3.1.2)		
Franz-Keldysh (Abschnitt 3.1.3)	✓	
Elliott (Abschnitt 3.1.4)		✓
Blossey (Abschnitt 3.1.5)	✓	✓

$$\varepsilon_2(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\varepsilon_1(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (3.1b)$$

miteinander in Zusammenhang, wobei P vor dem Integral den Cauchy-Hauptwert bezeichnet. Die DF ist der Materialparameter in der Wellengleichung für den elektrischen Feldstärkevektor \vec{E} der elektromagnetischen Strahlung¹

$$\nabla^2 \vec{E} - \mu_0 \varepsilon_0 \bar{\varepsilon}(\omega) \ddot{\vec{E}} = 0 \quad (3.2)$$

mit der magnetischen Feldkonstanten μ_0 und der elektrischen Feldkonstanten ε_0 . Deren Lösungen sind ebene Wellen der Form

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \exp[i(\vec{k}_{\text{opt}} \vec{r} - \omega t)] , \quad (3.3)$$

wobei \vec{E}_0 die Amplitude, \vec{r} der Ort, ω die Kreisfrequenz und t die Zeit sind. Die optische Ausbreitungskonstante \vec{k}_{opt} , auch komplexer Wellenzahlvektor genannt, steht mit der DF über

$$|\vec{k}_{\text{opt}}| = \bar{k}_{\text{opt}} = \frac{\omega}{c_0} \sqrt{\bar{\varepsilon}(\omega)} \quad (3.4)$$

in Beziehung, $c_0 = (\mu_0 \varepsilon_0)^{-1/2}$ ist dabei die Vakuumlichtgeschwindigkeit. Die Wurzel der DF ist die komplexe Brechzahl

$$\bar{n}(\omega) = n(\omega) + i\kappa(\omega) = \sqrt{\bar{\varepsilon}(\omega)} . \quad (3.5)$$

Eine weitere wichtige messtechnische Größe ist der Absorptionskoeffizient

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{\omega \varepsilon_2(\hbar\omega)}{c_0 n(\hbar\omega)} = \frac{2\omega}{c_0} \Im \left[\sqrt{\bar{\varepsilon}(\hbar\omega)} \right] . \quad (3.6)$$

In der Effektivmassennäherung ist ε_2 für direkte Übergänge vom elektronenbesetzten Valenz- ins leere Leitungsband an der Bandkante E_g eines Halbleiters durch

$$\varepsilon_2(\hbar\omega) = A_0 \times 2 \sum_n |\phi_n(0)|^2 \delta(E_g + E_n - \hbar\omega), \text{ mit} \quad (3.7)$$

$$A_0 = \frac{\pi e^2}{\varepsilon_0 m_0^2 \omega^2} |M|^2$$

gegeben [99]. Hierbei sind e die Elementarladung, m_0 die freie Elektronenmasse und $\hbar = h/2\pi$ die Planckkonstante. M bezeichnet das Impulsmatrixelement,

¹Die Permeabilität des Materials wird gewöhnlich Eins gesetzt [98].

welches die Blochzustände von Valenz- und Leitungsband miteinander verbindet. Zur Beschreibung von optischen Übergängen in der Umgebung des Γ -Punktes der Brillouinzone kann es als impuls- und energieunabhängig angesetzt werden. Die Summe wird über alle Zustände mit den Enveloppen-Wellenfunktionen $\phi_n(\vec{r})$ und den Energieeigenwerten E_n ausgeführt, welche die Effektivmassen-Schrödingergleichung in Relativkoordinaten

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \phi_n(\vec{r}) = E_n \phi_n(\vec{r}) \quad (3.8)$$

erfüllen. E_n wird von der Bandkante aus gezählt. Die reduzierte effektive Masse ist definiert durch $1/\mu = 1/m_e^* + 1/m_h^*$ mit den effektiven Massen der Elektronen m_e^* und der Löcher m_h^* , \vec{r} ist die Relativkoordinate des durch die Photonenabsorption generierten Elektron-Loch-Paares, und $V(\vec{r})$ ist das Potenzial zwischen Elektron und Loch. In diesem Bild werden die Zustände außerhalb des Brillouinzonenzentrums wegen ihres vergleichsweise geringen Beitrages nicht berücksichtigt (ruhender Massenschwerpunkt des Elektron-Loch-Paares).

3.1.2 Interbandübergänge ohne Wechselwirkung

In der einfachsten Betrachtungsweise gibt es nach ihrer Erzeugung keine Wechselwirkung zwischen Elektron und Loch, d.h. $V(\vec{r}) = 0$.² Die Wellenfunktionen und das Energiespektrum haben die Form

$$\phi_n(\vec{r}) = \frac{\exp(i\vec{k}\vec{r})}{\sqrt{V}} \quad (3.9a)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}, \quad (3.9b)$$

mit den diskreten Eigenwerten $n \equiv (n_x, n_y, n_z)$ und den zugehörigen Komponenten des Wellenzahlvektors $k_x = n_x 2\pi/L$, $k_y = n_y 2\pi/L$ und $k_z = n_z 2\pi/L$. L ist die Abmessung des Kristalls und $V = L^3$ sein Volumen. Mit Gl. (3.7) ergibt sich [99]

$$\varepsilon_2(\hbar\omega) = A_0 \times \rho(\hbar\omega). \quad (3.10)$$

Für einen dreidimensionalen M_0 -kritischen Punkt erhält man für die kombinierte Zustandsdichte

$$\rho(\hbar\omega) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} \right)^{3/2} \Re \left(\sqrt{\hbar\omega - E_g} \right), \quad (3.11)$$

²Vom Ausgangspunkt her ist diese Formulierung ein Zweiteilchenbild. Im äquivalenten EinTeilchenbild geht man von einem aus dem Valenzband ins Leitungsband angeregten Elektron aus.

d.h. bis auf einen Faktor von $1/\hbar\omega^2$ zeigt $\varepsilon_2(\hbar\omega)$ einen wurzelförmigen Anstieg oberhalb von E_g . Die damit gewonnene DF gibt den tatsächlichen experimentellen Verlauf von hoch reinen Halbleitern nur unzureichend wieder, wie in Abschnitt 3.1.4 gezeigt werden wird.

3.1.3 Interbandübergänge im elektrischem Feld: Der Franz-Keldysh-Effekt

Die Berechnung der DF in der Nähe der Bandkante unter dem Einfluss eines elektrischen Feldes geht auf die Arbeiten von Franz [44] und Keldysh [45] aus dem Jahr 1958 zurück. Durch die Etablierung der Elektroreflexion als hoch genaue Methode zur Bestimmung wesentlicher Halbleitereigenschaften in den 60-er Jahren wurden diese Arbeiten bedeutend erweitert [100–102] ohne jedoch die Coulombwechselwirkung zu berücksichtigen, d.h. die Gl. (3.11) wird als Grenzfall (die Feldstärke ist Null) vorausgesetzt. Da diese Theorie aber in nahezu der gesamten Literatur verwendet wurde und wird, um experimentelle Daten auszuwerten, sei sie im Folgenden dargestellt.

Man geht von einem homogenen elektrischen Feld in z -Richtung, $\vec{F} = (0,0,F)$, mit dem Potenzial

$$V(\vec{r}) = eFz. \quad (3.12)$$

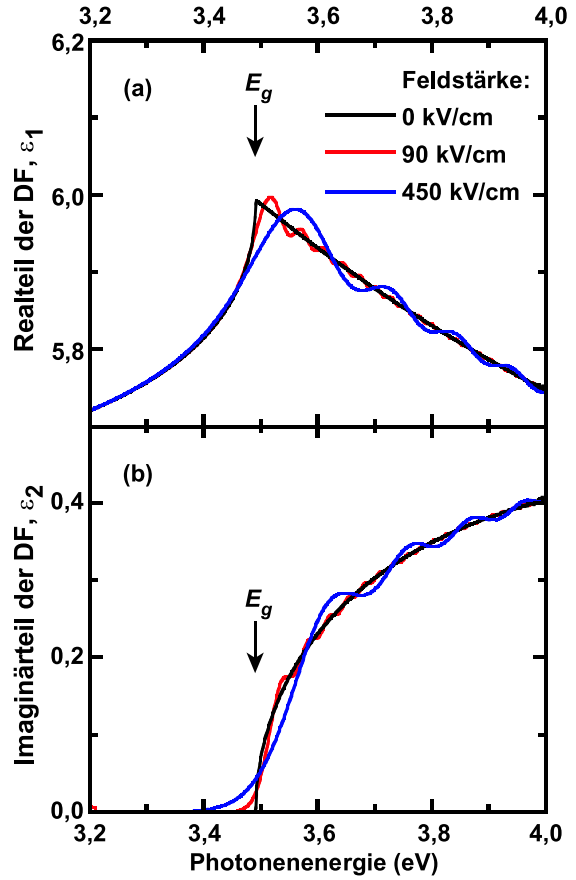
aus. Die Lösung der Schrödingergleichung (3.8) kann als Produktansatz von ebenen Wellen in x - und y -Richtung und mit Airyfunktionen für die z -Koordinate geschrieben werden. Nach Einsetzen in Gl. (3.7) und mit Hilfe der Kramers-Kronig-Transformation, Gl. (3.1b), erhält man die komplexe DF [102]

$$\begin{aligned} \varepsilon_1(\hbar\omega, F) = \varepsilon_\infty + \frac{A_0}{2\pi} \left(\frac{2\mu_{\parallel}}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\hbar\theta} \times & \left\{ 2\sqrt{\frac{E_g}{\hbar\theta}} - \sqrt{\frac{E_g + \hbar\omega}{\hbar\theta}} \right. \\ & \left. + \pi[\text{Ai}'(\eta)\text{Bi}'(\eta) - \eta\text{Ai}(\eta)\text{Bi}(\eta)] \right\} \quad (3.13a) \end{aligned}$$

$$\varepsilon_2(\hbar\omega, F) = \frac{A_0}{2\pi} \left(\frac{2\mu_{\parallel}}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\hbar\theta} \pi [\text{Ai}'^2(\eta) - \eta\text{Ai}^2(\eta)]. \quad (3.13b)$$

Hierbei sind ε_∞ die sog. Hochfrequenzdielektrizitätskonstante, μ_{\parallel} die reduzierten effektive Masse in Feldrichtung und $\text{Ai}(t)$, $\text{Bi}(t)$, $\text{Ai}'(t)$ und $\text{Bi}'(t)$ die normier-

Abb. 3.1: (a) Real- und (b) Imaginärteil der DF für verschiedene elektrische Feldstärken.



ten Airyfunktionen bzw. deren Ableitungen. Die elektrooptische Energie und die dimensionslose Photonenergie sind durch

$$\hbar\theta = \left(\frac{\hbar^2 e^2 F^2}{2\mu_{\parallel}} \right)^{1/3} \quad \text{bzw.} \quad \eta = \frac{E_g + i\Gamma - \hbar\omega}{\hbar\theta} \quad (3.14)$$

gegeben. Die Streuung der Ladungsträger an Phononen, Defekten und ionisierten Störstellen wird durch eine Lorentzverbreiterung mit dem Lebensdauerparameter $\Gamma = \hbar/2\tau$ berücksichtigt (τ ist die mittlere Zeit zwischen zwei Stößen). Für $F \rightarrow 0$ geht ε_2 in den Ausdruck für ungekoppelte Interbandübergänge, Gl. (3.10) und (3.11), über.

In Abb. 3.1 ist die komplexe DF mit und ohne Feldstärkeeinwirkung dargestellt ($\Gamma = 0$). Die Simulationsparameter beziehen sich auf GaN, zur einfacheren Darstellung wurde jedoch nur ein einziger Interbandübergang berücksichtigt. Die schwarzen Kurven stellen die DF des Interbandübergangs dar ($F = 0$). An der

Bandkante besitzt ε_1 ein Maximum, an dem sich seine erste Ableitung nichtstetig ändert. ε_2 wird unterhalb E_g zu Null und steigt ab der Bandkante näherungsweise wurzelförmig an. Vergleicht man diese beiden Kurven mit den jeweiligen DF-Verläufen bei höheren Feldstärken, erkennt man, dass die feldbeeinflusste DF oberhalb der Bandkante um die Nullfeldkurve oszilliert, man spricht von Franz-Keldysh-Oszillationen (FKO). Ihre Amplitude und der Abstand benachbarter Extrema nehmen mit F zu. Wie dieser Effekt in der Analyse von Elektroreflexionsspektren zur Bestimmung der Feldstärke in Halbleiterschichten eingesetzt wird, wird später in Abschnitt 4.3 dargestellt. Ein weiterer fundamentaler Sachverhalt ist das exponentielle Abklingen von ε_2 für $\hbar\omega < E_g$. Dieser Verlauf kann mit

$$\varepsilon_2 \propto \exp(-C_0|E_g - \hbar\omega|^{3/2}/F) \quad (3.15)$$

beschrieben werden, wobei C_0 eine Stoffkonstante bezeichnet. Das bedeutet, dass Absorption unterhalb der Bandkante durch das elektrische Feld möglich wird.

Abschließend sei darauf hingewiesen, dass auch diese erweiterte Beschreibung der DF reale, gemessene Verläufe der Nitride und der meisten anderen Halbleiter nicht wiedergibt. Dies auf den starken Einfluss der Coulombwechselwirkung insbesondere in der Nähe der Bandkante zurückzuführen.

3.1.4 Exzitonen ohne Feldeinfluss: Elliotts Modell

Wird ein Photon in einem Halbleiter absorbiert, entstehen ein Elektron und ein Loch in unmittelbarer Nähe. Durch das Coulombpotenzial wechselwirken sie miteinander, so dass stabile, gebundene Zustände ähnlich denen des Wasserstoffatoms entstehen können. Man bezeichnet sie als freie Exzitonen, im Gegensatz zu den an Störstellen gebundenen. Ihre Grundzustände liegen energetisch um die Bindungsenergie R_y tiefer als E_g . In Halbleitern ist R_y gewöhnlich sehr viel kleiner als E_g und die Exzitonen sind über mehrere Einheitszellen ausgedehnt. In diesem Fall spricht man von Wannierexzitonen [103], welche in der Effektivmassennäherung behandelt werden können. Im Gegensatz dazu findet man in stark ionisch gebundenen Festkörpern, wie z.B. NaCl, Exzitonen, deren Wellenfunktion in einer Einheitszelle lokalisiert sind. Man spricht dann von Frenkel-Exzitonen [104].

Zur Beschreibung der Wannier-Exzitonen setzt man in die Schrödingergleichung (3.8) das Coulombpotenzial

$$V(\vec{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r r} \quad (3.16)$$

ein, wobei $\varepsilon_r = \varepsilon_1(\hbar\omega = 0)$ die relative Dielektrizitätskonstante ist. Als Lösungen des Problems erhält man einerseits einen diskreten Satz von Wasserstoffwellenfunktionen mit diskreten Energieeigenwerten $E_n = -R_y/n^2$ und andererseits ungebundene Zustände für mit Eigenwerten von $E_n > 0$, das Exzitonenkontinuum.

Sowohl der Exzitonenbohrradius a_B als auch R_y hängen von den Materialkonstanten ab:

$$R_y = \frac{\mu e^4}{2(4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r\hbar)^2} \quad (3.17a)$$

$$a_B = \frac{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r\hbar^2}{\mu e^2} . \quad (3.17b)$$

Wegen der im Vergleich zu den beiden anderen Valenzbänder viel kleineren effektiven Löchermasse des Γ_{7+}^v -Bandes von GaN [105] erwartet man unterschiedliche Werte R_y und a_B für die drei zugehörigen Exzitonen. Die experimentellen Befunde widersprechen dem jedoch. Mittels hochauflösender Reflexionsmessungen an unverspanntem GaN bei der Temperatur flüssigen Heliums bestimmten Kornitzer *et al.* [92] die Übergangsenergien der diskreten Zustände mit Γ_5 -Symmetrie, die durch senkrecht zur optischen (c -)Achse polarisiertes Licht ($\vec{E} \perp [0001]$, ordentlicher Strahl) erzeugt werden. Erstaunlicherweise brachte die Untersuchung hervor, dass die R_y aller drei Bänder annähernd mit ~ 25 meV gleich sind. Außerdem ergeben sich zu kleine theoretische Werte (z.B. $R_y = 19$ meV für FX^A), wenn man die anerkannten Materialparameter aus [105] und [106] in Gl. (3.17) einsetzt. Shikanai *et al.* [107] umgingen dieses Problem, indem sie ε_r zu kleineren Werten korrigierten. Dies weist darauf hin, dass polaronische Effekte, d.h. die Verschiebung der Atomrümpfe durch freie Ladungen, eine Rolle spielen und deshalb $\varepsilon(\hbar\omega = 0) > \varepsilon_r > \varepsilon_\infty$ gilt [98], ε_∞ ist dabei die Dielektrizitätskonstante oberhalb der Frequenz der optischen Phononen [108]. In dieser Arbeit wird aufgrund der experimentellen Befunde für die Exzitonen des GaN $R_y = 25$ meV und $a_B = 2,8$ nm angenommen. Damit folgt für $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

$$R_y(x) = 25 \text{ meV} \times \frac{\mu(x)/\mu(0)}{[\varepsilon_r(x)/\varepsilon_r(0)]^2} \quad (3.18a)$$

$$a_B(x) = 2,8 \text{ nm} \times \frac{\varepsilon_r(x)/\varepsilon_r(0)}{\mu(x)/\mu(0)} . \quad (3.18b)$$

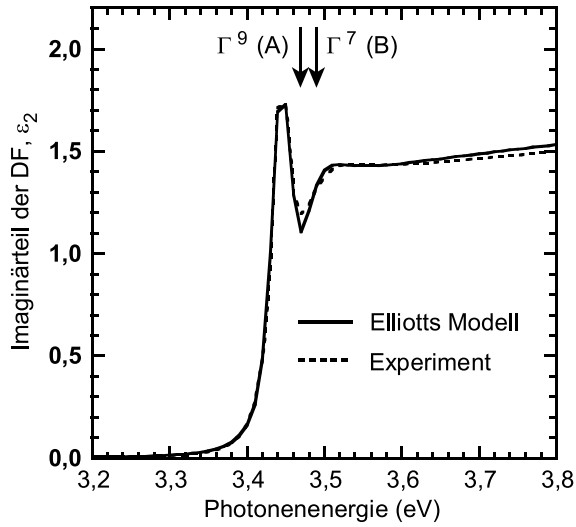


Abb. 3.2: Imaginärteil der DF von GaN bei Raumtemperatur aus Ellipsometriedaten und Modell nach Elliott unter Annahme zweier beteiligter Valenzbänder (A und B). Die jeweiligen Bandkantenenergien sind mit Pfeilen gekennzeichnet.

Nach Lösen der Schrödingergleichung (3.8) und Einsetzen in Gl. (3.7) ergibt sich Elliotts Gleichung [109] für den Imaginärteil der DF. Unter Annahme einer Gaußverbreiterung mit dem Parameter Γ erhält man die Form [110]

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{A_0}{\pi R_y a_B^3} \times \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2R_y}{\sqrt{2\pi}\Gamma n^3} \exp \left[-\frac{(\hbar\omega - E_g + R_y/n^2)^2}{2\Gamma^2} \right] + \frac{1}{2} \frac{1 + \operatorname{erf}[(\hbar\omega - E_g)/\sqrt{2}\Gamma]}{1 - \exp[-2\pi\sqrt{R_y}/|\hbar\omega - E_g|]} \right\}. \quad (3.19)$$

Die Güte dieses Modells wird durch eigene Messungen untermauert. Abbildung 3.2 zeigt das aus Spektrellipsometrie- (SE-)Messungen bestimmte ε_2 einer druckverspannten, nahezu feldfreien GaN-Schicht mit einer Ladungsträgerdichte von $n \approx 1 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ und die Anpassung nach Gl. (3.19). Das Modell umfasst die Übergänge des FX^{A} - und des FX^{B} -Exzitons.³ Beide Kurven sind nahezu deckungsgleich. Das Ergebnis bedeutet, dass die Beschreibung von Absorptionsprozessen bei Nitriden generell nur im Exzitonbild erfolgen kann.

³Der Einfluss der höherenergetischen kritischen Punkte der Bandstruktur wurde, wie in [16] beschrieben, berücksichtigt.

3.1.5 Exzitonen im elektrischen Feld

Einführung

Wie in Kapitel 3.1.4 ausgeführt, wird der Zusammenhang zwischen Verspannung und Resonanzverschiebung bzw. Umverteilung der Oszillatorstärken der freien Exzitonen zur Bestimmung des Verspannungszustandes einer Schicht genutzt. Die Verbreiterung der Exzitonlinien wird gemeinhin als Maß für die strukturelle Qualität herangezogen. Bisher wurde bei der Diskussion experimenteller Daten der Einfluss elektrischer Felder auf die Form der exzitonischen Absorptionskante jedoch weitestgehend vernachlässigt. Die Schwierigkeit liegt darin, dass der Effekt nicht in analytischer Form beschrieben werden kann, sondern nach umfangreicher numerischer Rechnung verlangt.

Das zugrunde gelegte Modell soll die beiden Grenzfälle, Elliotts Exzitonenmodell und die klassische Franz-Keldysh-Theorie, einschließen, Abb. 3.3 veranschaulicht diesen Sachverhalt. Das Problem ist formal gleichwertig zur Schrödingergleichung eines Wasserstoffatoms im elektrischen Feld und wurde daher oft wie der quadratische Stark-Effekt behandelt (siehe z.B. [111]). Der wichtigste Parameter ist das Verhältnis von F zur so genannten Ionisationsfeldstärke

$$F_{\text{ion}} = R_y/a_B, \quad (3.20)$$

welche einem Potenzialabfall von in Höhe der Exzitonrydbergenergie über dem Exzitonbohrradius entspricht und beispielsweise für GaN 90 kV/cm beträgt. Der Störungsansatz liefert zwar für $F \ll F_{\text{ion}}$ brauchbare Ergebnisse, doch für größere Felder konvergiert er nicht gegen die korrekten Werte. Das liegt daran, dass die Wellenfunktionen im Gegensatz zu den lokalisierten Exzitonenzuständen ohne Feld schon bei endlichen kleinen Feldern aus dem Coulombtal heraus tunneln. Ansätze, wie man die Photonenenergieabhängigkeit des Imaginärteils $\varepsilon_2(\hbar\omega, F)$ der DF für jeden Halbleiter in der Nähe der Bandkante berechnet, wurden bereits im Jahre 1970 von Dow und Redfield [40] und von Blossey [42] entwickelt. Später erschien eine weitere theoretische Arbeit auf diesem Gebiet von Galbraith [112], welcher die Lösungen dieses Problems alternativ zu den vorangegangenen Ansätzen in Form von nicht-störungstheoretischen Potenzreihen ausdrückte. In den drei Arbeiten wird die exakte numerische Lösung zur Behandlung der Elektron-Loch-Wechselwirkung unter dem Einfluss eines elektrischen Feldes erzielt, indem zu parabolischen Koordinaten übergegangen wird. In diesen Modellen erhält man für ε_2 als Funktion von F folgende Resultate:

1. Die Hauptresonanz der Exzitonen, die dem Grundzustand entspricht, unterliegt einer nichtmonotonen Verschiebung ihres Maximums auf der Photonenenergieachse.

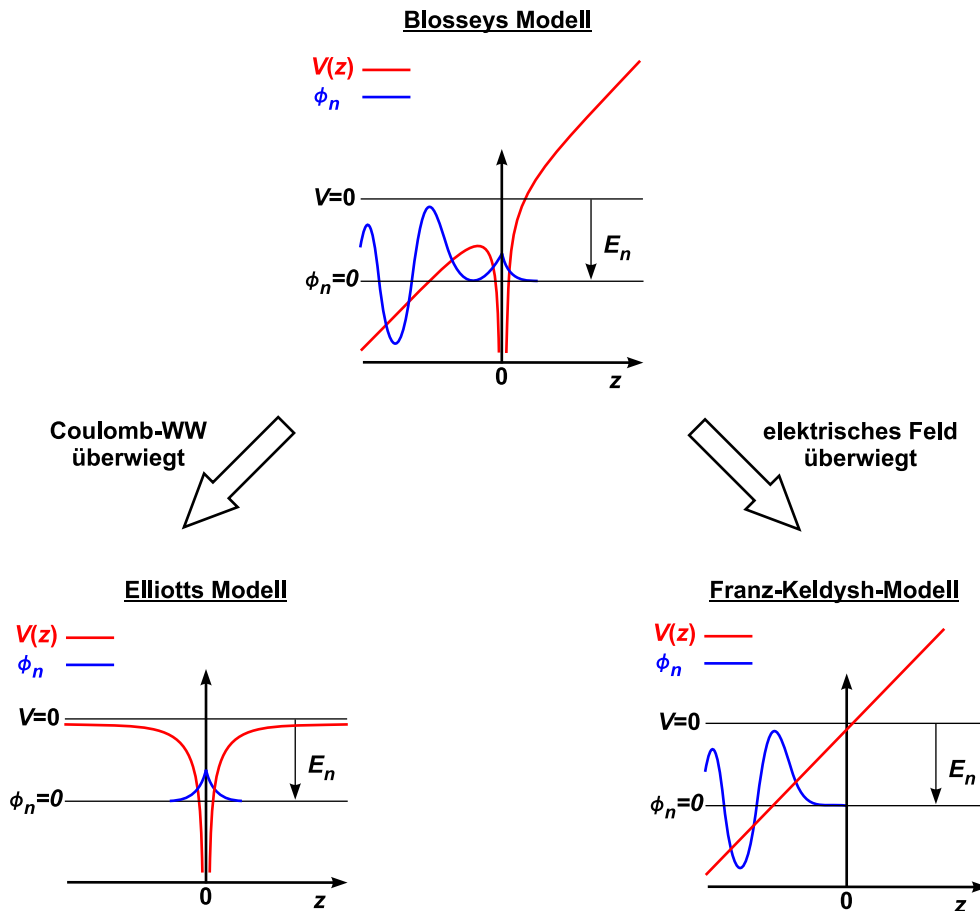


Abb. 3.3: Potenzialverlauf und Enveloppen-Wellenfunktionen des Elektrons relativ zum Loch in z -Richtung. Blosseys Modell schließt als Grenzfälle Elliotts Modell des Exzitons und den Franz-Keldysh-Effekt ein.

2. Die Höhe des Maximums nimmt mit steigendem F ab und seine Verbreiterung zu, so dass es bei größeren Feldern zur Verschmelzung mit dem Exzitonkontinuum kommt.
3. Die feldinduzierte Absorption weit unterhalb der Bandkante ist im relevanten Feldstärkebereich im Vergleich zum klassischen Franz-Keldysh-Effekt einige Größenordnungen höher [40]. Eine Übereinstimmung wird erst bei extrem hohen Feldern ($F > 100F_{\text{ion}}$) erreicht.

Obwohl die Modelle zur Beschreibung des Feldeinflusses auf die Elektron-Loch-Wechselwirkung zu gleichen Resultate führen, gibt es Unterschiede in der Behandlung der zugrunde liegenden Differentialgleichungen. In dieser Arbeit wurde Blosseys Modell numerisch umgesetzt.

Blosseys Modell

Den Ausgangspunkt bildet wieder Gl. (3.7), in der die Summe über alle n nun mit den Wellenfunktionen $\phi_n(\vec{r})$ und den Eigenenergien E_n ausgeführt wird, welche die Schrödingergleichung eines Wasserstoffatoms im elektrischen Feld

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r|\vec{r}|} - eFz \right] \phi_n(\vec{r}) = E_n \phi_n(\vec{r}) \quad (3.21)$$

erfüllen. F ist dabei das statische elektrische Feld. Es besitzt eine einzige Komponente in z -Richtung. Diese partielle Eigenwert-Differentialgleichung überführt man durch eine Koordinatentransformation von den kartesischen Koordinaten $\{x, y, z\}$ in die parabolischen Koordinaten

$$\zeta = |\vec{r}| + z, \quad \eta = |\vec{r}| - z, \quad \text{und} \quad \varphi = \arctan(y/x). \quad (3.22)$$

Dabei verwendet man den Separationsansatz [42]

$$\phi(\vec{r}) = Af(\eta)g(\zeta)e^{\pm im\varphi}, \quad (3.23)$$

wobei A eine Normierungskonstante und m eine Quantenzahl, die der Magnetquantenzahl des Wasserstoffatoms entspricht, darstellen. Man führt dimensionslose Größen ein, so dass die berechneten Eigenwerte nicht direkt von den Materialkonstanten und der Feldstärke abhängen. Mit der Überlegung, dass $\phi^2(0)$ proportional zu ϵ_2 ist und $\phi(0) \neq 0$ nur unter der Bedingung $m = 0$ möglich ist, reduzierte Blossey Gl. (3.21) zu einem Paar von gewöhnlichen Eigenwert-DGLs in einer Variablen x (x ist nun ebenfalls eine dimensionslose Ortskoordinate):

$$\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \left(x \frac{d}{dx} f \right) + \left(-\frac{\varkappa}{x} + \beta - x \right) f = 0 \quad , \text{für} \quad x > 0 \quad ; \quad (3.24a)$$

$$\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \left(x \frac{d}{dx} g \right) + \left(-\frac{\varkappa'}{x} + \beta - x \right) g = 0 \quad , \text{für} \quad x < 0 \quad . \quad (3.24b)$$

Beide Differentialgleichungen sind über den Zusammenhang

$$\varkappa' = \varkappa + 2(F_{\text{ion}}/F)^{1/3} \quad (3.25)$$

miteinander verknüpft. Die Übergangsenergie wird durch den dimensionslosen Parameter

$$\beta = E_n/\hbar\theta = (F/F_{\text{ion}})^{-2/3} \times E_n/R_y \quad (3.26)$$

ersetzt, wobei $\hbar\theta$ die aus Gl. (3.14) bekannte elektrooptische Energie ist. Die Übergangsenergie an der Bandkante entspricht $\beta = 0$. Die Lösungen $f(x)$ und $g(x)$ sollen so normiert werden, dass Gl. (3.7) zu

$$\varepsilon_2(\hbar\omega) = \frac{\pi e^2}{\varepsilon_0 m_0^2 \omega^2} |M|^2 \times \frac{\phi^2(0)}{2\pi^2 R_y a_B^3}, \quad (3.27a)$$

mit

$$\phi^2(0) = \left(\frac{F}{F_{\text{ion}}} \right)^{1/3} \sum_{i=1}^{\infty} f_{\mathcal{X}_i}^2(0) g_{\mathcal{X}_i}^2(0) \quad (3.27b)$$

umgeschrieben werden kann.

3.2 Die numerische Umsetzung des Blossey-Modells

Im vorhergehenden Abschnitt wurde der Imaginärteil der exzitonischen DF unter dem Einfluss eines elektrischen Feldes in umfassender Weise theoretisch beschrieben. Die numerische Umsetzung des zu Grunde liegenden Modells wurde in dieser Arbeit darauf ausgerichtet, hilfreich für die Simulation und Anpassung optischer Spektren von Halbleiterstrukturen mit kompliziertem Schichtaufbau zu sein. Die hier beschriebene Berechnungsmethode benötigt minimalen numerischen Aufwand und ist dabei allgemeingültig, d.h. das Verfahren kann auf beliebige HL angewendet werden, in denen Exzitonen und elektrische Felder gemeinsam über andere Effekte dominieren. Zur einfachen Handhabung wurden diese Schritte in ein plattformunabhängiges Programm in MATHEMATICA [113] implementiert. Außerdem bietet das Programm die Möglichkeit, ε_1 durch die Kramers-Kronig-Transformation zu erhalten. Es steht nun zur Interpretation optischer Spektren bzw. zur genaueren Dimensionierung optoelektronischer Bauelemente zur Verfügung.

Um ε_2 und die Zustandsdichtefunktion $\phi^2(0)$ für eine bestimmte Photonenenergie $\hbar\omega$ zu berechnen, geht man in folgender Reihenfolge vor:

1. Festlegung der dimensionslosen Übergangsenergie β nach Gl. (3.26), wobei $E_n = \hbar\omega - E_g$ gilt.
2. Lösen der Gl. (3.24a) für ein bestimmtes i , d.h. Berechnung von $f_{\mathcal{X}_i}^2(0)$ und \mathcal{X}_i .
3. Bestimmung von \mathcal{X}'_i nach Gl. (3.25) und Berechnung von $g_{\mathcal{X}'_i}^2(0)$ nach Gl. (3.24b).

4. Wiederholung ab dem 2. Punkt für eine weitere i , z.B. von $i = 1..10$.
5. Einsetzen von $f_{\varkappa_i}^2(0)$ und $g_{\varkappa_i}^2(0)$ in Gl. (3.27) zur Berechnung von $\phi^2(0)$ und schließlich von ε_2 .

Die Herausforderungen liegen in den Schritten 2. und 3. Die nun genauer erläutert werden.

3.2.1 Die Berechnung von $f^2(0)$

Die DGL (3.24a) wird durch Vorwärtsintegration von f für $x > 0$ gelöst. Die Lösungen $f_{\varkappa_i}(x)$ und \varkappa_i bilden einen Satz von Funktionen, welche diskret in der Quantenzahl⁴ i und kontinuierlich in der dimensionslosen Energie β sind.

Zur Lösung wird die in MATHEMATICA enthaltene, explizite Runge-Kutta-Methode verwendet. Es werden dabei zwei Runge-Kutta-Verfahren verschiedener Ordnung (9 und 8) und damit auch unterschiedlicher Genauigkeit [Fehlerordnung $\mathcal{O}(h^9)$ bzw. $\mathcal{O}(h^8)$, mit der Schrittweite h] benutzt [114]. Das Verfahren mit $\mathcal{O}(h^9)$ liefert das Ergebnis, während das Verfahren mit $\mathcal{O}(h^8)$ zur Abschätzung des lokalen Fehlers dient. Um Rechenzeit zu sparen, sind die Verfahren eingebettet, d.h. sie teilen die selben Zwischenschritte. Die Genauigkeit und die Geschwindigkeit der Rechnung werden gesteigert, indem sich die lokale Schrittweite gemäß dem lokalen Fehler anpasst. Diese Methode allein reicht nicht aus, da die Lösungen für eine bestimmte Energie β diskret in i sein sollen. Das sind sie nur, wenn die Funktion $f(x)$ für $x > \beta$ exponentiell gemäß der asymptotischen Lösung

$$f_{\varkappa_i,\beta}(x) \sim (x - \beta)^{-3/4} \exp\left[-\frac{2}{3}(x - \beta)^{3/2} + \varkappa_i(x - \beta)^{-1/2}\right] \quad (3.28)$$

abfällt. Daher wird das Runge-Kutta-Verfahren mit dem sog. Schießverfahren (siehe z.B. [115]) kombiniert. Für ein bestimmtes β und ein bestimmtes i werden der Funktionswert und die Ableitung am Startpunkt, d.h. bei $x \rightarrow +0$, benötigt. Beide stehen dort nach der l'Hôpital'schen Regel über $df_{\varkappa_i}/dx = \varkappa_i f_{\varkappa_i}$ in Beziehung. Im Startpunkt werden willkürlich $f_{\varkappa_i} = 1$ und $df_{\varkappa_i}/dx = \varkappa_i$ vorgegeben, und die DGL wird bis zum numerischen Endpunkt gelöst. Da Gl. (3.28) nur für $x > \beta$ gilt, wird dieser Endpunkt durch $x_{\text{Ende}} = 3\beta$ oder $x_{\text{Ende}} = 20$ festgelegt, je nachdem welcher Wert größer ist. Im Verlauf des Schießverfahrens wird \varkappa_i so lange variiert, bis die relative Abweichung $\Delta\varkappa_i/\varkappa_i$ zwischen aufeinander folgenden Iterationen kleiner als 10^{-10} ist oder $f(x)$ für $x < x_{\text{Ende}}$ nicht divergiert. Der Verlauf des Iterationsverfahrens (über die Abbruchbedingung hinaus) ist anhand von Abb. 3.4 für die Parameter $\beta = 5$ und $i = 3$ beispielhaft illustriert. Abbildung (a) zeigt, dass

⁴Für $F \rightarrow 0$ entspricht i der Drehimpulsquantenzahl des Wasserstoffatoms l . Es gilt: $i = l + 1$.

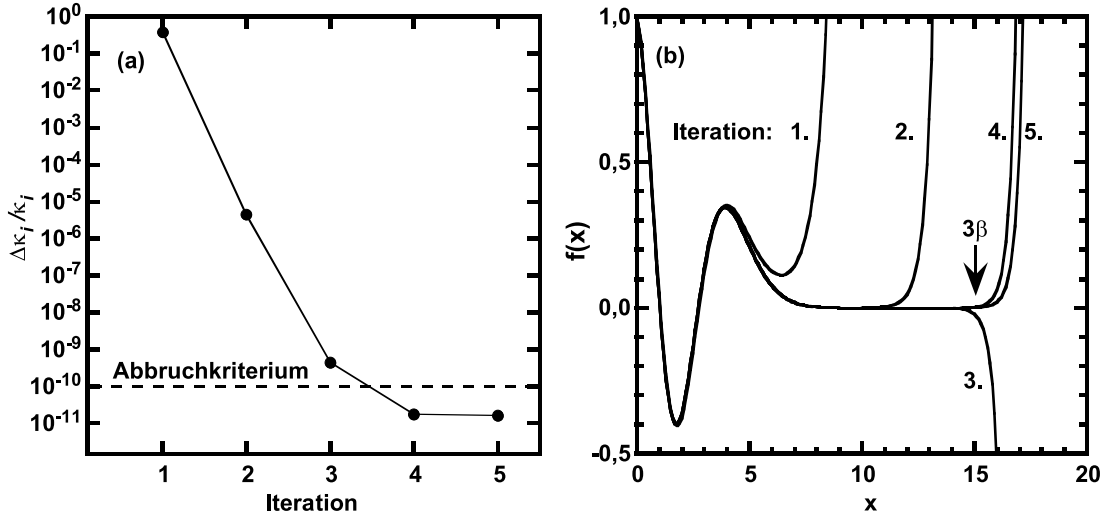


Abb. 3.4: Verlauf des Iterationsverfahrens. In Abb. (a) sind die relativen Abweichungen vom Endwert von \varkappa_i und in Abb. (b) die Lösungen für $f(x)$ in Abhängigkeit von der Anzahl ausgeführter Iterationen dargestellt. Die Parameter sind $\beta = 5$ und $i = 3$.

das Abbruchkriterium bereits mit der vierten Iteration erreicht und danach keine deutliche Verbesserung mehr erzielt wird. Dies wird auch in Darstellung (b) für $f(x)$ deutlich: der divergente Bereich der numerischen Lösung beginnt oberhalb von 3β und die Verbesserung mit der fünften Iteration ist unwesentlich.

Das Vorgehen wird nun genauer erläutert. Zuerst wird ein recht guter Startwert für \varkappa_i mit Hilfe der Wentzel-Kramers-Brillouin-Näherung (WKB-Näherung) [116–118] bestimmt, indem die Gleichungen

$$i - \frac{1}{2} = \begin{cases} B(B-A)^{1/2} {}_2F_1[-1/2, 3/2; 2; B/(B-A)]/2 \\ (B-A)^2 B^{-1/2} {}_2F_1[1/2, 3/2; 3; (B-A)/B]/8 \end{cases}, \quad \begin{cases} \varkappa < 0 \\ \varkappa > 0 \end{cases} \quad (3.29a)$$

mit

$$\begin{aligned} A &= 1/2[\beta - (\beta^2 - 4\varkappa)^{1/2}] \\ B &= 1/2[\beta + (\beta^2 - 4\varkappa)^{1/2}] \end{aligned} \quad (3.29b)$$

gelöst werden [42], dabei ist ${}_2F_1$ eine hypergeometrische Funktion. Danach wird \varkappa_i nach oben und nach unten variiert, wobei an einer festgelegten Stelle im divergenten Bereich der numerischen Lösung die jeweiligen Funktionswerte dieser drei Lösungen berechnet werden. Dabei können positive und negative Funktionswerte auftreten. Die Lösung ist umso besser, je genauer die Null getroffen wird. Daher wird ein Nullstellensuchverfahren gestartet, um die \varkappa_i -Werte des nächsten Iterationsschrittes in geeigneter Weise festzulegen.

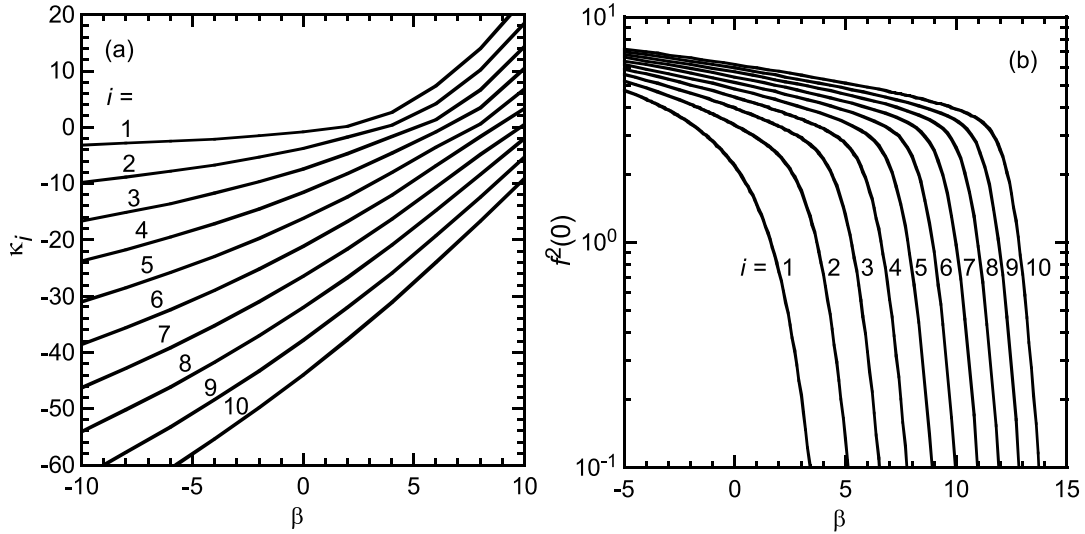


Abb. 3.5: Lösungen der DGL (3.24a) für die Quantenzahlen $i = 1..10$. In (a) sind die Eigenwerte $\kappa_i(\beta)$ und in (b) sind die Quadrate der Lösungen, $f^2(0)$, für $x \rightarrow +0$ jeweils über dem Energieparameter β aufgetragen.

Ist die Abbruchbedingung erreicht, wird $f(x)$ im letzten Schritt durch numerische Integration normiert. Man erhält die in Abb. 3.5 dargestellten Funktionen $\kappa_i(\beta)$ und $f_{\kappa_i, \beta}^2(0)$. Da $f_{\kappa_i, \beta}^2(0)$ als Faktor in ε_2 eingeht, begrenzen die markante Knickstellen den Einfluss der Zustände mit einer bestimmten Quantenzahl i im hochenergetischen Bereich [$\beta \propto E_n$, vgl. Gl. (3.26)]. Sie treten an den Nullstellen von $\kappa_i(\beta)$ auf, die bei

$$\beta_i \sim \left[\frac{3}{2} \pi \left(i - \frac{1}{2} \right) \right]^{2/3} \quad (3.30)$$

liegen. Ähnlich den FKO laufen sie linear mit F oberhalb der Bandkante auseinander.

Weil die Berechnung von $f_{\kappa_i, \beta}^2(0)$ für jeden Energiewert β eines zu berechnenden Spektrums wiederholt werden müsste, wäre ein riesiger Rechenaufwand nötig. Es ist stattdessen sinnvoller, die relativ glatten Funktionen $f_{\kappa_i, \beta}^2(0)$ und $\kappa_i(\beta)$ in einem genügend großen Bereich von β für eine Anzahl von Quantenzahlen i zu speichern und statt einer numerischen Lösung der DGL Zwischenwerte zu interpolieren. Da später Elektreflexionsspektren simuliert werden sollen, in denen die Änderungen der DF maßgeblich sind, ist eine hohe Genauigkeit erforderlich. Die Anzahl zuverlässiger Dezimalstellen von $f_{\kappa_i, \beta}^2(0)$ im Programm wird mit mindestens 10 abgeschätzt.

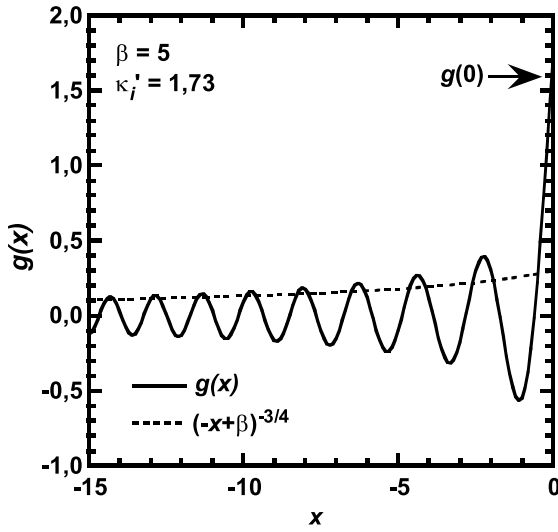


Abb. 3.6: Die Lösungen der Differentialgleichung (3.24b), $g(x)$, und die Einhüllende der asymptotischen Lösung für die Parameter $\beta = 5$, $i = 3$ und $F = F_{\text{ion}}$.

3.2.2 Die Berechnung von $g^2(0)$

Im Vergleich zum Vorhergehenden gestaltet sich die Berechnung von $g^2(0)$ relativ einfach. Die DGL (3.24b) wird in ähnlicher Weise mit dem Runge-Kutta-Verfahren der Ordnung 9(8) ausgehend vom Startpunkt $x \rightarrow -0$ für eine bestimmte Energie β und einen bestimmten Eigenwert $\varkappa'_i = \varkappa_i + 2(F_{\text{ion}}/F)^{1/3}$, welcher aus der Bestimmung von $f^2(0)$ bekannt ist, gelöst.

Blossey wies darauf hin, dass die numerische Normierung von g nicht möglich ist, da die asymptotische Lösung

$$g_{\varkappa'_i, \beta}(x) \sim (-x + \beta)^{-3/4} \sin \left[\frac{2}{3}(-x + \beta)^{3/2} + \varkappa'_i(-x + \beta)^{1/2} + \alpha \right] \quad (3.31)$$

nur langsam abklingt [42]. α ist ein Phasenwinkel. Zur Normierung wird in genügend großem Abstand, d.h. nach einer stets festen Anzahl von Oszillationen, die numerische Lösung an die Einhüllende von Gl. (3.31) angepasst. Beide Kurven sind in Abb. 3.6 für $\beta = 5$ und $\varkappa'_i = 1,73$ (gleichbedeutend mit $i = 3$ und $F = F_{\text{ion}}$) dargestellt.

Im Gegensatz zu $f^2(0)$ ist $g^2(0)$ eine kontinuierliche Funktion vom Feldstärkeparameter \varkappa'_i und vom Energieparameter β . Abbildung 3.7(a) zeigt dies. Charakteristisch sind das Plateau für $\beta > 0$ und $\varkappa' > 0$ sowie die sehr scharfen Grate, welche aus dem Plateau bei $\beta < 0$ (unterhalb der Bandkante) herauslaufen. Intuitiv denkt man dabei an die scharfen Linien des gebundenen Exzitons. Die Bedeutung dieser Grate wird mit Abb. 3.7(b) erläutert. Dazu wurde die Kurve mit $\beta = -5$ herausgegriffen. Dieser Energiewert entspricht für $F = 0,1F_{\text{ion}}$ der nied-

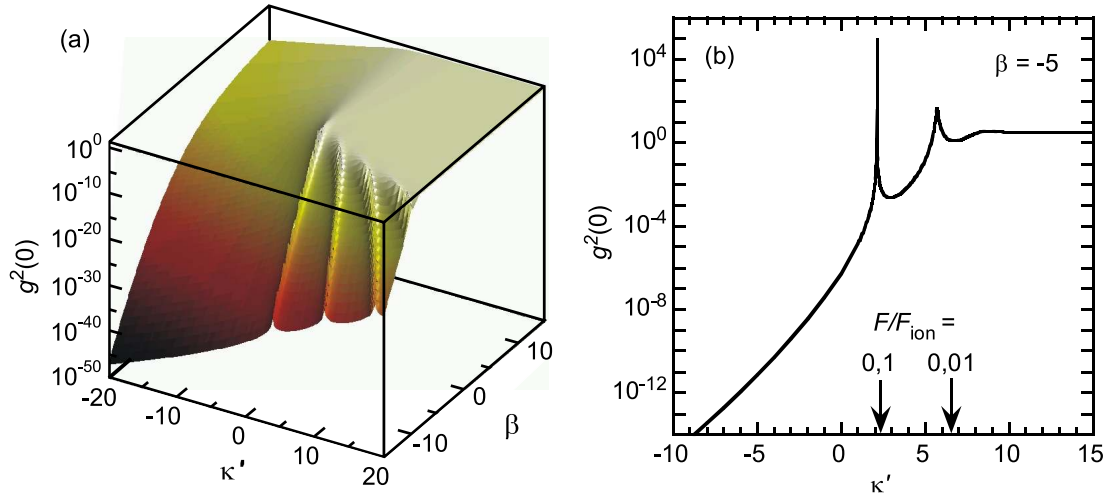


Abb. 3.7: Die Quadrate der Lösungen der Differentialgleichung (3.24b). In (a) ist $g^2(0)$ über dem Feldstärkeparameter κ' und der dimensionslosen Energie β aufgetragen. (b) stellt $g^2(0)$ für $\beta = -5$ dar. Die Pfeile in der Nähe der Maxima markieren die (feldstärkeabhängigen) κ'_1 -Werte für den Grundzustand bzw. den ersten angeregten Zustand, welche mit der Bedingung $\beta = -5$ vereinbar sind.

rigsten Exzitonresonanz ($\hat{=}$ Grundzustand) bzw. für $F = 0,01F_{\text{ion}}$ der Energie der zweitniedrigsten Resonanz ($\hat{=}$ erster angeregter Zustand). Tatsächlich befinden sich die beiden Maxima in der Nähe der κ'_1 -Werte für diese beiden Feldstärken. Es handelt sich bei diesen beiden Zuständen mit der „Nebenquantenzahl“ $i = 1$ um die durch den Stark-Effekt abgespaltenen Wasserstoffzustände mit den jeweils niedrigsten Energien und den Hauptquantenzahlen $n = 1$ bzw. $n = 2$. Maxima für höhere n treten im Diagramm nicht auf, da diese Zustände sehr leicht ionisierbar sind. Ihre Ionisationsfeldstärke nimmt mit $1/n^4$ ab.

Weil $g^2(0)$ für $\beta > 0$ eine glatte Fläche ist, wurde die Funktion zur Verringerung des Rechenaufwandes in diesem Bereich tabelliert.

3.3 Resultate

3.3.1 Allgemeingültiges

Geht man nach den in Abschnitt 3.2 beschriebenen Schritten vor, erhält man den Imaginärteil der DF ε_2 für ein Valenz- und Leitungsbandpaar, welcher in Abb. 3.8 für einige Feldstärken dargestellt ist. Die Kurven sind durch ein Gaußprofil mit dem Verbreiterungsparameter $\Gamma = 0,2R_y$ verbreitert. Für $F = 0,1F_{\text{ion}}$ erscheint ein ausgeprägtes Maximum bei $E_n \approx -R_y$ und ein Kontinuumsbereich

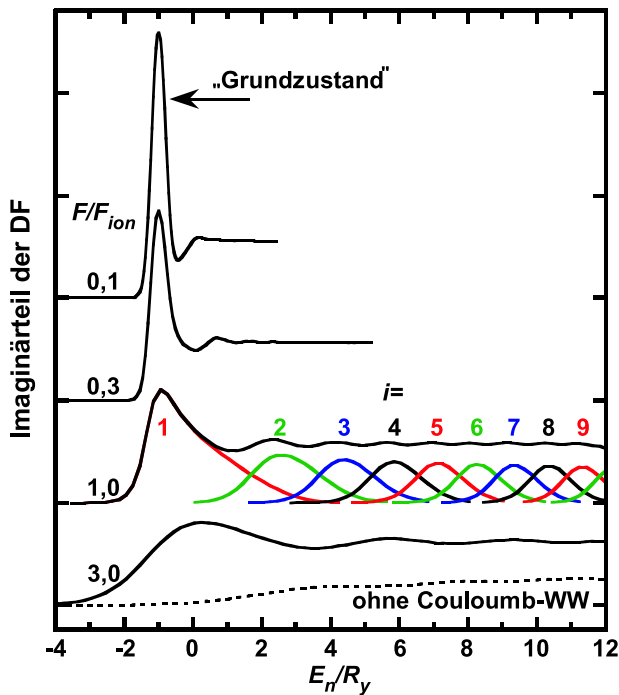


Abb. 3.8: Beitrag eines Valenz-Leitungsband-Paares zum Imaginärteil der DF für verschiedene Feldstärken. Unter der Kurve für $F = F_{\text{ion}}$ sind einzelnen Beiträge für die Quantenzahlen i [siehe Gl. (3.27)] dargestellt. Zum Vergleich ist für $F = 3F_{\text{ion}}$ auch die Kurve ohne Coulombwechselwirkung [siehe Gl. (3.13)] dargestellt.

oberhalb von $E_n = 0$, d.h. oberhalb der Bandkante. Wird F auf $0,3F_{\text{ion}}$ vergrößert, verschiebt sich das Maximum geringfügig ins Rote, dies wird allgemein als exzitoner Stark-Effekt bezeichnet. Seine Höhe verringert sich dabei. Oberhalb des Maximums erscheinen FKO-ähnliche Strukturen, die im Folgenden ebenfalls mit FKO bezeichnet werden. Eine weitere Vergrößerung von F verursacht eine Erhöhung der FKO-Amplituden, eine Verbreiterung und eine Blauverschiebung des ersten Maximums. Für $F = 3F_{\text{ion}}$ tritt das erste Maximum sogar oberhalb E_g auf. Dieses Maximum entspricht dem Exzitonengrundzustand ($n = 1$) in Elliotts Theorie [109]. Tatsächlich ist der Unterschied zwischen der verbreiterten Elliottfunktion (3.19) und der Kurve mit $F = 0,1F_{\text{ion}}$ minimal. Der Grund für die Verschiebung und die Verbreiterung mit F ist die Mischung der diskreten wasserstoffähnlichen Wellenfunktionen mit den Kontinuumszuständen. Bildlich ausgedrückt: Mit dem Feld steigt die Fluchtwahrscheinlichkeit des im Potenzialtopf des Lochs gefangenen Elektrons. Entkommt das Elektron schließlich der Anziehung des Lochs, ist es frei beweglich und wird im Feld beschleunigt. Dieser Übergang geschieht im Gegensatz zum klassischen Bild kontinuierlich mit F . Trotzdem ist die klassische Ionisationsfeldstärke von F_{ion}/n^4 ein gutes Maß dafür,⁵ ab welchem F keine ausgeprägten Resonanzüberhöhungen erscheinen. Der Zustand mit $n = 2$

⁵Die klassische Ionisationsfeldstärke leitet man aus dem Bohrschen Atommodell ab.

ist z.B. bei $0,1F_{\text{ion}}$ schon ionisiert und kann in GaN nur in Kristallbereichen mit $F < 5 \text{ kV/cm}$ beobachtet werden.

Für $F = F_{\text{ion}}$ sind in Abb. 3.8 die einzelnen Beiträge mit den Quantenzahlen i aufgeschlüsselt, um deren Bedeutung für die FKO zu erläutern. Jeder durch ein bestimmtes i gekennzeichnete Summand in Gl. (3.27) fügt ein Maximum zum ε_2 hinzu, wobei die Maxima für große i an den Stellen $E_n/R_y \sim [(F/F_{\text{ion}})\frac{3}{2}\pi(i - \frac{1}{2})]^{2/3}$ zentriert sind. Werden die FKO im Einteilchen-Franz-Keldysh-Bild behandelt, ergibt sich die gleiche Aufspaltung der Oszillationen; dies wird später im Abschnitt 3.3.2 noch genauer untersucht. Vergleicht man jedoch das Einteilchen-Franz-Keldysh-Bild mit der vollständigen numerischen Lösung, siehe die jeweiligen Kurven mit $F = 3F_{\text{ion}}$ in Abb. 3.8, wird sofort klar, dass das Coulombpotential nicht nur ε_2 insgesamt erhöht (Sommerfeldfaktor), sondern auch die die Oszillationsamplitude verstärkt.

Die Feldstärkeabhängigkeit des markanten ersten Maximums soll nun näher betrachtet werden. Dazu ist seine Lage \tilde{R}_y in Abb. 3.9(a) zusammen mit dem Ergebnis aus der Störungstheorie (siehe z.B. [111])

$$\tilde{R}_y(F) = R_y \left(1 - \frac{9}{8} \frac{F}{F_{\text{ion}}} \right) \quad (3.32)$$

dargestellt. Die Rotverschiebung für $F < 0,4F_{\text{ion}}$ stimmt mit der Störungstheorie gut überein. Für GaN liegt dieser Feldstärkebereich unter 36 kV/cm . Solch kleine Felder existieren nur in dicken Schichten oder Volumenkristallen in Entfernung einiger hundert Nanometer von Grenz- und Oberflächen. Oberhalb $0,4F_{\text{ion}}$ tritt eine zunehmende Abweichung beider Kurven auf. Bei ca. $0,45F_{\text{ion}}$ und $-1,11 R_y$ wird ein Minimum erreicht. Für GaN bedeutet dies eine maximale Rotverschiebung der Exzitonlinie um $2,8 \text{ meV}$ bei 40 kV/cm . Mit weiterer Vergrößerung der Feldstärke beginnt eine monotone Blauverschiebung. Der störungstheoretische Ansatz scheidet prinzipiell für jegliches $F > 0$, da diese Zustände nicht vollständig durch die ungestörten Wellenfunktionen ausgedrückt werden können.

Lässt man F weiter steigen wie in Abb. 3.9(b) dargestellt ist, so findet man eine fast lineare Abhängigkeit von \tilde{R}_y , welche sich durch

$$\tilde{R}_y(F) \sim \frac{R_y}{2} \left(\frac{F}{F_{\text{ion}}} - 3 \right) \quad (3.33)$$

annähern lässt. Im Fall von GaN bedeutet dies eine Blauverschiebung von 14 meV je 100 kV/cm . Diese Abhängigkeit wurde nach Kenntnis des Autors bisher nicht quantifiziert. Im Gegensatz dazu wird eine $F^{2/3}$ -Proportionalität im Einteilchenbild vorausgesagt. Der neue Befund wird jedoch durch die Aussage von Lederman

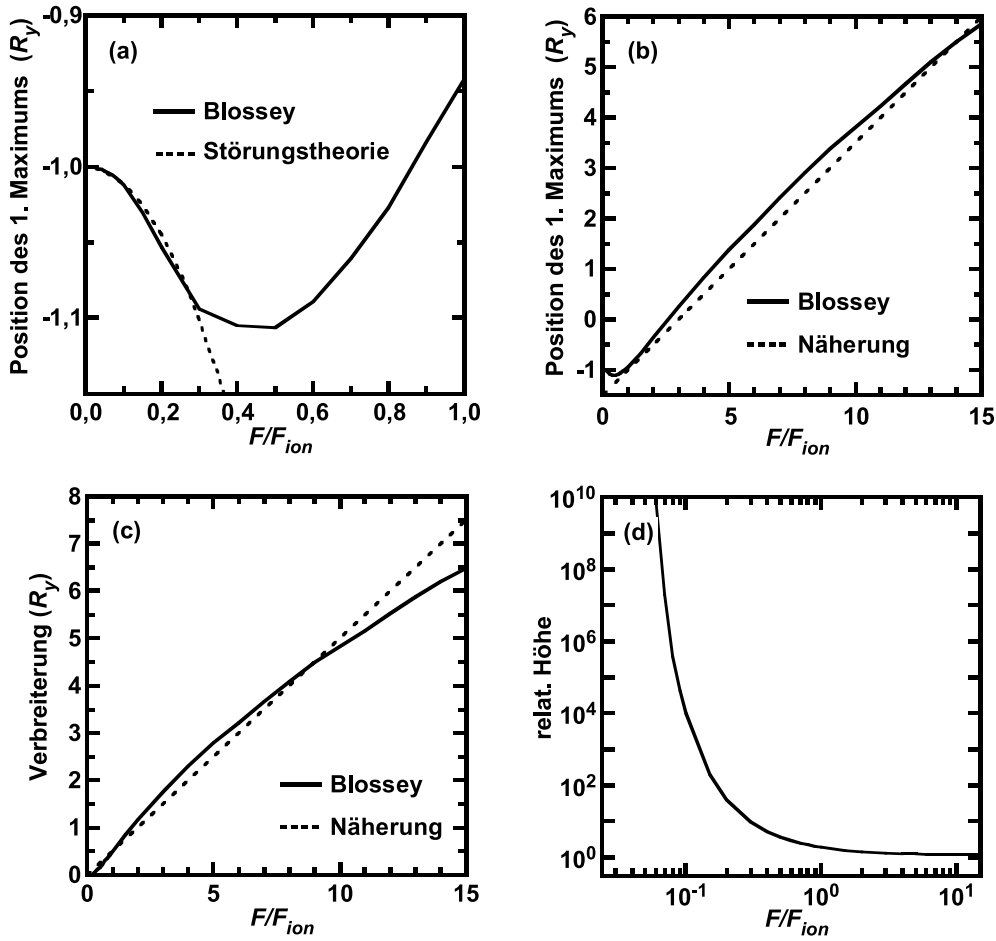


Abb. 3.9: (a) und (b) Verschiebung des ersten Maximums des Imaginärteils der dielektrischen Funktion. Zum Vergleich sind in (a) das störungstheoretische Ergebnis für niedrige Feldstärken und in (b) die lineare Näherungslösung für hohe Feldstärken eingezeichnet. (c) Verbreiterung des ersten Maximums. (d) Höhe des Maximums bezogen auf den Wert Elliots dielektrischer Funktion an der Bandkante.

und Dow bekräftigt, dass die $F^{2/3}$ -Abhängigkeit nur im „ultrastarken“ Grenzfall ($F/F_{ion} \gg 100$) erreicht wird [119].

In Abb. 3.9 (c) ist feldinduzierte Verbreiterung aufgetragen. Als Maß dient der Abstand zwischen \tilde{R}_y und der Energie, an welcher ε_2 unterhalb E_g auf die Hälfte des Maximums abgesunken ist. Näherungsweise lässt sich die feldinduzierte Verbreiterung $\tilde{\Gamma}_y$ durch

$$\tilde{\Gamma}_y(F) \sim \frac{R_y}{2} \frac{F}{F_{ion}} \quad (3.34)$$

beschreiben. Von dünnen Nitridschichten mit ihren F_{ion} deutlich übersteigenden Feldern, können in aller Regel unmöglich Exzitononenresonanzen detektiert werden. Beispielsweise beträgt $\tilde{\Gamma}_y$ für GaN bei $F = F_{\text{ion}} = 90 \text{ kV/cm}$ bereits die halbe Rydbergenergie von 12,5 meV.

Die Höhe des Maximums bei \tilde{R}_y ist in Abb. 3.9 (d) dargestellt. Die Höhe ist hier auf das Ergebnis von Gl. (3.19) bei $\hbar\omega = E_g$ bezogen. Es ist offensichtlich, dass mit steigender Feldstärke die Höhe abnehmen muss, wenn die Verbreiterung zunimmt und gleichzeitig die Zustände mit $i > 1$ ins Hochenergetische rücken, weil das Einprägen einer Feldstärke in den Kristall die Anzahl der elektronischen Zustände in erster Linie nur anders verteilt.

3.3.2 Galliumnitrid

Experimentelle Befunde

Der Wert der Ionisationsfeldstärke von GaN ist mit 90 kV/cm ca. zwanzig Mal größer als der des sehr intensiv untersuchten GaAs [120–125]. Unter Beimischung von Al steigt dieser Wert nach Gl. (3.20) und (3.18) sogar noch an. Deshalb sollten die oben genannten Besonderheiten bei GaN und AlGaN besonders gut beobachtbar sein. Die Absorptionmessungen von Trautman *et al.* [126, 127] und Shokhovets *et al.* [128] haben für GaN bei hohen Feldestärken sowohl die feldinduzierte Verbreiterung als auch die damit verbundene Verringerung der Stärke des Exzitonengrundzustandes gezeigt. Oberhofer *et al.* [129] haben diesen Effekt sogar in einem GaN-Bauelement zur Lichtmodulation genutzt. Binet *et al.* [130] fanden eine Verschiebung der Exzitononenresonanz im Absorptionskoeffizienten $\alpha(\hbar\omega, F)$ in hoch reinen GaN-Schichten. Ihre Experimente waren jedoch auf niedrige Felder ($F < 0,4F_{\text{ion}}$) beschränkt, welche zudem auch noch lateral zur Oberfläche gerichtet waren. Diese Untersuchung im Jahre 1996 war die erste quantitative ihrer Art. In den Experimenten wurden die Feldstärken so gewählt, dass ein direkter Vergleich mit den in [40] abgebildeten Kurven möglich war. Für die quantitative Auswertung der Spektren wurde im Wesentlichen angenommen, dass $\alpha(\hbar\omega, F) \propto \varepsilon_2(\hbar\omega, F)$ gilt. Beide Größen sind jedoch nach Gl. (3.6) miteinander verbunden, und speziell in der Nähe der Bandkante kann nicht angenommen werden, dass $n(\hbar\omega)$ konstant ist. Auch wurde später klar, dass das vertikal zur Oberfläche gerichtete Feld derartiger Proben aufgrund von Polarisations- und Grenzflächenladungen [2, 31] wesentlich größer als F_{ion} ist und damit gegenüber dem lateralen Feld überwiegt, wodurch die damalige quantitative Interpretation fragwürdig erscheint.

Mit Abb. 3.10 werden die oben beschriebenen Effekte erläutert. Sie zeigt Photostrom- (PC-)Spektren der Probe MD1310 für verschiedene Felder im Bereich

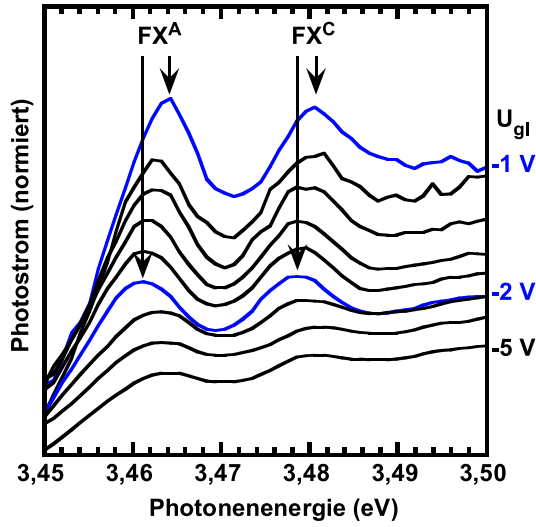


Abb. 3.10: Photostromspektren der Probe MD1310 in der Nähe der GaN-Bandkante bei $T = 5\text{ K}$ und angelegten Spannungen von $-1,0; -1,2; -1,4; -1,6; -1,8; -2,0; -3,0; -4,0$ und $-5,0\text{ V}$. Die Kurven wurden normiert und vertikal verschoben.

der GaN-Bandkante.⁶ Die Feldstärke wurde dabei durch das Anlegen einer Spannungen variiert. $|F| \ll F_{\text{ion}}$ gilt für $U_{\text{gl}} = -1\text{ V}$. Mit steigender Rückwärtsspannung wird eine Raumladungszone (RLZ) in der GaN-Schicht aufgebaut, womit $|F|$ ansteigt (siehe Abschnitt 6.2). Für kleine Felder sind die Resonanzen der GaN-Exzitonzustände FX^{A} und FX^{C} relativ scharf, wobei die FX^{A} -Resonanz am stärksten ist. Mit der Feldstärkerhöhung verbreitern sich die Resonanzen, ihre Höhen nehmen ab und das Höhenverhältnis zwischen FX^{A} und FX^{C} kehrt sich um weiterhin steigt das PC-Signal im Niederenergetischen an. Von $U_{\text{gl}} = -1\text{ V}$ bis zu -2 V folgen FX^{A} und FX^{C} der klassischen Starkverschiebung, d.h. ihre Übergangsenergien vermindern sich in guter Übereinstimmung mit Abb. 3.9(a). Unterhalb von -2 V beginnt eine monotone Blauverschiebung. Nach Abb. 3.9(b) erwartet man sie mit größerer Stärke, jedoch soll beachtet werden, dass erstens der Photostrom nicht mit ε_2 identisch ist, er steht in engerer Beziehung zu α .⁷ α besitzt eine leicht andere F -Abhängigkeit der Maximumsposition. Zweitens kann nicht davon ausgegangen werden, dass der Photostrom allein aus dem Bereich mit dem größten Feld in der RLZ stammt. Vielmehr ist hier der Feldgradient zu berücksichtigen. Binet *et al.* [130] beobachteten in diesem Zusammenhang große Differenzen zwischen PC- und optischen Absorptionsspektren. Die Autoren wiesen darauf hin, dass das Exziton, das in einem ersten Schritt durch die Absorption eines Photons erzeugt wird, durch das Feld der „exzitonenfreien Randschicht“ oder

⁶Details zu der Probe und dem experimentellen Aufbau findet man in Kap. 5.

⁷Die Beziehung zwischen beiden Größen ist in Gl. (3.6) angegeben.

thermisch in freie Ladungsträger zerlegt werden muss, um schlussendlich zum Photostrom beizutragen.

Berechnung

Wegen der am Anfang dieses Kapitels getroffenen Annahmen zur Berechnung der DF werden die drei Valenzbänder separat behandelt und ihre jeweiligen Beiträge am Schluss addiert. Dabei wird die Mischung der Valenzbandzustände außerhalb des Zentrums der Brillouinzone [105] vernachlässigt. Die Austauschwechselwirkung wird ebenfalls vernachlässigt. Sie wurde für GaN mit $0,15R_y$ abgeschätzt [93]. Nach den Untersuchungen von Shokhovets *et al.* [131] beträgt die Vergrößerung der effektiven Masse nur 7% bei 300 meV oberhalb der GaN-Bandlücke. Diese kleine Nichtparabolizität erlaubt es, zur Darstellung des prinzipiellen Verhaltens die Berechnungen in der Näherung parabolischer Bänder (Blosseys Modell) durchzuführen. Nach der Berechnung des Imaginärteils der komplexen DF wird ihr Realteil durch die Kramers-Kronig-Beziehung gewonnen.

In dieser Arbeit werden die Eigenschaften der ordentlichen dielektrischen Tensorkomponente, d.h. die lineare optische Antwort auf senkrecht zur optischen (*c*-)Achse polarisiertes Licht, diskutiert. Der Feldeinfluss auf die außerordentliche Komponente wäre analog zu berechnen, wobei aber qualitativ das gleiche Verhalten beobachtet wird.

Die folgenden Überlegungen für die DF von GaN beziehen sich ohne Einschränkung der Allgemeinheit auf zugverspanntes Material, wie es typischerweise durch die Abscheidung auf Silizium- oder Siliziumkarbidsubstraten entsteht. Konkret wurden die Berechnungen so durchgeführt, dass ein Vergleich mit den experimentellen Untersuchungen an AlGaIn/GaN-Heterostrukturen auf Si(111)-Substrat bei $T = 5\text{ K}$ möglich ist (siehe Abschnitt 6.5). Für experimentelle und theoretische Untersuchungen von Exzitonübergängen in GaN ist Zugverspannung vorteilhaft, da die FX^{A} -Resonanz nicht von der nahe gelegenen FX^{B} -Resonanz überlagert wird (siehe Abschnitt 2.5). Zusätzlich erleichtert die vergrößerte Aufspaltung zwischen FX^{A} und FX^{C} die Zuordnung der Resonanzen.

Die errechneten ε_2 wurden entsprechend der probenspezifischen biaxialen Verspannung verschoben [90] und mit einem Gaußprofil gefaltet. Danach wurden die individuellen Beiträge gemäß ihrer quadrierter Matrixelemente $|M_j|^2$ ($j = \text{A, B, C}$) für senkrecht zu optischen (*c*-)Achse polarisiertes Licht (ordentlicher Strahl) addiert. Die Matrixelemente gehorchen einer Summenregel [132] und sind durch

$$|M_j|^2 = f_j \frac{m_0}{6} E_{p\perp} \quad (3.35)$$

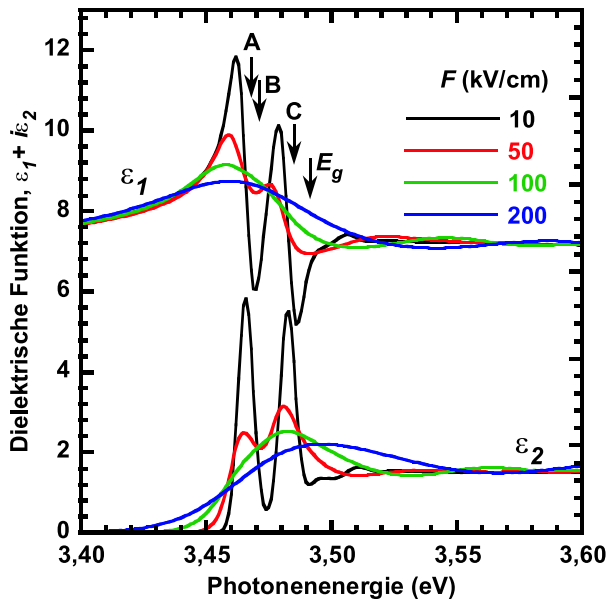


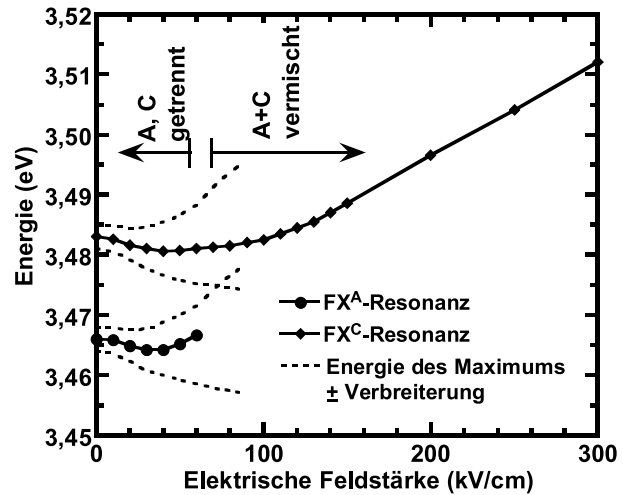
Abb. 3.11: Dielektrische Funktion ($\varepsilon_1 + i\varepsilon_2$) von GaN unter biaxialer Zugverspannung bei einer Temperatur von $T = 5$ K und verschiedenen elektrischen Feldstärken. Die feldfreien Übergangsenergien von FX^A , FX^B und FX^C und die Bandkantenenergie sind durch Pfeile markiert.

gegeben, wobei f_j der Anteil eines Valenz- Leitungsbandpaares und $E_{p\perp}$ der Kane'sche Bandstrukturparameter in Energieeinheiten ist. Die richtige Wahl des Betrages von $E_{p\perp}$ gewährleistet einen stetigen Übergang oberhalb E_g an die ellipsometrisch bestimmten $\varepsilon_2(\hbar\omega)$ -Daten aus [95].⁸ Der hier gefundene Wert von $E_{p\perp} = 20,6$ eV ist in sehr guter Übereinstimmung zu der Angabe aus [131], was das Modell für GaN quantitativ bestätigt. Obwohl das besondere Interesse in der Untersuchung der DF des bandkantennahen Bereiches liegt, war es zur korrekten Beschreibung von ε_1 mittels der Kramers-Kronig-Transformation unumgänglich, die ellipsometrisch bestimmten hochenergetischen kritischen Punkten der Bandstruktur aus [95] einzubeziehen. Die Beiträge im niederenergetischen Spektralbereich, u.a. von den optischen Phononen, wurden analog zu Gl. (3.13) additiv durch die Größe ε_∞ berücksichtigt. Die verwendeten Simulationsparameter sind noch einmal im Anhang A zusammengefasst.

Real- und Imaginärteile der DFs von GaN bei verschiedenen Feldstärken sind in Abb. 3.11 dargestellt. Die numerischen Parameter, mit denen sie berechnet wurden, sind in Tab. A.1 des Anhangs angegeben. Für niedrige Felder ($F = 10$ und 50 kV/cm) werden zwei deutlich getrennte FX^A - und FX^C -Resonanzen aufgelöst. Wird F erhöht, wechselt das Höhenverhältnis der beiden Resonanzen, wie es auch im Experiment beobachtet wurde. Außerdem verschmelzen beide Resonanzen und verschieben zu höheren Energien. Obwohl die FX^A -Resonanz bei kleinen Feldern

⁸Diese SE-Daten wurden um blauverschoben, um die Erhöhung von E_g bei $T = 5$ K und die Zugverspannung der Proben zu berücksichtigen.

Abb. 3.12: Energie der jeweiligen Maxima von FX^A und FX^C in ε_2 . Die unterbrochenen Linien kennzeichnen die Verbreiterungen der Maxima.



am stärksten ist, wird bei $F = 200 \text{ kV/cm}$ nur noch eine Struktur in der Nähe der ursprünglichen FX^C -Resonanz sichtbar. Unterhalb von E_g erscheint im ε_2 ein langer Absorptionsausläufer. In diesem Spektralbereich ist die Veränderung von ε_1 mit F relativ klein.

In Abb. 3.12 sind die feldinduzierten Verschiebungen der Maxima basierend auf den Berechnungen von ε_2 dargestellt. Wie in Abschnitt 3.3.1 tritt auch hier zuerst eine Rot-, bei ca. 40 kV/cm eine Blauverschiebung beider Resonanzen auf. Um die ebenfalls im Diagramm gezeigten Verbreiterungen der Maxima zu bestimmen, wurden gaußverbreiterte Elliott-Funktionen an die entsprechenden ε_2 -Kurven angepasst. Wird F auf über 60 kV/cm erhöht, lassen sich die Resonanzen von FX^A und FX^C nicht mehr trennen. Dieser Effekt wird allein durch das Vorhandensein elektrischer Felder verursacht, d.h. die Verbreiterung der Resonanzen lässt nur sehr bedingt Rückschlüsse auf die Kristallqualität zu.

Die Vermischung von diskreten und Kontinuumszuständen mit größer werdendem F vergrößert den Absorptionskoeffizienten $\alpha(\hbar\omega)$ unterhalb E_g , was in Abb. 3.13 dargestellt ist. Wie auch vom Einteilchenmodell folgt $\alpha(\propto \varepsilon_2)$ für $F > 200 \text{ kV/cm}$ der Abhängigkeit aus Gl. (3.15) (Franz-Keldysh-Effekt). Dies steht im Gegensatz zur theoretisch gefundenen linearen Abhängigkeit von $\ln(\alpha)$ von der Photonenenergie für Exzitonen bei sehr niedrigen Feldern ($F/F_{\text{ion}} \ll 1$) [40]. Übereinstimmung mit [40] herrscht jedoch darüber, dass $\alpha(\hbar\omega)$ unterhalb von E_g um mehrere Größenordnungen stärker ist als im Einteilchenmodell. Besondere Bedeutung hat dieser Effekt für dünne GaN- oder AlGaIn-Filme in Bauelementen. In ihnen treten durch die großen spontanen und piezoelektrischen Polarisationsladungen Felder von mehr als $20F_{\text{ion}}$ auf [5]. Der Einfluss großer Felder auf die optischen Eigenschaften dominiert deshalb gegenüber anderen Verbreite-

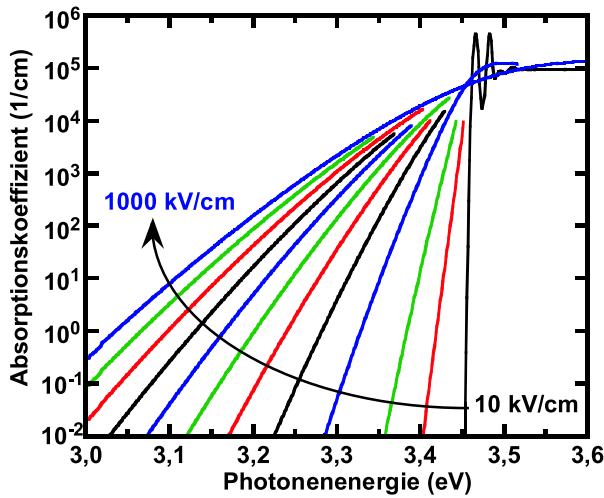


Abb. 3.13: Absorptionskoeffizient von GaN in der Nähe und unterhalb der Bandkante (3,491 eV) für elektrische Feldstärken von 10, 50, 100, 200, 300, 400, 500, 600, 700, 800, 900 und 1000 kV/cm.

rungsmechanismen. Demzufolge kann man nicht ohne Weiteres vom experimentell ermittelten Anstieg von $\alpha(\hbar\omega)$ unterhalb E_g auf die Kristallqualität bzw. auf die Konzentration ionisierter Störstellen rückschließen, wie es für direkte Halbleiter mit flachen Bändern z.B. von Dow und Redfield vorgeschlagen wurde [41].

3.3.3 Aluminiumgalliumnitrid

Wie Abschnitt 2.5.1 beschrieben wurde, kann davon ausgegangen werden, dass sich die Reihenfolge der Valenzbänder für die AlGaN-Legierungen schon bei sehr niedrigen Al-Gehalten vertauscht. In diesem Abschnitt wird beispielhaft ein Al-Gehalt von $x = 0,15$ angenommen. Zur Simulation der DF wird eine lineare Abhängigkeit des Kristallfeldparameters vom Al-Gehalt vorausgesetzt; man erhält $\Delta_{cr} = -26$ meV (siehe Abschnitt 2.5). Da Δ_{cr} negativ ist, hat das höchste Valenzband zwar Γ_7 -Symmetrie (B-Übergang) (vgl. Abb. 2.7) aber die relative Oszillatorstärke f_B [siehe Gl. (3.35)] des durch ordentlich polarisiertes Licht induzierten Interbandübergangs ist schon ohne Verspannung sehr klein [siehe Abb. 2.8(a)]. Weil hier von einem dünnen Film in einer Heterostruktur auf Siliziumsubstrat ausgegangen wird, reduziert sich dieser Wert wegen der vorherrschenden biaxialen Zugverspannung nochmals. Deshalb werden $f_B = 0$ und $f_A = f_C = 1$ gesetzt. Die Aufspaltung der zugehörigen Valenzbänder beträgt nur $\Delta_{AC} = 14$ meV. Dieser Wert wird vernachlässigt, weil er viel kleiner ist als die Verbreiterung bei den typischen Feldstärken von mehreren F_{ion} [vgl. Gl. (3.34)]. Die Berechnung der F -abhängigen DF beschränkt sich demnach auf einen Oszillator mit doppelter Stärke. Zu den Simulationsparametern siehe Anhang A.

Abb. 3.14: Experimenteller und theoretischer Verlauf des Imaginärteils der DF eines dünnen $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}$ -Films, in dem ein starkes elektrisches Feld (270 kV/cm) herrscht.

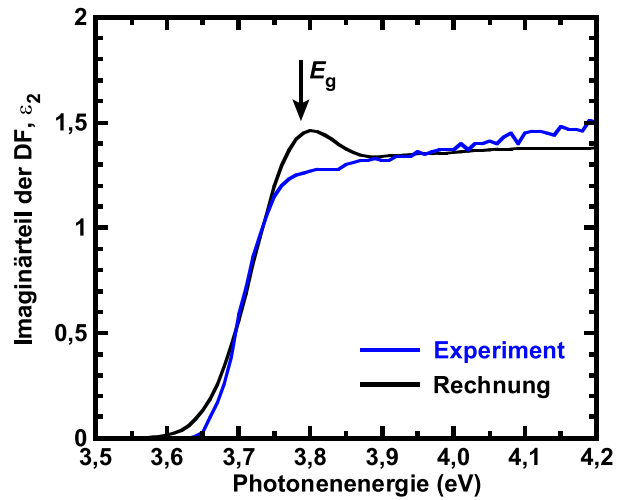


Abb. 3.14 zeigt mittels SE bestimmten Verlauf von ϵ_2 einer 22 nm dünnen $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}$ -Schicht bei Raumtemperatur zusammen mit den Ergebnissen der Berechnung. Es wurde eine Feldstärke von 270 kV/cm vorausgesetzt, die bei Raumtemperatur in diesem Film vorhanden ist (siehe Abschnitt 7.1). Weitere Eingangsparameter sind in Tab. A.1 angegeben. Die Abweichungen oberhalb $4,0\text{ eV}$ sind auf die Nichtberücksichtigung der hochenergetischen kritischen Punkte der Bandstruktur [16] zurückzuführen. Im Bereich der Bandkante bleibt zu klären, warum im Experiment keine Überhöhung beobachtet wird.

4 Die Signalgröße der Elektro- und Photoreflexion

Die Elektroreflexion (ER) ist eine Form der Modulationsspektroskopie, bei der die Änderung der Reflektivität als Reaktion auf eine äußere Störung, in diesem Fall auf ein modulierte elektrisches Feld, untersucht wird. Andere Arten der Modulationsspektroskopie sind die Piezo- und die Thermoreflexion, bei denen die äußere Störung (Druck bzw. Temperaturänderung) im Gegensatz zur ER, gitterperiodisch sind. Ein Überblick wird in [133] gegeben.

Die Photoreflexions- (PR-)Spektroskopie kann als Unterart der ER-Spektroskopie angesehen werden. Der Unterschied besteht nur darin, dass das elektrische Feld nicht durch eine äußere Spannung moduliert wird, sondern zeitlich periodisch durch photogenerierte Ladungsträger abgeschirmt wird (Erzeugung durch einen gehopperten Laserstrahl).

In diesem Kapitel wird nach der allgemeinen Formulierung des ER-Signals (Abschnitt 4.1) der weit verbreitete Ansatz zur Beschreibung des ER-Signals mittels der Seraphinkoeffizienten (Abschnitt 4.2) dargestellt. Es wird die Frage diskutiert, inwieweit die gängigen vereinfachenden Annahmen zulässig sind, und unter welchen Bedingungen man der Komplexität von ER-Spektren nur durch die allgemeine Formulierung gerecht werden kann. In Abschnitt 4.3 wird auf die Aspnes'sche Näherung zur Bestimmung der Feldstärke in Halbleiterschichten aus den FKO eingegangen.

4.1 Allgemeine Formulierung

Wir betrachten für senkrechten Lichteinfall die Reflektivität R an der Grenzfläche zweier halbbunendlicher Medien, wobei das EinfallsmEDIUM als nichtabsorbierend mit der Brechzahl $\bar{n}_A = 1$ angenommen wird. Mit der komplexen Brechzahl des Festkörpers \bar{n} erhält man

$$R = \left| \frac{\bar{n} - 1}{\bar{n} + 1} \right|^2. \quad (4.1)$$

Setzt man für \bar{n} die in Abschnitt 3.3.2 berechnete feldabhängige DF von GaN an, so erhält man Reflexionsspektren, wie sie in Abb. 4.1(a) gezeigt sind. Nur

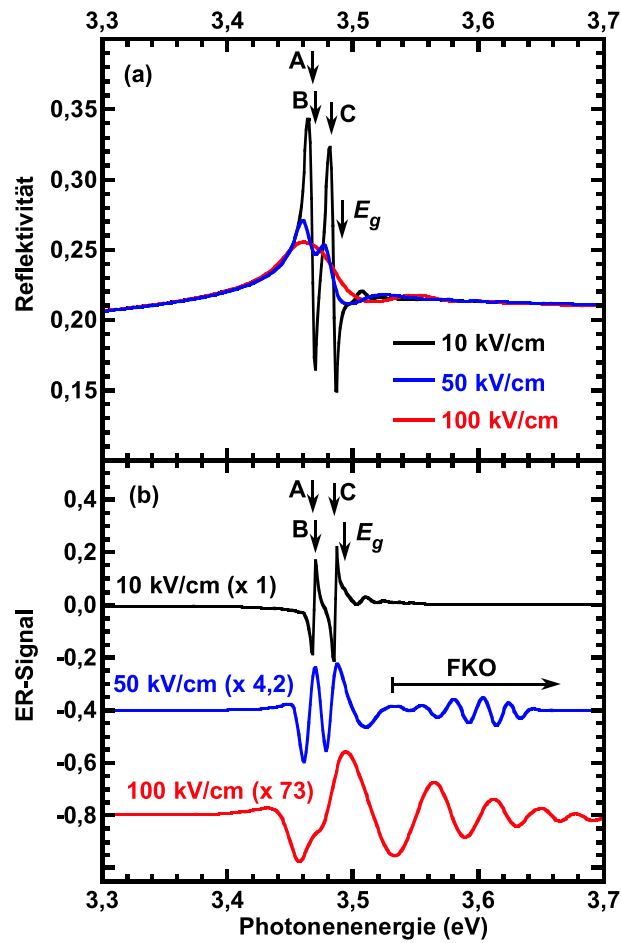


Abb. 4.1: Berechnete (a) Reflektivitäts- und (b) Elektroreflexionsspektren von GaN für die Feldstärken $F = 10, 50$ und 100 kV/cm . In Abb. (b) beträgt die Feldstärkemodulation jeweils $\pm 2 \text{ kV/cm}$; die Kurven wurden zur besseren Übersichtlichkeit vertikal verschoben.

bei Feldstärken deutlich unter $F_{\text{ion}} = 90 \text{ kV/cm}$ treten die Merkmale der Exzitonengrundzustände hervor. Bereits bei 100 kV/cm erscheint nur noch ein breites Maximum gefolgt von FKO oberhalb E_g .

Die Messgröße der ER ist definiert als feldinduzierte Änderung der Reflektivität ΔR bezogen auf die Reflektivität selbst:

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{R(F_h) - R(F_n)}{\frac{1}{2}[R(F_h) + R(F_n)]}. \quad (4.2)$$

Die Modulation findet zwischen den beiden Feldstärken F_h und F_n mit $F_h > F_n$ statt. In vielen theoretischen Arbeiten wird $F_n = 0$ angesetzt, d.h. die Modulation soll zwischen dem Flachbandfall und F_h erfolgen. Dies ist jedoch in den meisten Fällen nicht experimentell realisierbar [38]. Deshalb wird „differentiell“ moduliert, wobei einem statischen Feld eine kleine Änderung überlagert wird [134, 135]. Ist die hervorgerufene Änderung klein gegen R , kann man auf die Mittelwertbildung im Nenner von Gl. (4.2) verzichten.¹

Zur Simulation von ER-Spektren werden die berechneten feldstärkeabhängigen Reflektivitäten in Gl. (4.2) eingesetzt. Abbildung 4.1(b) stellt $\Delta R/R$ mit einer Feldstärk modulation von jeweils $F_h = F + 2 \text{ kV/cm}$ und $F_n = F - 2 \text{ kV/cm}$ dar. Vergleicht man die $\Delta R/R$ - mit den jeweiligen R -Spektren stellt man fest, dass auch sie die Merkmale der Exzitonen unterhalb E_g enthalten, die „Schärfe“ der Exzitonsignale ist aber höher. Darüber hinaus sind in den ER-Spektren mit $F = 50$ und 100 kV/cm oberhalb der Bandkante FKO vorhanden, deren Abstand mit zunehmendem F steigt. Das Spektrum mit $F = 50 \text{ kV/cm}$ weist eine Schwebung in den FKO auf, welche aufgrund der Modulation zwischen F_h und F_n entsteht.

4.2 Seraphinkoeffizienten

Im Gegensatz zu der oben beschriebenen generellen Formulierung des ER-Signals geht man meist zu einer Faktorisierung von $\Delta R/R$ über:

$$\Delta R/R = \alpha_S \Delta \varepsilon_1 + \beta_S \Delta \varepsilon_2 = \Re(\bar{C}_S \Delta \bar{\varepsilon}), \quad (4.3)$$

wobei die Seraphinkoeffizienten α_S , β_S und \bar{C}_S durch

$$\alpha_S = \frac{\partial \ln(R)}{\partial \varepsilon_1} \quad , \quad \beta_S = \frac{\partial \ln(R)}{\partial \varepsilon_2} \quad \text{und} \quad \bar{C}_S = \alpha_S - i\beta_S \quad (4.4)$$

definiert sind [136, 137] und $\Delta \bar{\varepsilon} = \Delta \varepsilon_1 + i\Delta \varepsilon_2$ die Änderung der DF ist. Man antizipiert mit diesem Ansatz, dass die Seraphinkoeffizienten konstant sind und man $\Delta R/R$ nur über $\Delta \bar{\varepsilon}$ zu diskutieren braucht. Die Seraphinkoeffizienten hängen von den komplexen Brechzahlen bzw. den komplexen DFs des Halbleiters und des umgebenden Mediums ab. Es gilt:

$$\bar{C}_S = \frac{2\bar{n}_A}{\bar{n}(\bar{\varepsilon} - \bar{\varepsilon}_A)}. \quad (4.5)$$

¹In der Praxis liegt $\Delta R/R$ unter 10^{-2} .

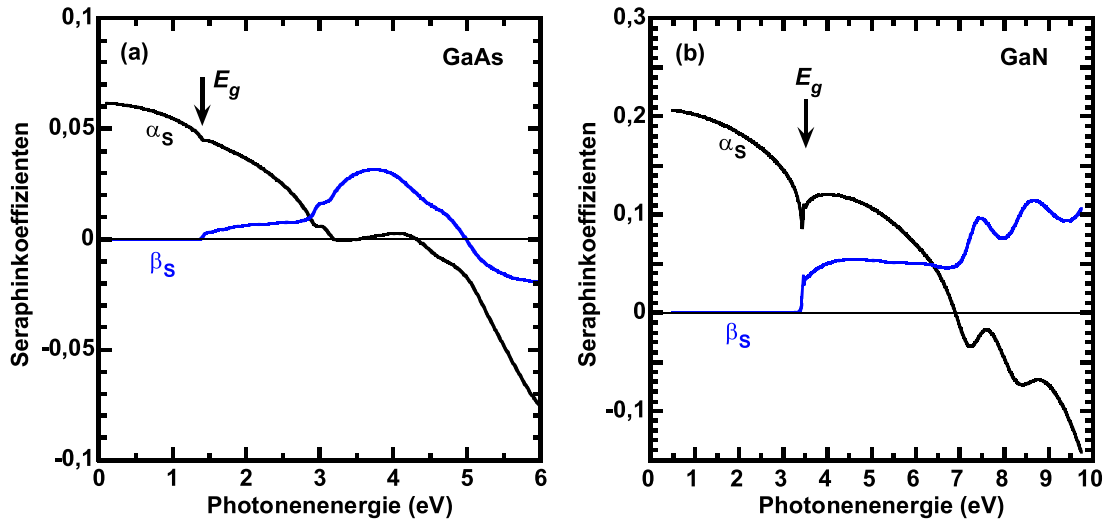


Abb. 4.2: Spektrale Verläufe der Seraphinkoeffizienten α_S und β_S von GaAs (a) und GaN (b) bei Raumtemperatur.

Dieser Darstellung von $\Delta R/R$ liegt eine erste, stark vereinfachende Annahme zugrunde: R und nach Gl. (4.4) auch \bar{C}_S sind unabhängig von F . Zweitens ist die Faktorisierung in Gl. (4.3) nur sinnvoll, wenn angenommen werden kann, dass \bar{C}_S zumindest in einem markanten Bereich des Spektrums unabhängig von $\hbar\omega$ ist. Diese Vorgehensweise entwickelte sich aus der Untersuchung von Halbleitern mit vergleichsweise kleiner Bandlücke wie Si, Ge oder GaAs. Unter Verwendung der bei Raumtemperatur experimentell bestimmten DF von GaAs ergeben sich die in Abb. 4.2(a) dargestellten spektralen Verläufe von α_S und β_S . Zwar verändern sich die Beiträge von $\Delta\varepsilon_1$ und $\Delta\varepsilon_2$ zum ER-Signal, doch ist α_S im Bereich einiger 100 meV ober- und unterhalb der Bandkante nur schwach energieabhängig. Dies ist auf den relativ kleinen Einfluss der Exzitonen auf die DF in diesen Halbleitern zurückzuführen, welche wegen der geringen Werte von R_y (für GaAs ca. 5 meV) bei Raumtemperatur thermisch ionisiert sind. Ein elektrisches Feld verändert α_S deshalb auch kaum. β_S ist gegenüber α_S vernachlässigbar klein, was an dem im Vergleich zu ε_2 großen ε_1 liegt.

Bei GaN ist das Verhältnis von ε_1 zu ε_2 geringer. Deshalb ist in der Nähe der Bandkante im Gegensatz zum GaAs auch β_S von Bedeutung. Die berechneten Verläufe von α_S und β_S sind in Abb. 4.2(b) dargestellt. Die Seraphinkoeffizienten sind in unmittelbarer Nähe zu E_g nicht konstant. Zur $\hbar\omega$ -Abhängigkeit kommt noch die F -Abhängigkeit hinzu, die bei niedrigen Temperaturen aufgrund der geringen Verbreiterungen besonders stark ist. Abbildung 4.3(a) zeigt die starke F -Abhängigkeit der Seraphinkoeffizienten für GaN bei $T = 5$ K.

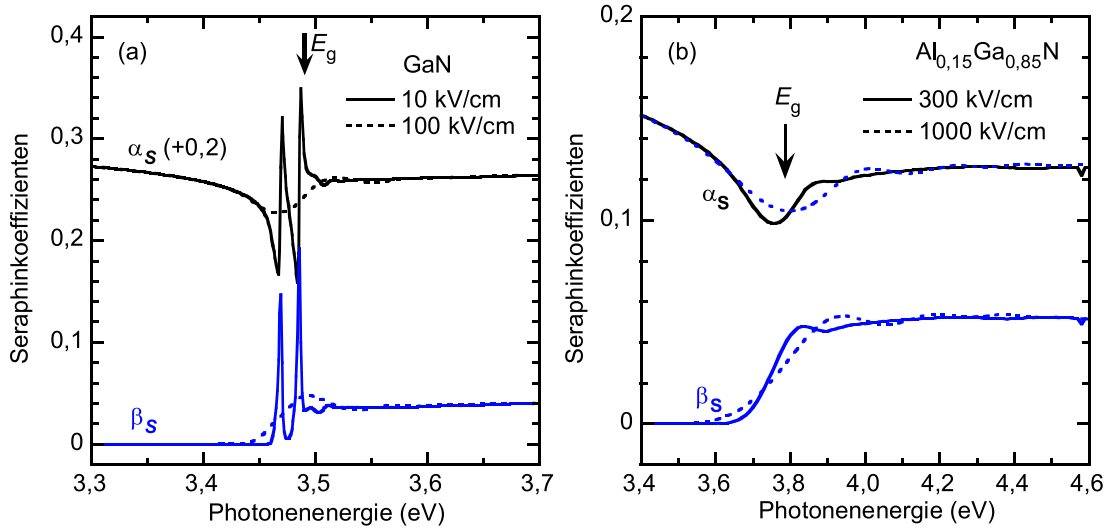


Abb. 4.3: Spektrale Verläufe der Seraphinkoeffizienten α_S und β_S von GaN (a) und $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}$ (b) bei $T = 5\text{ K}$ in der Nähe der Bandkante. Es liegen die in den Abschnitten 3.3.2 und 3.3.3 berechneten feldstärkeabhängigen dielektrischen Funktionen zugrunde.

Für die unten beschriebenen Experimente ist der Spektralbereich oberhalb der Bandkante der dünnen AlGaN-Deckschichten von besonderer Bedeutung, da die dort erscheinenden FKO zur Feldstärkebestimmung herangezogen werden. Dazu ist zu überprüfen, ob die weit verbreitete und einfache Aspnes'sche asymptotische Näherung angewendet werden darf, d.h. ob \bar{C}_S nahezu konstant ist. Die Felder liegen hier typischerweise weit über F_{ion} . Abbildung 4.3(b) zeigt die Verläufe der Seraphinkoeffizienten für zwei F -Werte von $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}$. Aus den Kurven ist ersichtlich, dass die Seraphinkoeffizienten im Spektralbereich oberhalb von E_g zwar feldabhängig sind, ihre Absolutwerte jedoch kaum vom Feld beeinflusst werden.

Über die Anwendbarkeit von Seraphinkoeffizienten zur Beschreibung des ER-Signals von (Al)GaN kann man zwei Schlussfolgerungen ableiten:

1. Es ist in unmittelbarer Nähe zur Bandkante sinnvoller, die allgemeine Formulierung nach Gl. 4.2 statt der abgeleiteten nach Gl. 4.3 zu verwenden, da in diesem Spektralbereich α_S und β_S sehr stark variieren.
2. Oberhalb E_g dürfen die Seraphinkoeffizienten bis zu einigen 100 meV als konstant angesehen werden. Dies ist eine Voraussetzung für Aspnes' asymptotische Näherung zur Beschreibung der FKO in ER-Spektren.

4.3 Feldstärkebestimmung

Mit den im Abschnitt 3.3 dargestellten DF-Modellen lässt sich $\Delta R/R$ in der Nähe der Bandkante beschreiben. Aus den gemessenen ER-Spektren kann man im Prinzip die Parameter E_g, μ, F und Γ mit Hilfe einer vollständigen numerischen Anpassung bestimmen. Das ist jedoch mit einem sehr hohen Aufwand an Rechenzeit verbunden. Es ist einfacher, sich auf den Bereich der FKO zu beschränken, deren Abstand, wie in Abb. 4.1 gezeigt wurde, charakteristisch für die jeweilige Feldstärke ist. Aspnes [38, 39] leitete für Interbandübergänge in diesem Spektralbereich aus einer asymptotischen Näherung der Gl. (3.13) den Ausdruck

$$\frac{\Delta R}{R} \sim \frac{1}{(\hbar\omega)^2(\hbar\omega - E_g)} \exp \left[-\frac{2\Gamma(\hbar\omega - E_g)^{1/2}}{(\hbar\theta)^{3/2}} \right] \cos \left[\frac{4}{3} \left(\frac{\hbar\omega - E_g}{\hbar\theta} \right)^{3/2} + \phi \right] \quad (4.6)$$

ab, wobei der Phasenwinkel ϕ von der Elektron-Loch-Wechselwirkung, der Dimension des kritischen Punktes, der Modulationsfeldstärke und den Streuprozessen abhängt [38]. Diese Näherung ist für den Bereich $\hbar\omega - E_g \geq 2\hbar\theta$, d.h. ab dem zweiten Extremum oberhalb E_g hinreichend gut. Man kann nun die vollständige Gl. (4.6) an gemessene ER-Spektren anpassen bzw. nur die Positionen der Extrema E_ν auswerten, welche auftreten, wenn das Argument des Kosinus Vielfache von π erreicht. Die Darstellung von $(E_\nu - E_g)^{3/2}$ über dem Index des Extremums ν ergibt eine Gerade mit dem Anstieg

$$S = \frac{3\pi}{4} \hbar\theta^{3/2} = \frac{3\pi}{4} \frac{\hbar e |F_{\text{asy}}|}{(2\mu)^{1/2}}. \quad (4.7)$$

Man beachte, dass diese Gleichung unter Vernachlässigung der Coulomb-Wechselwirkung hergeleitet wurde.

Mit den berechneten Spektren, welche die Coulomb-Wechselwirkung enthalten, wird die Abschätzung der Genauigkeit der F -Bestimmung nach der Aspnes'schen Methode zur Analyse der FKO möglich. Die Auftragung gemäß Gl. (4.7) ist beispielhaft in Abb. 4.4 für den Spektralbereich um die $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}$ -Bandkante der Probe MD1310 (Beschreibung des Probenaufbaus im nächsten Kapitel) dargestellt. Das kleine Bild zeigt das zugehörige experimentelle Spektrum. Der Anstieg der experimentellen Daten ergibt ein F_{asy} von $641 \pm 7 \text{ kV/cm}$, während in der Simulation 637 ± 3 ermittelt wurden. Ähnliche Untersuchungen wurden für weitere Feldstärkewerte durchgeführt. Dabei wurden die FKO-Extrema aus numerisch berechneten Spektren nach der Aspnes'schen Methode analysiert. Tabelle 4.1 fasst die Ergebnisse zusammen. Für die nominell vorgegebenen Feldstärken von $F_{\text{nom}} = 900$ und 1200 kV/cm weichen die nach Gl. (4.7) ermittelten Feldstärken

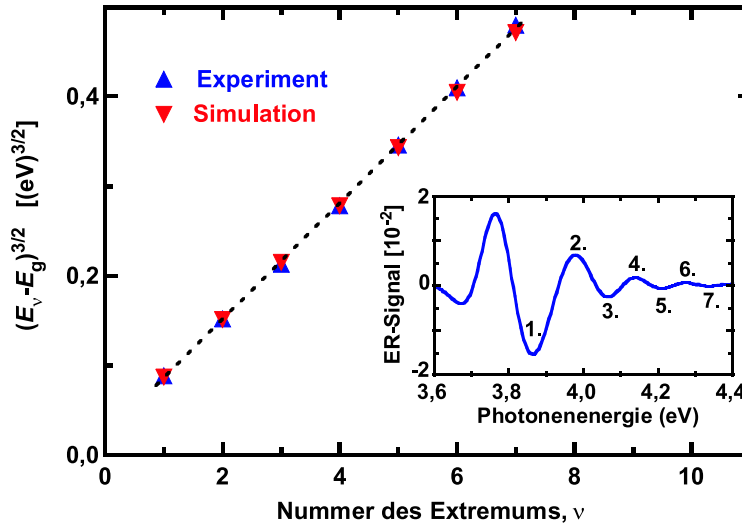


Abb. 4.4: Vergleich zwischen experimentell und theoretisch bestimmten Positionen der FKO-Extrema E_ν über der Nummer des Extremums der Probe MD1310 bei $T = 5\text{ K}$ und einer Gleichspannung von $U_{\text{gl}} = 0\text{ V}$. Das experimentelle Spektrum ist im kleinen Bild dargestellt.

um ca. 2% nach oben ab. Dow *et. al* [134] haben den Einfluss von Exzitonen auf die FKO untersucht und konnten im Vergleich zur Einteilchen-Franz-Keldysh-Theorie eine dort nicht näher quantifizierte Vergrößerung der Periode feststellen. Die hier ermittelten Abweichungen sind insbesondere im Hinblick auf die Messgenauigkeit im Experiment vernachlässigbar klein, sofern die Modulationsfeldstärke F_{mod} viel kleiner als F_{nom} ist. Ähnliche Schlussfolgerungen zog Fuhrmann aus der Simulation eines einfacheren Modells der feldabhängigen DF von GaN [138]. Gilt diese Bedingung nicht mehr, dann wird die Summenfeldstärke $F_{\text{nom}} + F_{\text{mod}}$ bestimmt, wie der Vergleich der letzten beiden Spalten von Tab. 4.1 zeigt. Dies ist für die Analyse von PR-Spektren von Bedeutung. Dort erhält man mit der Aspnes'schen Methode die ungestörte Schichtfeldstärke.

Tab. 4.1: Nach Gl. (4.7) ermittelte Feldstärken F_{asy} aus berechneten Spektren (Vorgabewerte: F_{nom}). In der letzten Spalte ist der Einfluss der Modulationsfeldstärke F_{mod} verdeutlicht. (Alle Werte in kV/cm .)

F_{nom}	1200	900	600	300	300
F_{mod}	± 45	± 45	± 45	± 45	± 100
F_{asy}	1221	920	624	342	402

5 Proben und Experimentelle Methoden

Aus den Zielen dieser Arbeit leiten sich die Probenstrukturen, die im ersten Abschnitt dieses Kapitels beschrieben werden. Der Einfluss statischer elektrischer Felder auf die DF und auf die Form der ER- und PR-Signale kann am besten an AlGa_{0,28}N/GaN-Heterostrukturen mit dünner AlGa_{0,28}N-Barrierenschicht, semitransparentem Schottky-Kontakt und einlegiertem ohmschen Kontakt untersucht werden. So lassen sich Felder von Null bis zu einigen MV/cm realisieren und die Eigenschaften der Heterogrenzfläche (ΔP , 2DEG-Dichte) untersuchen. Da ebenfalls die Wirkung reduzierender Gase auf die Oberflächen- und Grenzflächeneigenschaften, d.h. die Wirkungsweise von AlGa_{0,28}N/GaN-Wasserstoffsensoren, ein Thema dieser Arbeit ist, besteht ein Teil der semitransparenten Kontakte aus dem katalytisch wirkenden Pt. Abschnitt 5.2 gibt einen kurzen Einblick, welche Daten aus der SE und der Röntgenbeugung zur Vorcharakterisierung der Proben geeignet sind. Komplementär zur Röntgenbeugung diente die Photolumineszenzspektroskopie zur temperaturabhängigen Verfolgung der Schichtverspannung. Sie wird in Abschnitt 5.3 vorgestellt. Die hauptsächlich angewandte Methode war die ER-Spektroskopie. Photostrom- (PC)-Spektren gaben weitere Einblicke in die elektronischen Eigenschaften der Proben. Freie, unkontaktierte Oberflächen wurden in PR-Experimenten an unkontaktierten Probenbereichen untersucht. Die zugehörigen Messaufbauten werden in Abschnitt 5.4 beschrieben.

5.1 Probenaufbau

Die Probe BS210 von der Universität Braunschweig wurde zur Untersuchung der Eigenschaften der AlGa_{0,28}N/GaN-Heterogrenze, insbesondere der Polarisationsdiskontinuität und der 2DEG-Dichte, gezüchtet. Die Abbildungen 5.1(a) und (b) zeigen den schematischen Probenaufbau und das lichtmikroskopische Bild der Hall-Mesastruktur. Auf ein (0001)-orientiertes Saphirsubstrat wurden mit metallorganischer Gasphasenepitaxie (MOVPE) zuerst eine ca. 1,9 μm dicke GaN-Kanalschicht und dann eine $D = 23 \text{ nm}$ dicke Al_{0,28}Ga_{0,72}N-Barrierenschicht aufgewachsen. Der hohe Al-Gehalt führt zu einer großen Dichte des 2DEG, das sich

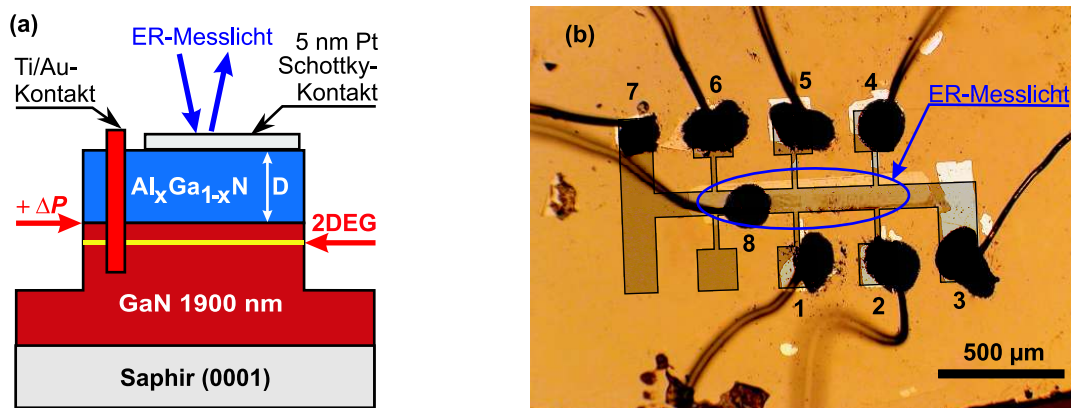


Abb. 5.1: (a) Schichtaufbau der Probe BS210 und (b) lichtmikroskopisches Bild der Hall-Mesastruktur. Der Hall-Balken wurde in (b) hervorgehoben. Für die ER-Messungen wurde das Messlicht auf den in (b) blau markierten Bereich fokussiert.

wie bei allen untersuchten metallpolaren AlGa_xN/GaN-Strukturen direkt unterhalb der Heterogrenzfläche befindet [31]. Ergänzend zu den ER-Messungen wurde die gatespannungsabhängige 2DEG-Dichte mit Magnetotransportmessungen an der TU München hochgenau ermittelt [139]. Dazu wurde die Probe mit reaktivem Ionenätzen als Hall-Balkenmesa strukturiert. Um die Mesastruktur herum wurden 40 nm Material abgetragen. Damit sind an diesen Stellen das AlGa_xN und auch das 2DEG entfernt worden. Für die ohmschen Kontakte wurden 70 nm Ti und 30 nm Al thermisch aufgedampft und anschließend bei 750°C einlegiert. Der 5 nm dünne semitransparente Pt-Schottkykontakt wurde durch Elektronenstrahlverdampfen aufgebracht. Wie bei allen anderen Proben, wurden die Kontakte lithographisch strukturiert.

Heterostrukturen auf Si(111)-Substrat wurden an der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg mit MOVPE gezüchtet. Bei diesem Substrat besteht die besondere technologische Schwierigkeit in der hohen mechanischen Belastung durch das Abkühlen nach dem Epitaxieprozess, welche häufig zu Versetzungen und Rissen in den epitaktischen Schichten führt. Gegenüber Saphir ist Silizium jedoch wesentlich preisgünstiger. Nitrid-Heterostrukturen könnten in Zukunft mit der konventionellen Siliziumelektronik verbunden werden, da auch Silizium in beliebigen Dotierungen erhältlich ist und von der Waferrückseite kontaktiert werden kann. Die Probenstruktur ist schematisch in Abb. 5.2(a) dargestellt. Die Proben bestehen aus einer 25 nm dicken Nukleationsschicht gefolgt von einer 400 nm dicken Fe-kompensierten GaN-Pufferschicht. Zur Relaxation der Verspannung wurde dann eine 10 nm dünne, bei niedrigen Temperaturen gewachsene AlN-Zwischenschicht eingefügt [140, 141]. Die eigentlich zu untersuchende Heterostruktur wird

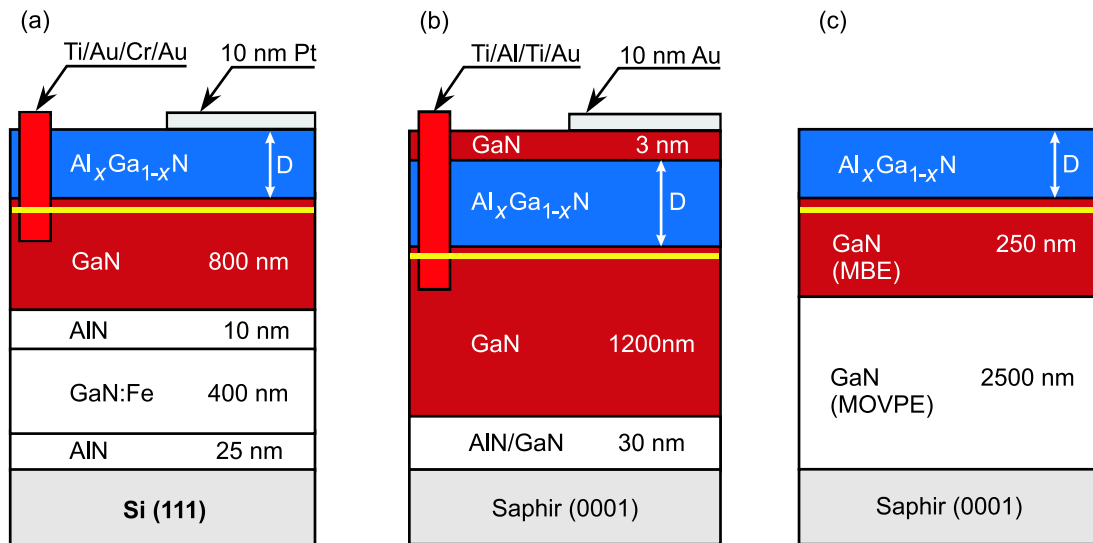


Abb. 5.2: Schematische Abbildung des Schichtaufbaus weiterer Proben. (a) stellt den Aufbau von MD1309, MD1310 und MD1311; (b) von 178, 199 und 275 und (c) von 072499B dar.

aus einer 800 nm dicken GaN- und einer $D = 22$ nm dicken $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ -Schicht gebildet (Al-Gehalte: siehe Tab. 5.1). Da diese metallpolaren Proben vor der Kontaktierung für einige Wochen in Luft lagerten, kann angenommen werden, dass sich eine natürliche Oxidschicht zwischen der AlGaN-Oberfläche und dem 10 nm dünnen Pt-Kontakt (Durchmesser: $680 \mu\text{m}$) gebildet hat [142]. Dies ist von Bedeutung, da an diesen Proben nicht nur die Polarisationsdiskontinuität für eine Reihe von $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ -kombinationen bestimmt und der Einfluss des inhomogenen elektrischen Feldes in der RLZ auf das ER-Signal untersucht wurde, sondern weil außerdem die Wirkung von Wasserstoff auf Pt-bedeckte Nitridoberflächen ermittelt wurde. Die Anwendungsidee sind Gassensoren. Wie Weidemann *et al.* [143] gezeigt haben, ist die Oxidzwischenschicht die Voraussetzung für die H_2 -Sensitivität. Des Weiteren verbessert die Oxidsschicht das Kontaktverhalten bezüglich der Leckstromdichte und der Schottkybarrierenhöhe [144]. Die ohmschen Kontakte bestehen aus Ti/Au/Cr/Au (Dicken jeweils 30, 150, 20, 250 nm) und wurden bei 800°C einlegiert.

Vom Fachgebiet Nanotechnologie der TU Ilmenau wurden zur Untersuchung der AlGaN/GaN-Heterogrenze drei ähnlich aufgebaute Heterostrukturen zur Verfügung gestellt. Die Probenstruktur ist in Abb. 5.2(b) dargestellt. Die Proben besitzen ähnliche Al-Gehalte in den Barrieren, sie wurden mit MOVPE auf ein (0001)-orientiertes Saphirsubstrat aufgewachsen. Für ein defektarmes Wachstum wurden zuerst AlN- bzw. GaN-Nukleationsschichten (ca. 30 nm) aufgebracht [145,

Tab. 5.1: Daten der untersuchten Proben. Die Dicken der Barrieren D wurden durch SE-Messungen und die Al-Gehalte (x) durch Röntgenmessungen ermittelt.

Probe	Herstellung	Polarität	x (%)	D (nm)	Schottky- kontakt
¹ BS210	MOVPE	Me	28	22	Pt
² MD1309	MOVPE	Me	20	22	Pt
² MD1310	MOVPE	Me	15	22	Pt
² MD1311	MOVPE	Me	12	22	Pt
³ 178	MOVPE	Me	20	27	Au
³ 199	MOVPE	Me	23	26	Au
³ 275	MOVPE	Me	22	26	Au
⁴ 072499B	MBE	Me	6	16	—

¹TU Braunschweig, ²Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg,

³TU Ilmenau, ⁴University of California at Santa Barbara

146]. Danach wurden die GaN-Kanalschicht (ca. 1200 nm) und die $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ -Barriere der Dicke D abgeschieden (siehe Tab. 5.1). Derartige Heterostrukturen mit freier Oberfläche sollen zukünftig als chemische Sensoren für Flüssigkeiten eingesetzt werden. Die oberste Nitridschicht aus ca. 3 nm dünnem GaN hat den Zweck die Oberflächeneigenschaften aller drei Proben, trotz der unterschiedlichen Al-Gehalte (vgl. Tab. 5.1) und Wachstumsbedingungen, anzugleichen. Für die ER-Messungen wurden Ti/Al/Ti/Au-Kontakte (die Dicken sind jeweils 20, 80, 30 und 100 nm) aufgesputtert und bei 800°C in die Proben einlegiert. Die Schottkykontakte sind kreisförmig (Durchmesser 1,3 mm) und bestehen jeweils aus 10 nm dünnen semitransparenten Au-Schichten. Mit diesen Proben wurde untersucht, ob sich die GaN-Deckschicht und die Au-Kontaktierung auf die Untersuchungsmethode für die AlGaN/GaN-Grenze, an der sich das 2DEG befindet, auswirken.

Das Potenzial und die Feldstärke der freien Oberfläche wurden an unkontaktierten AlGaN-Oberflächen untersucht. Dazu standen unkontaktierte Bereiche der Proben MD1309, MD1310 und MD1311 sowie eine weitere AlGaN/GaN-Probe (072499B von der University of California at Santa Barbara) zur Verfügung. Abbildung 5.2(c) zeigt das Schema des Probenaufbaus der letztgenannten Probe. Zuerst wurde auf ein (0001)-orientiertes Saphirsubstrat ein 2,5 μm dicker GaN-Puffer mit MOVPE aufgewachsen. Darüber wurden die eigentlichen Heterostrukturen mit plasmaunterstützter Molekularstrahlepitaxie abgeschieden. Sie bestehen aus einer GaN-Kanalschicht (ca. 250 nm) und einer $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ -Deckschicht.

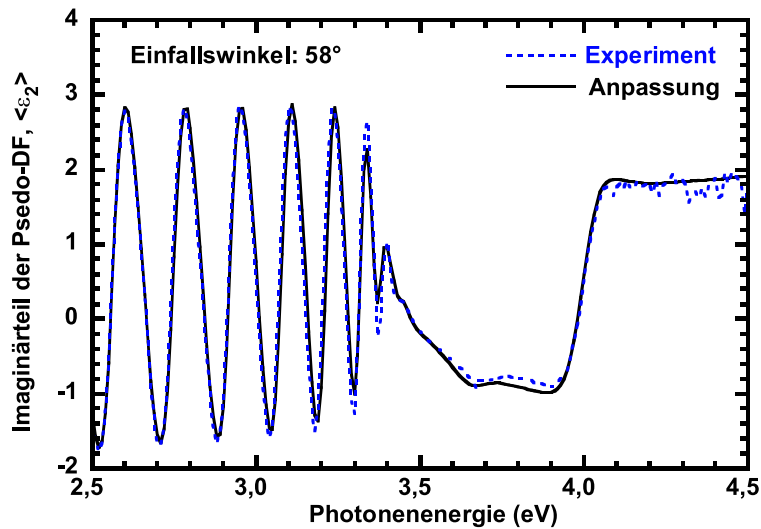


Abb. 5.3: Verlauf des Imaginärteils der pseudodielektrischen Funktion aus der Spektrellipsometriemessung. Für die Anpassung wurde der Probenaufbau durch ein Vielschichtmodell berücksichtigt.

Sie hat mit $x = 0,06$ einen relativ niedrigen Al-Gehalt (siehe Tab. 5.1). Details zum Wachstum diese Proben sind in [147] publiziert worden.

5.2 Vorcharakterisierung der Proben

Zur Bestimmung der Dicken D aller Proben wurden SE-Messungen bei mehreren Einfallswinkeln von 58° bis 74° an unkontaktierten Probenstücken desselben Wafers durchgeführt. Abbildung 5.3 zeigt beispielhaft für die Probe 275 das Spektrum bei 58° und die zugehörige Anpassung mit einem optischen Modell entsprechend dem Schichtaufbau. Eine der anzupassenden Größen war D , welches zu $(26,1 \pm 0,3)$ nm bestimmt wurde.

Der Al-Gehalt und die Verspannungen der Barrieren- und der Kanalschicht sind von entscheidender Bedeutung für die optischen und elektronischen Eigenschaften der Heterostruktur, da diese die Übergangsenergien und den Wert der Polarisationsdiskontinuität an der Heterogrenze festlegen. Beide Werte wurden aus hochauflösenden Röntgenmessungen („reciprocal space maps“) gewonnen. Dazu wurden die Streuvektoren q_{\parallel} und q_{\perp} in der Nähe der asymmetrischen $(\bar{2}025)$ -

Reflexe von AlGa_{0.22}N und GaN in reziproke Gittereinheiten (rlu) ausgedrückt und in die Gitterkonstanten

$$a = \frac{1}{q_{\parallel}} \frac{\lambda}{2} \frac{2}{\sqrt{3}} h \quad c = \frac{1}{q_{\perp}} \frac{\lambda}{2} l \quad (5.1)$$

umgerechnet. Dabei sind $h = -2$ und $l = 5$ die Millerindizes und $\lambda = 0,15406$ nm ist die Röntgenwellenlänge. Nach Schuster *et al.* [148] bestimmt man den Al-Gehalt aus a und c nach

$$x = \frac{a^{\text{AlGaN}}(c^{\text{AlGaN}} - c_0^{\text{GaN}}) + c^{\text{AlGaN}}\nu_b(a^{\text{AlGaN}} - a_0^{\text{AlGaN}})}{a^{\text{AlGaN}}(c_0^{\text{AlN}} - c_0^{\text{GaN}}) + c^{\text{AlGaN}}\nu_b(a^{\text{AlGaN}} - a_0^{\text{AlGaN}})} \quad (5.2)$$

mit dem als x -unabhängig angenommenen Verhältnis

$$\nu_b = -\frac{2C_{13}}{C_{33}}. \quad (5.3)$$

Abbildung 5.4 zeigt als Beispiel eine Röntgenmessung von der Probe 275¹. Die Streuintensität ist hier durch Höhenlinien im reziproken Raum dargestellt. Aus dieser Abbildung kann außerdem geschlossen werden, dass sich das AlGa_{0.22}N-Kristallgitter pseudomorph mit dem GaN-Gitter verbunden hat: Die (2025)-Reflexe beider Schichten liegen bei gleichen q_{\parallel} , d.h. die Gitterkonstanten in der (0001)-Ebene sind ebenfalls gleich. Nach Gl. (5.2) beträgt der Al-Gehalt 22%.

5.3 Photolumineszenzspektroskopie

Für die Photolumineszenzexperimente wurden die Proben in einen Kryostaten eingeschleust, in dem die Temperatur von 5 K bis 300 K mittels Zufuhr flüssigen Heliums und einem Temperaturregler auf 0,1 K genau eingestellt werden kann. Der Aufbau der Apparatur ist in Abb. 5.5 dargestellt. Anregungsquelle waren zum Einen ein He-Cd-Laser ($\hbar\omega = 3,815$ eV) und zum Anderen ein Monochromator in Verbindung mit einer Xe-Höchstdrucklampe (Bandbreite: 4 meV). Letzterer ließ sich in Bezug auf die Wellenlänge kontinuierlich durchstimmen. Das Anregungslicht wurde auf die Probe fokussiert. Die Lumineszenz der Probe wurde mit Hilfe eines Objektivs und einer Glasfaser zum Eingangsspalt des Monochromators geleitet. Ein gekühlter CCD-Siliziumempfänger, welcher mit dem PC ausgelesen wurde, detektierte die Photointensität. Der Messplatz ermöglichte die Aufnahmen von Photolumineszenz- (PL-) sowie von Photolumineszenzanre-

¹Mit freundlicher Genehmigung von K. Tonisch vom Institut für Mikro- und Nanoelektronik der TU Ilmenau.

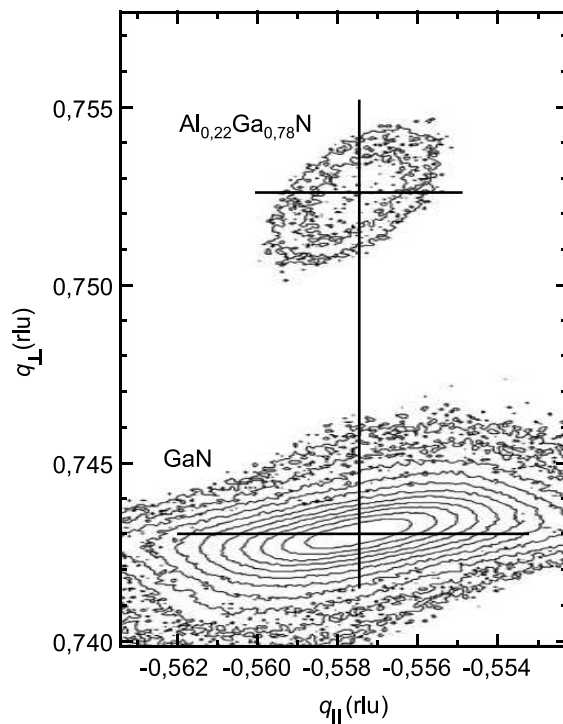


Abb. 5.4: Röntgenmessung („reciprocal space map“) der Probe 275 in Höhenliniendarstellung in der Nähe der (2025)-Reflexe von AlGaIn und GaN zum Nachweis pseudomorphes Wachstums und zur Bestimmung der Gitterkonstanten.

gungs- (PLE-)Spektren. Bei der PL-Spektroskopie wird mit fester Photonenenergie meist oberhalb der Bandlücke angeregt, die erzeugten Ladungsträger relaxieren dann zu den Bandkanten, zu Störstellen oder bilden Exzitonen bevor sie strahlend rekombinieren. Die emittierte Strahlung wird spektral analysiert. Alle PL-Spektren wurden hinsichtlich der spektralen Empfindlichkeit des Messplatzes korrigiert. Im Gegensatz dazu steht bei der PLE-Spektroskopie die Detektionswellenlänge fest und die Anregungsenergie wird durchgestimmt. Können mit der Anregungsenergie elektronische Zustände angeregt werden, findet die Generation von Ladungsträgern statt. Wie intensiv die Ladungsträger generiert werden, hängt hauptsächlich von den Übergangswahrscheinlichkeiten und den entsprechenden Zustandsdichten ab. Dies wiederum bedingt die detektierte Lumineszenzintensität. Die PLE-Spektroskopie gibt Aufschluss über das Absorptionsverhalten. Die PLE-Spektren in dieser Arbeit sind hinsichtlich der Anregungsleistung des Messplatzes korrigiert.

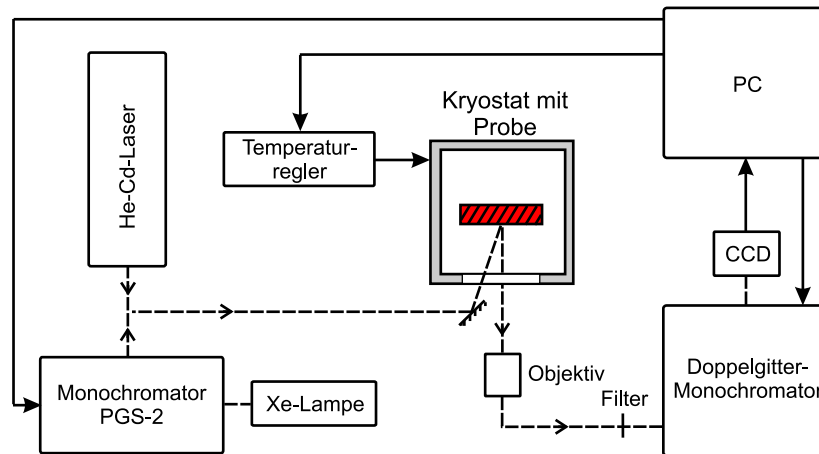


Abb. 5.5: Schema des kombinierten Messplatzes zur Aufnahme von Photolumineszenz- und Photolumineszenzanregungspektren.

5.4 Elektro- und Photoreflexion, Photostrom

Abbildung 5.6 zeigt das Schema des kombinierten ER- und PR-Messplatzes. Die Probe befindet sich in einem Kryostaten, in dem die Temperatur von 5 K bis 300 K durch Zufuhr flüssigen Heliums und durch einen Temperaturregler auf 0,1 K genau eingestellt werden kann. Im Fall der ER werden mit dem Funktionsgenerator an die Kontakte der Probe die Gleichspannung U_{gl} und die Rechteckspannung U_{mod} angelegt. Bei der kontaktlosen Untersuchung mit PR erfolgt die Modulation der inneren elektrischen Felder über die Generation von Ladungsträgern mit Hilfe des gehoppten Lichts eines He-Cd-Lasers ($\hbar\omega = 3,815 \text{ eV}$). Das Messlicht wird in beiden Fällen von der spektral zerlegten Strahlung einer Xe-Höchstdrucklampe (einstellbare Bandbreite: 2 bis 10 meV) bereitgestellt. Es wird durch ein Objektiv auf die Probe fokussiert. Das von der Probe reflektierte Licht wird mit demselben Objektiv gesammelt und über Spiegel zur Si-Photodiode geleitet. Die mit der Diode gemessene Lichtintensität besteht aus einem Gleichanteil, er entspricht R , und einem Modulationsanteil, er entspricht ΔR . Der Strom der Photodiode wird mit einem Vorverstärker I-U-gewandelt und um den Faktor 10^8 V/A verstärkt. Das mit einem Lock-in phasenrichtig verstärkte Signal ($\propto \Delta R$), sowie das Gleichsignal ($\propto R$) werden vom PC ausgelesen und zur Messgröße $\Delta R/R$ weiter verarbeitet.

PC-Spektren wurden am gleichen Messplatz aufgenommen. Dazu wurde das Messlicht gehoppt und der Photostrom vom Lock-in verstärkt.

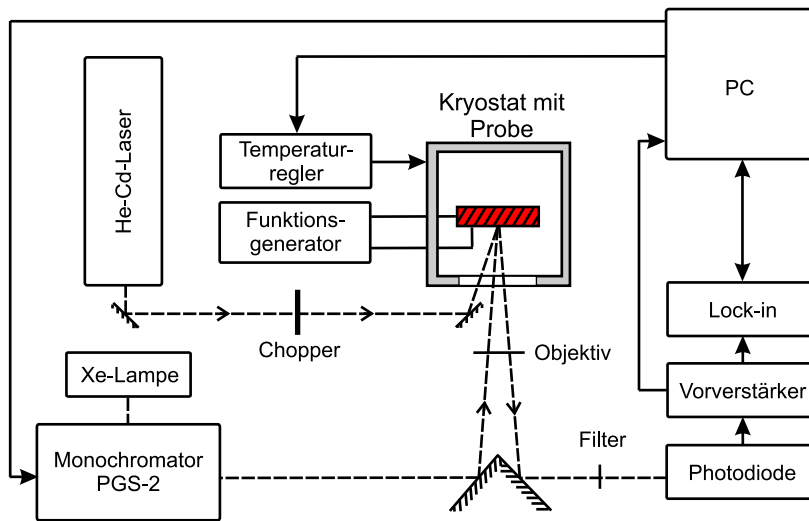


Abb. 5.6: Schema des kombinierten Elektro- und Photoreflexionsmessplatzes.

6 AlGa_xN/GaN-Heterostrukturen mit Schottkykontakt

Nachdem in Kap. 4 das ER-Signal für den einfachsten Fall eines halbbeschränkten Halbleiters mit homogener Feldverteilung theoretisch behandelt wurde, werden nun die experimentellen Ergebnisse aus den Untersuchungen der kontaktierten Proben dargestellt und diskutiert. In Abschnitt 6.1 wird ein Verfahren vorgestellt, mit dem die für die Dimensionierung von Bauelementen aus Nitridhalbleitern entscheidende Größe der Polarisationsdiskontinuität ΔP aus dem Feldstärke-Spannungsverlauf bestimmt werden kann [5]. Für die in der Leistungselektronik wichtige Al_xGa_{1-x}N/GaN-Heterogrenze wird in Abschnitt 6.2 der Verlauf von $\Delta P(x)$ mit bisher unerreichter Genauigkeit dargestellt und mit theoretisch vorausgesagten Daten verglichen. In Abschnitt 6.3 wird theoretisch und experimentell überprüft, inwieweit sich die Werte von ΔP bei tiefen Temperaturen von denen bei Raumtemperatur durchgeführten unterscheiden. Die Wirkung reduzierender Gase auf AlGa_xN/GaN-Heterostrukturen mit katalytischem Schottkykontakt, welche als chemische Sensoren geeignet sind, wird am Beispiel gasförmigen Wasserstoffs in Abschnitt 6.4 dargestellt und diskutiert. Der Fokus liegt hierbei auf den Änderungen der 2DEG-Ladungsträgerdichte und der Schottkybarrierenhöhe. Die ER-Spektroskopie ermöglicht im Gegensatz zu den meisten anderen Methoden, den Bereich direkt unter dem Schottkykontakt zu charakterisieren [6]. In Abschnitt 6.5 werden die Auswirkungen elektrischer Felder auf optische Spektren mit Exzitonenmerkmalen detailliert beschrieben. Konkret wird eine Simulation von ER-Spektren zweier experimentell untersuchten Proben dargestellt. Für die vollständige Wiedergabe von ER-Spektren ist die Kenntnis der Feldstärke-Spannungsverläufe notwendig. Dafür wurden die Polarisationsdiskontinuitäten dieser Proben aus Abschnitt 6.2 herangezogen. Es folgt die vollständige Spektrensimulation und die Bestätigung Linienformanalyse nach Aspnes. Als Basis dienen die in Kap. 3 berechneten DF. Diese DF fließen in ein Vielschichtmodell ein, um alle epitaktischen Schichten, das Substrat und die inhomogene Feldverteilung in den Proben zu berücksichtigen [12, 149].

6.1 Die Bestimmung der Polarisationsdiskontinuität

6.1.1 Experimentelle Methode

Sowohl für AlGa_xN/GaN- als auch für InGa_yN/GaN-Heterostrukturen wurden bisher Kapazitäts-Spannungsmessungen (C-U) herangezogen, um aus den damit ermittelten 2DEG-Dichten indirekt auf die jeweiligen Werte von ΔP zu schließen. Die so gewonnenen Resultate sind in Abb. 6.1 durch die schwarzen Symbole dargestellt. Die durchgezogene Linie stellt die nach der Theorie (siehe Abb. 2.4) erwarteten Verläufe dar. Die Streuung der experimentellen Daten um diese Kurve zeigt die Unsicherheit der C-U-Methode. Bessere Übereinstimmung mit der Theorie zeigen die Daten, die durch mit Hilfe von ER-Spektren bestimmt wurden [siehe blaue Symbole in Abb. 6.1(a)]. Entscheidend war jeweils die Feldstärke in der AlGa_xN-Schicht F , welche durch Analyse der entsprechenden FKO ermittelt wurde.

Die Idee dieser Methode soll an Hand des Beispiels einer Pt/AlGa_xN/GaN-Heterostruktur erläutert werden. Der Schichtaufbau soll der gleiche wie bei der Probe BS210 sein. Die AlGa_xN-Schichtdicke und der Al-Gehalt sind somit ausreichend, damit sich ein 2DEG an der AlGa_xN/GaN-Heterogrenze ausbildet. Leit-

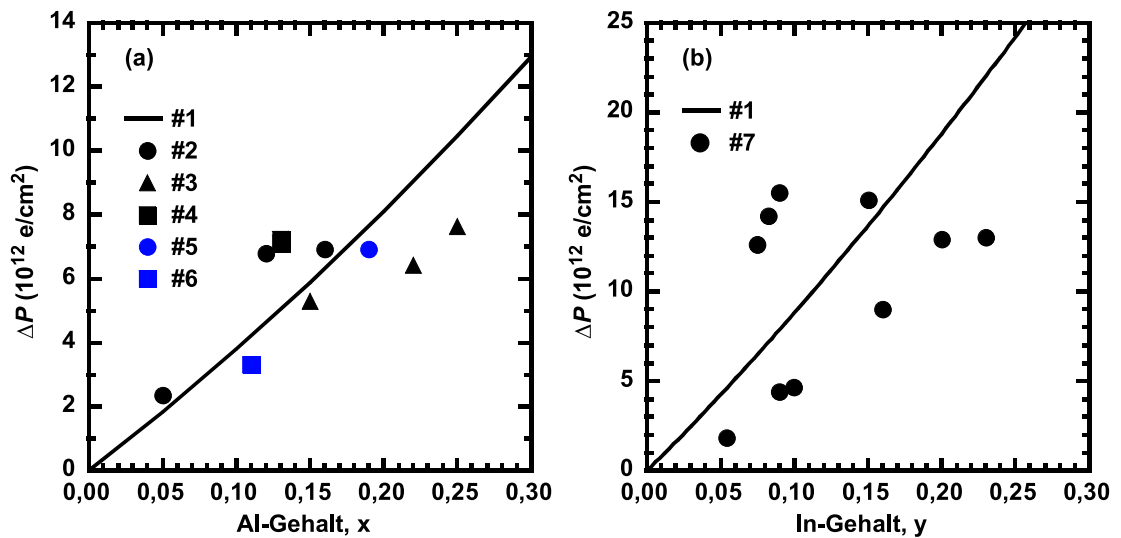


Abb. 6.1: Literaturwerte zur Polarisationsdiskontinuität (a) an der $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ -Heterogrenze und (b) an der $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ -Heterogrenze. #1 — nach Abb. 2.4, #2 — aus [32] (C-U), #3 — aus [33] (C-U), #4 — aus [34] (C-U), #5 — aus [37] (ER), #6 — aus [36] und [81] (ER), #7 — aus [35] und den Quellen darin (C-U).

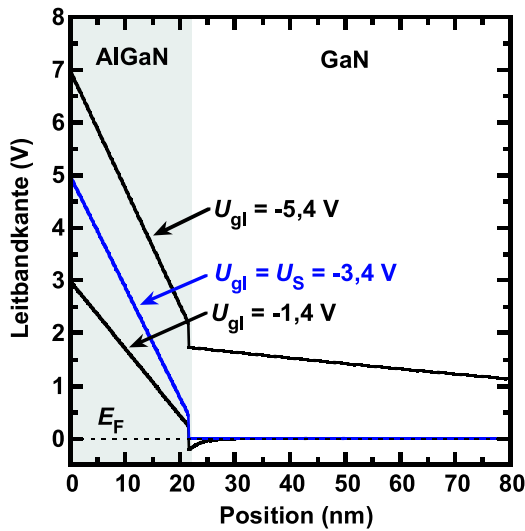


Abb. 6.2: Berechnete Leitbandkantenverläufe nahe der Probenoberfläche für drei Spannungen (U_{gl}). Für die Schwellspannung U_S sind die Bänder in der GaN-Schicht durchgehend flach.

bandkantenverläufe für unterschiedliche angelegte Spannungen wurden errechnet und sind in Abb. 6.2 dargestellt. Betrachten wir zunächst den Fall, dass zwischen dem Oberflächenkontakt und tieferen GaN-Schichten zusätzlich zur ER-Modulationsspannung eine negative Gleichspannung von $U_{gl} = -1,4 \text{ V}$ angelegt wird. Diese erzeugt zusammen mit der Schottkybarrierenhöhe an der Pt/AlGaIn-Grenzfläche ein elektrostatisches Potenzial von 3 V. Da die Leitbandkante im Bereich der AlGaIn/GaN-Heterogrenzen durch das 2DEG am Fermi-niveau fixiert ist, stellt sich im AlGaIn eine bestimmte Feldstärke ein. Die $F(U_{gl})$ -Abhängigkeit ist nahezu linear und entspricht dem eines Plattenkondensators mit der AlGaIn-Schicht als Dielektrikum. Erhöht man die Rückwärtsspannung weiter, steigt F und die Ladungsträgerdichte des 2DEG sinkt. Dies wird solange der Fall sein, bis das 2DEG bei der Schwellspannung $U_S = -3,4 \text{ V}$ vollständig verarmt ist und das Leitungsband am Fermi-niveau nicht mehr fixiert wird. Für größere Rückwärtsspannungen erhöht sich F aufgrund der Hintergrunddotierung nur noch wurzelförmig mit U_{gl} , da sich in der GaN-Schicht eine Raumladungszone aus geladenen Donatoren bildet. Im Grenzfall, d.h. am Knickpunkt zwischen den beiden Abhängigkeiten, ist die Feldstärke in GaN-Schicht Null und nimmt in der AlGaIn-Schicht einen Wert F_S an, der charakteristisch für die Polarisationsdiskontinuität ist. Dazu betrachtet man Gl. (2.19), die sich zu

$$-\varepsilon_0 \varepsilon_{\text{AlGaIn}} F_S = \Delta P_{\text{exp}} \quad (6.1)$$

vereinfacht, wobei ΔP_{exp} die experimentell bestimmte Polarisationsdiskontinuität bezeichnet.

Kurtz *et al.* [37] schlossen als erste $F(U_{\text{gl}})$ -Verhalten auf ΔP . Sie untersuchten dabei eine $\text{Al}_{0,19}\text{Ga}_{0,91}\text{N}/\text{GaN}$ -Heterostruktur auf SiC-Substrat mittels ER-Spektroskopie bei Raumtemperatur. Sie erklärten ihre Ergebnisse, indem sie nur 85% des theoretisch vorhergesagten Wertes für ΔP annahmen, siehe blauer Kreis in Abb. 6.1(a). Allerdings wurden die Messungen nicht bis zur Verarmung des 2DEG getrieben, so dass Werte für die Schottkybarrierenhöhe Φ_{B} und die AlGaN-Schichtdicke D angenommen werden mussten. Drabinska *et al.* [36, 81] erkannten, dass sich aus dem Knickpunkt der $F(U_{\text{gl}})$ -Abhängigkeit ΔP bestimmen lässt. Sie untersuchten eine $\text{Al}_{0,11}\text{Ga}_{0,89}\text{N}/\text{GaN}$ -Heterostruktur, die auf Saphirsubstrat abgeschieden wurde und eine dicke mit Si dotierte GaN-Schicht besaß. Die Dotierung betrug $2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Auch bei dieser Messung lag der experimentelle Wert von ΔP unterhalb des theoretisch vorausgesagten (72% des Theoriewertes), siehe blaues Quadrat in Abb. 6.1(a).

6.1.2 Identifikationsmerkmale der 2DEG-Verarmung

Man kann die Zuverlässigkeit der in [36] und [81] vorgestellten ER-Methode noch bedeutend steigern. Dazu wurden in dieser Arbeit erstens die Untersuchungen bei $T = 5 \text{ K}$ durchgeführt. Dies minimiert die energetische Breite der optischen Übergänge und erhöht das Signal/Rausch-Verhältnis. Zweitens wurden Proben herangezogen, deren Schichten eine möglichst geringe Dotierung aufwiesen. Beides hatte zum Ziel, die Grenze zwischen der 2DEG-Verarmung und der Ausbildung der GaN-RLZ exakt zu bestimmen, um den Wert für F_{S} in Gl. (6.1) sehr genau festzulegen.

Im Folgenden soll anhand der Probe BS210 ($x = 0,28$) gezeigt werden, dass dieser Grenzfall in ER-Spektren identifizierbar ist und welche Merkmale er hat. Die verwendete Kontaktkonfiguration erlaubt die Aufnahme von ER-Spektren sowohl von GaN- als auch von der AlGaN-Schicht. Entsprechende Daten sind für eine angelegte Spannung von $U_{\text{gl}} = +1 \text{ V}$ in den Abbildungen 6.3(a) und (c) dargestellt, während die U_{gl} -Abhängigkeit der farbkodierten ER-Karten in den Abbildungen 6.3(b) und (d) dargestellt ist.¹ Die Spektren wurden mit einer Schrittweite von $\Delta U_{\text{gl}} = 200 \text{ mV}$ und mit einer Modulationsamplitude von $U_{\text{mod}} = 100 \text{ mV}$ aufgenommen. Schaut man sich zunächst einmal nur das prinzipielle Verhalten der Spektrenserien an, stellt man bei der Schwellspannung von $U_{\text{S}} = U_{\text{gl}} = -3,4 \text{ V}$ in beiden Spektralbereichen deutliche Veränderungen fest. Dies ist der oben genannte Grenzfall. In Richtung positiver angelegter Spannungen bildet sich unterhalb der AlGaN/GaN-Heterogrenze ein 2DEG mit zunehmender Dichte. Die

¹Weitere ER-Spektren im Spektralbereich der AlGaN-Bandkante wurden bis zu $U_{\text{gl}} = -8 \text{ V}$ aufgenommen und ausgewertet.

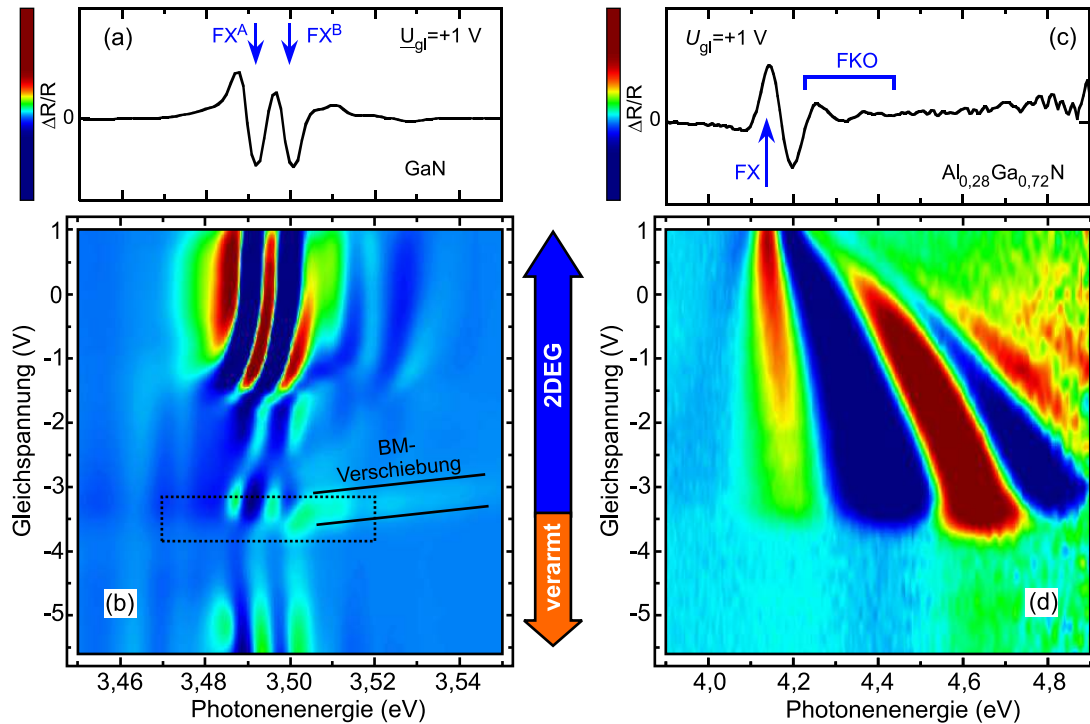
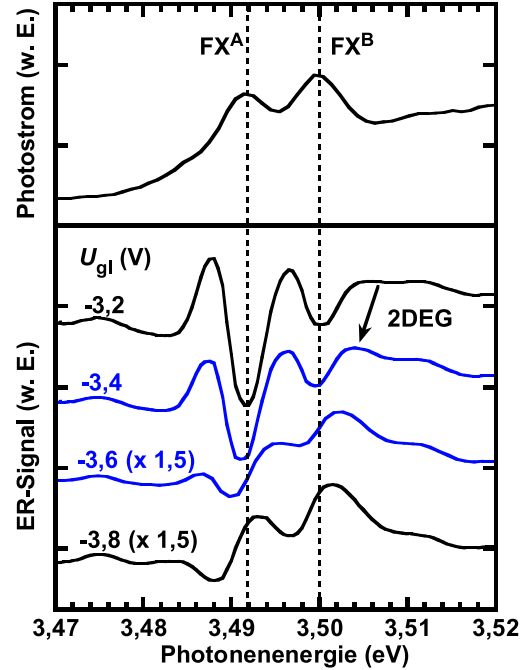


Abb. 6.3: ER-Spektren ($T = 5\text{ K}$) der Probe BS210. In (a) und (c) sind die Spektralbereiche um die GaN- bzw. $\text{Al}_{0,28}\text{Ga}_{0,72}\text{N}$ -Bandkante für eine Gleichspannung von $U_{\text{gl}} = 1,0\text{ V}$ dargestellt. Die entsprechenden ER-Karten im Bereich von $-5,6\text{ V} \leq U_{\text{gl}} \leq 1\text{ V}$ sind in (b) und (d) abgebildet. Die Kodierung ist durch die Skalen in (a) bzw. (c) angegeben. Der gestrichelte Rahmen in (b) kennzeichnet den Bereich der in Abb. 6.4 dargestellten Einzelspektren.

wachsende Bandbefüllung in dem räumlich eng begrenzten Bereich des 2DEG-Kanals führt zu einer Verschiebung der Absorptionskante zu höheren Energien, was auch unter dem Begriff Burstein-Moss- (BM-)Verschiebung bekannt ist. Die angelegte Modulationsspannung ruft eine Änderung von $N_{2\text{DEG}}$ hervor, was mit einer energetischen Verschiebung der stufenförmigen Absorptionskante des quasi-zweidimensionalen Systems verbunden ist. Als Resultat wird ein Maximum in den GaN-ER-Spektren oberhalb der Exzitonenresonanzen beobachtet, das in Abb. 6.3(b) markiert ist. Es wird zweifelsfrei auf die BM-Verschiebung zurückgeführt, da es folgende markante Merkmale aufweist, wenn U_{gl} von größeren Spannungen gegen U_{S} strebt [37]:

1. Rotverschiebung seiner Position in Richtung E_{g} durch Abbau des 2DEG
2. Zunahme der Signalstärke
3. vollständiges Verschwinden für $U_{\text{gl}} \leq U_{\text{S}}$.

Abb. 6.4: PC- und ER-Spektren ($T = 5\text{ K}$) zur Erläuterung der Abb. 6.3(a) und (b). Zur besseren Übersichtlichkeit wurden die Kurven vertikal verschoben.



Wie später gezeigt wird, beträgt die Dichte des Elektronengases für $U_{\text{gl}} = +1\text{ V}$ $N_{\text{2DEG}} = 9,7 \times 10^{12} e/\text{cm}^2$. Aufgrund der starken Bandbefüllung ist die Kanalschicht bis zu $3,51\text{ eV}$ nur schwach absorbierend. Unter dieser Bedingung werden die Übergänge der freien Exzitonen aus dem volumenartigen Anteil der GaN-Schicht sichtbar, wie in Abb. 6.3(a) durch Pfeile gekennzeichnet. Die stärksten Signale bei den Positionen $3,492$ und $3,500\text{ eV}$ werden jeweils dem FX^{A} - und dem FX^{B} -Exziton zugeordnet, während das FX^{C} -Exziton aufgrund der Zugverspannung nicht in Erscheinung tritt [90].

Die Übergangsenergien der Exzitonen wurden durch ein Photostromspektrum, welches in Abb. 6.4 dargestellt ist, untermauert. Die Intensitätsverhältnisse der Exzitonen sind im Einklang mit den berechneten Oszillatorstärken für freie Exzitonen in druckverspanntem GaN [90] und die Energieaufspaltung der Linien folgt der in Abb. 2.9 dargestellten Abhängigkeit. Wie ebenfalls in Abb. 6.4 dargestellt ist, findet in der Umgebung von $U_{\text{gl}} = U_{\text{S}}$ eine Phasenrotation des ER-Signales statt. Dies ist ein eindeutiges Kennzeichen des Vorzeichenwechsels der GaN-Feldstärke und damit der vollständigen Verarmung des 2DEGs: die positive Halbwelle der Modulationsspannung führt bei $U_{\text{gl}} = -3,2\text{ V}$ zu einer Zunahme des Betrages der *positiven* GaN-Feldstärke, aber bei $U_{\text{gl}} = -3,6\text{ V}$ zu einer Abnahme der *negativen* GaN-Feldstärke.

Die Erklärung des AlGaIn-Einzelspektrums [Abb. 6.3(c)] und der Entwicklung der Spektren mit der angelegten Spannung [Abb. 6.3(d)] sind viel einfacher. Die Bandkantenenergie $\Gamma_7^c - \Gamma_9^v$ beträgt $E_g = 4,17 \text{ eV}$ und liegt nach Gl. (3.18) 32 meV oberhalb des größten Maximums, welches im ER-Spektrum beobachtet wird. Wegen der hohen Barrierenfeldstärke werden individuelle Exzitonlinien nicht aufgelöst (siehe Argumentation in Abschnitt 3.3.3). Bis zu fünf FKO lassen sich oberhalb E_g beobachten. Die große Anzahl der Oszillationen unterstreicht die exzellente Materialqualität der Legierung und die Homogenität ihrer Zusammensetzung. Weiterhin weist sie auf ein sehr homogenes elektrisches Feld in der Barriere hin. Der Abstand der FKO als Maß für den Betrag der Barrierenfeldstärke $|F|$ steigt stark zwischen $U_{\text{gl}} = +1 \text{ V}$ und $U_{\text{gl}} = U_S$ an, er bleibt aber bei weiterer Verkleinerung der Spannung nahezu konstant. Die Ursache ist die vollständige Verarmung des 2DEG. Hat sich die GaN-RLZ ausgebildet, verringert sich die Feldstärkemodulation in der AlGaIn-Schicht ΔF , was die radikal verringerte Signalamplitude erklärt.

6.1.3 Auswertung der ER-Spektren

Wie in Abschnitt 4.3 nachgewiesen wurde, lässt sich $|F|$ selbst bei sehr großer exzitonischer Wechselwirkung, wie sie für AlGaIn der Fall ist, mit Aspnes' asymptotischer Näherung [Gl. (4.6)] bestimmen. Die reduzierte effektive Masse für die Probe BS210 wurde hierfür mit $\mu = 0,22m_0$ interpoliert [105]. Abbildung 6.5(a) zeigt die ermittelte $F(U_{\text{gl}})$ -Charakteristik.² Oberhalb U_S fällt $|F|$ stark und linear mit der angelegten Spannung ab. Das beweist ein plattenkondensatorartiges Verhalten (Schottky-Kontakt — 2DEG). Unterhalb von U_S ist die $F(U_{\text{gl}})$ -Abhängigkeit viel schwächer. Der Knick tritt bei den Koordinaten Schwellspannung $U_S = (-3,4 \pm 0,2) \text{ V}$ und Schwellfeldstärke $F_S = (-2140 \pm 90) \text{ V}$ auf. F_S steht nach Gl. (6.1) in direkter Beziehung zu ΔP . Daraus folgt $\Delta P_{\text{exp}} = (11,7 \pm 0,5) \times 10^{12} \text{ e/cm}^2$.

In der theoretischen Betrachtung der Polarisationsdiskontinuität berücksichtigt man den spontanen (ΔP^{SP}) und den piezoelektrischen Anteil (ΔP^{PE}). Letzterer kann aus der kompressiven biaxialen Deformation des GaN-Films $\epsilon_{\parallel} = -1,8 \times 10^{-3}$, abgeleitet aus der Übergangsenergie von FX^{A} nach Gl. (2.25a), und unter Annahme einer darüber liegenden, kohärent mit $\epsilon_{\parallel} = 4,9 \times 10^{-3}$ zugverspannten $\text{Al}_{0,28}\text{Ga}_{0,72}\text{N}$ -Schicht [aus Abb. 2.3(a) $T = 5 \text{ K}$], abgeschätzt werden. Mit den Gl. (2.15a) und (2.16) erhält man $\Delta P^{\text{PE}} = (4,54 \pm 0,20) \times 10^{12} \text{ e/cm}^2$. Aus Gl. (2.11a) bestimmt man $\Delta P^{\text{SP}} = (7,14 \pm 0,29) \times 10^{12} \text{ e/cm}^2$. Demzufolge

²Die Analyse liefert nur den Betrag $|F|$. F ist negativ, weil in dieser Arbeit die Achse des Raumkoordinatensystems vom Schottkykontakt zum Substrat zeigt.

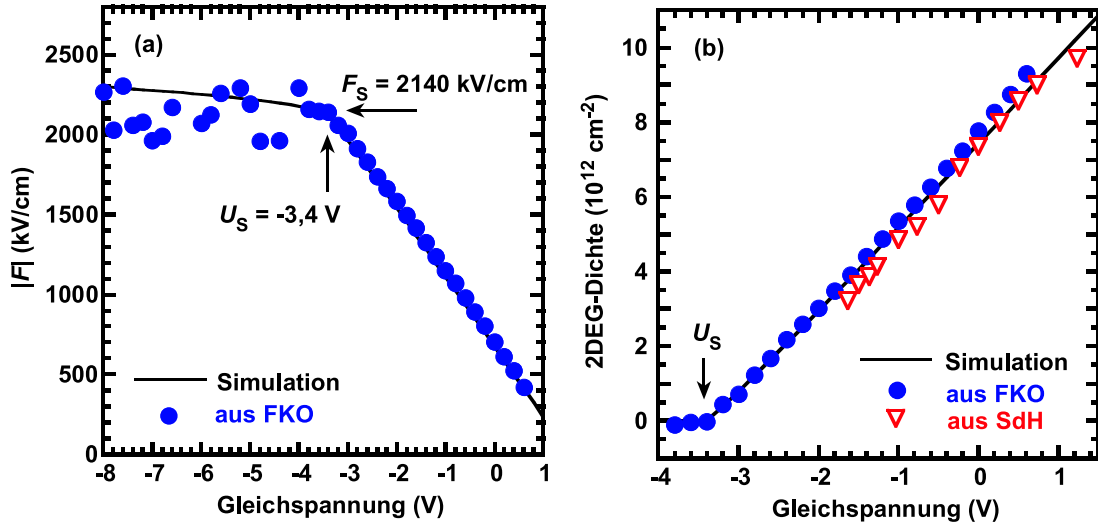


Abb. 6.5: (a) Betrag der elektrischen Feldstärke $|F|$ in der AlGaN-Barriere aus der Analyse der FKO in Abhängigkeit von der angelegten Gleichspannung. Die durchgezogene Linie stellt das Ergebnis einer selbstkonsistenten Lösung der Schrödinger- und der Poisson-Gleichung dar. In (b) sind die aus F mit Gl. 6.2 berechneten Ladungsträgerdichten des Elektronengases zusammen mit den Ergebnissen der SdH-Experimente und der selbstkonsistenten Rechnung dargestellt.

erwartet man nach der Theorie den Wert $\Delta P_{\text{theo}} = (11,7 \pm 0,5) \times 10^{12} e/\text{cm}^2$.³ Dies stimmt hervorragend mit dem experimentell ermittelten Ergebnis überein.

Die optischen Daten ermöglichen außerdem die Bestimmung der Elektronengasdichte in Abhängigkeit von der angelegten Spannung. Am einfachsten ist es, eine Analogie zum Plattenkondensatormodell herzustellen. D.h. es gilt:

$$N_{2\text{DEG}}(U_{\text{gl}}) \approx \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_{\text{AlGaN}}}{e} [F(U_{\text{gl}}) - F_{\text{S}}]. \quad (6.2)$$

Eine einzige Annahme, die über den Betrag von $\varepsilon_{\text{AlGaN}}$, ist hierbei zu treffen. Nach [106, 150] kann man dessen Wert für $\text{Al}_{0,28}\text{Ga}_{0,72}\text{N}$ mit $\varepsilon_{\text{AlGaN}} = 9,87$ interpolieren. Die entsprechenden Daten sind in Abb. 6.5(b) dargestellt.

An dieser Probe wurden ebenfalls SdH-Messungen bei magnetischen Flussdichten von bis zu 14 T und einer Temperatur von $T = 330$ mK durchgeführt [139]. Die Analyse ergab eine maximale Elektronenbeweglichkeit von $7200 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ bei $N_{2\text{DEG}} = 6,5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Die Resultate dieser etablierten Methode sind in sehr guter Übereinstimmung mit den auf optischem Wege ermittelten Daten [siehe Abb. 6.5 (b)], was die Genauigkeit der Feldstärkebestimmung und insbesondere

³Eine absolute Messunsicherheit des Al-Gehaltes von $\pm 0,01$ wurde hier angenommen.

von F_S belegt. Eine kleine Verschiebung zu niedrigeren Spannungen ist erkennbar. Dieses Verhalten lässt sich durch den Einfluss der durch das ER-Messlicht generierten Ladungsträger auf den Bandkantenverlauf zu erklären: diese Ladungsträger schirmen das elektrische Feld in der AlGaN-Schicht teilweise ab, so dass höhere Rückwärtsspannungen zum Feldaufbau angelegt werden müssen als in der in Dunkelheit durchgeführten SdH-Messung. Ein Vorteil der ER- gegenüber der SdH-Methode ist, dass man $N_{2\text{DEG}}$ bis zur vollständigen 2DEG-Verarmung beobachten kann.

Zusätzlich wird die Diskussion im Plattenkondensatormodell durch selbstkonsistente Leitbandkantenberechnungen untermauert (siehe Abschnitt 2.4). Die Ergebnisse sind ebenfalls in die Diagramme 6.5 (a) und (b) eingetragen. Diese Kurven sind in guter Übereinstimmung zu den experimentellen Daten. Der wichtigste Parameter ist hierbei ΔP .⁴ Würde man größere oder kleinere Werte als ΔP_{exp} annehmen, läge der berechnete $F(U_{\text{gl}})$ -Knick in Abb. 6.5(a) bei einem entsprechend größeren bzw. kleineren Betrag der Feldstärke. Und in Abb. 6.5 (b) würde sich der Verlauf von $N_{2\text{DEG}}(U_{\text{gl}})$ verschieben.

6.2 Die Abhängigkeit der Polarisationsdiskontinuität vom Al-Gehalt

Für elektronische und optische Bauelemente ist der ΔP -Verlauf über den gesamten Bereich $0 < x < 1$ von Bedeutung [151–153]. Auch steht eine einwandfreie experimentelle Überprüfung des theoretisch vorhergesagten Verlaufes [31] noch aus. Im vorhergehenden Abschnitt wurde die Probe BS210 mit $x = 0,28$ sehr genau betrachtet. Im Folgenden werden weitere Resultate für andere Al-Gehalte dargestellt. Es werden zunächst ER-Spektrenserien der zwei auf Si-Substrat gewachsenen Proben MD1309 und MD1310 mit den Daten der Probe BS210 verglichen. Die Messungen fanden wiederum bei $T = 5\text{ K}$ mit $U_{\text{mod}} = 100\text{ mV}$ statt. Die Spektren wurden im Spannungsbereich $1\text{ V} \geq U_{\text{gl}} \geq -8\text{ V}$ in Schritten von 200 mV aufgenommen. Die Ergebnisse sind in Abb. 6.6 zusammengefasst.

⁴Andere Simulationsparameter waren $\Phi_B = 1,6\text{ V}$, die Barrieren- und die GaN-Schichtdicke $D = 22\text{ nm}$, die Leitungsbanddiskontinuität von 450 meV , die (vergleichsweise geringe) Hintergrunddotierung von $2 \times 10^{16}\text{ cm}^{-2}$ und die Temperatur $T = 5\text{ K}$.

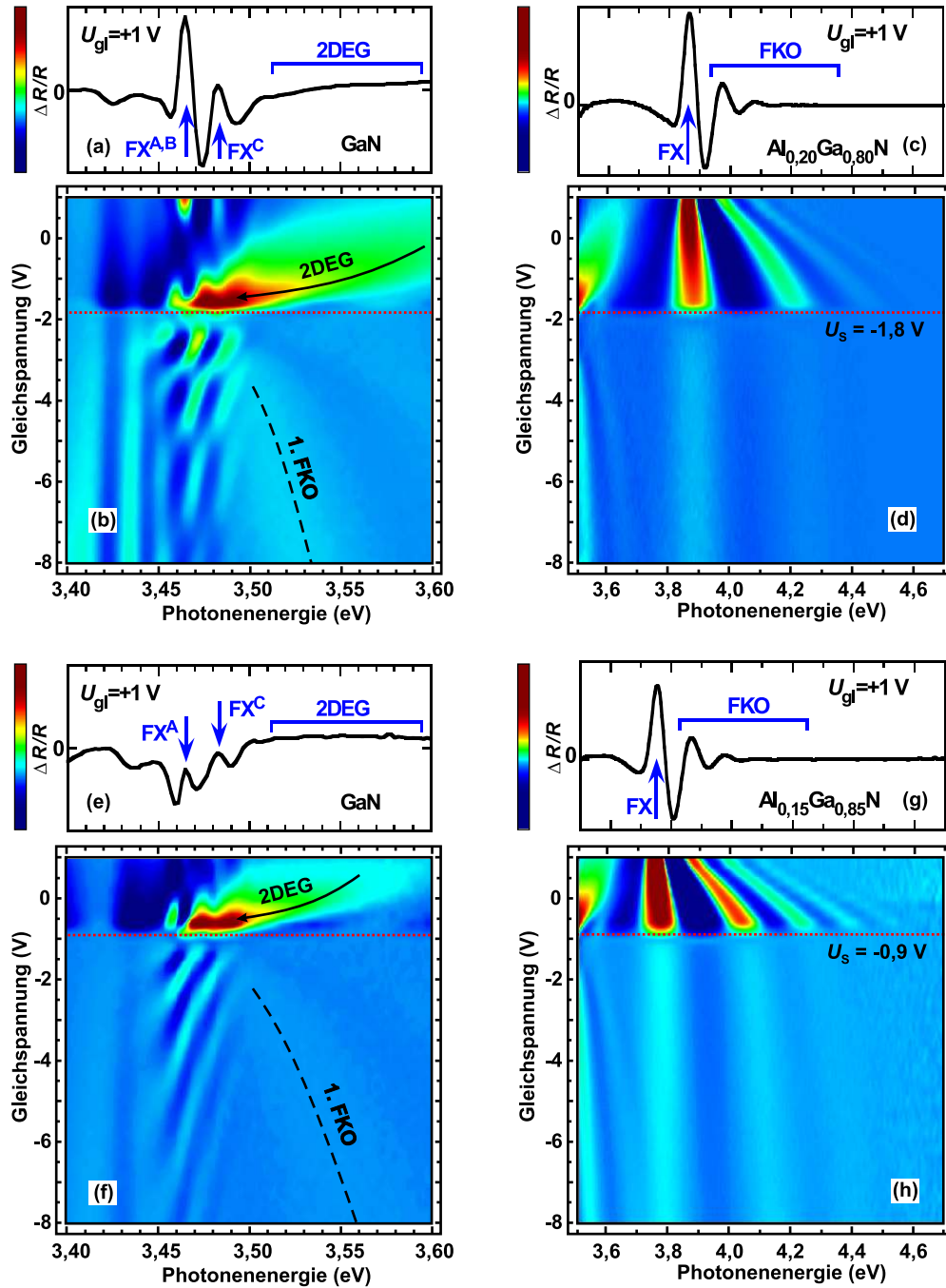


Abb. 6.6: ER-Spektren ($T = 5$ K) von $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ -Heterostrukturen auf Si-Substrat. Links ist jeweils der Spektralbereich in der Nähe der GaN- und rechts in der Nähe der AlGa_xN-Bandkante dargestellt. (a) und (c) sind Spektren der Probe MD1309 ($x = 0,20$) bei $U_{gl} = 1$ V. (b) und (d) sind die dazugehörigen ER-Spektrenübersichten. Die Daten der Probe MD1310 ($x = 0,15$) sind für $U_{gl} = 1$ V in (e) und (g) und für verschiedene Spannungen in (f) und (h) dargestellt.

Die beiden Proben weisen alle an der Probe BS210 beobachteten Merkmale auf. Bei einer Spannung von $U_{\text{gl}} = +1 \text{ V}$ beobachtet man in den Abb. 6.6 (a) und (e) die Übergänge des freien FX^{A} -Exzitons (3,466 eV) und des FX^{C} -Exzitons (3,483 eV). Weil die GaN-Schicht auf dem Si-Substrat zugverspannt ist ($\epsilon_{\parallel} = 19 \times 10^{-4}$), ist die Oszillatorstärke des FX^{B} -Überganges sehr schwach [90]. Nach Gl. 2.25 erwartet man seine Übergangsenergie nur 2,7 meV oberhalb von FX^{A} . Deshalb sind FX^{A} und FX^{B} im Spektrum nicht voneinander trennbar.

In den Abb. 6.6(b) und (f) zeigt sich für $U_{\text{gl}} > U_{\text{S}}$ die spannungsabhängige Leitungsbandbefüllung des GaN-Kanals. Das BM-verschobenen Maximum oberhalb der GaN-Bandkante ist noch klarer als bei der Probe BS210 zu erkennen. Vergleicht man die Schwellspannungen der drei Proben, stellt man die Verringerung von U_{S} mit sinkendem Al-Gehalt von $-3,4 \text{ V}$ (BS210 $x = 0,28$) über $-1,8 \text{ V}$ (MD1309 $x = 0,20$) auf $-0,9 \text{ V}$ (MD1310 $x = 0,15$) fest, trotz gleicher Schottkykontakte.

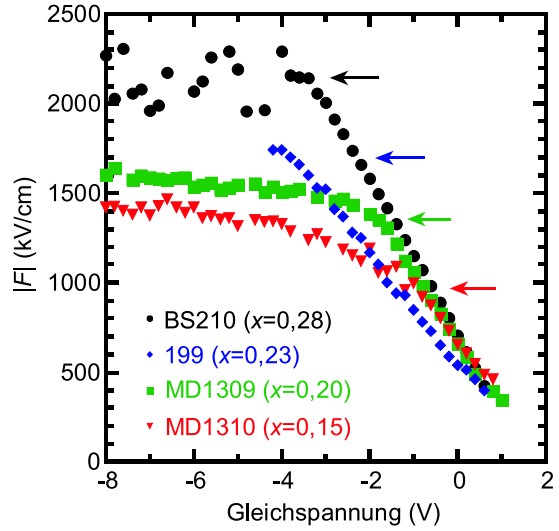
Nach der Verarmung des 2DEG, unterhalb der Schwellspannung, kann die optische Antwort der Struktur um die GaN-Bandkante nur durch die feldbeeinflusste DF beschrieben werden. Die ER-Karten in den Abb. 6.6(b) und (f) weisen eine Anzahl scharfer Maxima und Minima auf, welche sich scheinbar zu niedrigeren Energien verschieben, wenn U_{gl} abgesenkt wird. Der Effekt wird in Abschnitt 6.5 für beide Proben berechnet. An dieser Stelle sei nur erwähnt, dass die Ursache nicht in der Energieverschiebung bestimmter Übergänge, sondern in der Interferenz innerhalb der Raumladungzone (RLZ) bzw. der sog. „exzitonenfreien Randschicht“ liegt. Aus dem gleichen Grund erscheinen Strukturen unterhalb der Exzitonenresonanzen. Dies wird in Abschnitt 6.5 ebenfalls quantitativ bestätigt, andere Autoren erklären die Strukturen jedoch mit dem linearen elektrooptischen (auch Pockels-) Effekt [154].

In den AlGaIn-Spektren bei $U_{\text{gl}} = +1 \text{ V}$ [siehe Abb. 6.6(c) und (g)] erscheint wie bei der Probe BS210 jeweils ein einziges starkes Maximum, das den freien

Tab. 6.1: Aus der Position des Exzitonensignals in den ER-Spektren und den Exzitonenbindungsenergien nach Gl. (3.18) bestimmte Bandlücken. Die Ladungsträgerdichten bei einer angelegten Spannung von $U_{\text{gl}} = +1 \text{ V}$ wurden aus der Analyse der FKO gewonnen.

Probe	BS210	199	MD1309	MD1310
x	0,28	0,23	0,20	0,15
R_y (meV)	31,6	30,4	29,6	28,4
E_g (eV)	4,17	4,10	3,896	3,785
$N_{2\text{DEG}}(1 \text{ V}) (10^{12} \text{ cm}^{-2})$	9,7	5,4	5,0	3,6

Abb. 6.7: Elektrische Feldstärke in der AlGaN-Barriere, gewonnen aus der Analyse der FKO ($T = 5$ K) verschiedener Proben. Die Pfeile markieren die jeweiligen F_S .



Exzitonen gemeinsam zugeordnet wird. Die Bandlücken ($\Gamma_9^v - \Gamma_7^c$) werden aus den Positionen der Maxima und den entsprechenden R_y bestimmt, die Resultate sind in Tab. 6.1 aufgeführt. Die große Anzahl von FKO-Extrema beweist wieder die hohe Schichtgüte und die Homogenität der Feldstärke in der AlGaN-Schicht. Die Spannungsabhängigkeit der ER-Spektren ist qualitativ die gleiche wie bei der Probe BS210 [siehe Abb. 6.6(d) und (h)]. Die aus der Analyse der FKO bestimmten Ladungsträgerdichten bei $U_{gl} = 1$ V sind ebenfalls in Tab. 6.1 angegeben.

Abbildung 6.7 zeigt die aus den Analysen der FKO gewonnenen $F(U_{gl})$ -Charakteristiken bei $T = 5$ K der beiden Proben auf Si-Substrat im Vergleich zu den Proben BS210 und 199 mit höherem Al-Gehalt in der Barriere. Die Kurven unterscheiden sich zwar in ihren Verläufen und in den Werten von U_S , was auf die Unterschiede in den Parametern Hintergrunddotierung, Barrierendicke, Schottkykontaktmetall bzw. auf die zusätzliche GaN-Oberflächenschicht der Probe 199 zurückzuführen ist. Dennoch lassen sich aus den ER-Spektren die zugehörigen U_S bzw. aus Abb. 6.7 die jeweiligen F_S sehr genau bestimmen. Die Werte steigen monoton mit dem Al-Gehalt von 970 ($x = 0,15$) über 1350 ($x = 0,20$) und 1700 ($x = 0,23$, [155]) auf 2140 kV/cm ($x = 0,28$) an.

Mit diesen Daten kann nun überprüft werden, ob sich die theoretisch von Ambacher *et al.* [31] vorausgesagten Polarisationsdiskontinuitäten für verschiedene Al-Gehalte experimentell bestätigen lassen. Die Grundlage dafür ist wieder Gl. (6.1). Zusätzlich werden noch Werte für die Proben MD1311 ($x = 0,12$), 178 ($x = 0,20$) und 275 ($x = 0,22$) aufgeführt, welche sich auf $T = 295$ K beziehen.⁵ Die Ver-

⁵ Wie in Abschnitt 6.3 gezeigt wird, ist die Temperaturabhängigkeit von ΔP vernachlässigbar. Die Werte F_S der Proben 178, 199 und 275 wurden aus [155] entnommen.

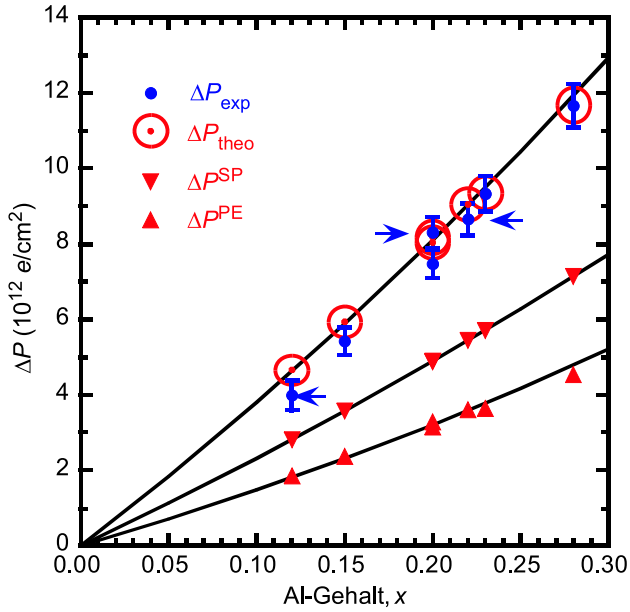


Abb. 6.8: Aus den jeweiligen F_S bestimmte experimentelle (ΔP_{exp}) theoretisch zu erwartende Polarisationsdiskontinuitäten (ΔP_{theo}) in Abhängigkeit vom Al-Gehalt. Die Pfeile markieren die bei $T = 295\text{ K}$ gewonnenen Daten. Die Unsicherheit für ΔP_{exp} ist durch Fehlerbalken und die Unsicherheit für ΔP_{theo} durch die Größe der Symbole markiert. Die Anteile der spontanen (ΔP^{SP}) und der piezoelektrischen Polarisation (ΔP^{PE}) an ΔP_{theo} sind ebenfalls eingezeichnet. Die durchgezogenen Linien stellen die Theoriewerte unter Annahme einer unverspannten GaN-Unterlage dar.

spannungswerte bei Raumtemperatur wurden direkt aus Röntgenmessungen der (2025)-Reflexe bestimmt. Abb. 6.8 fasst die gewonnenen Daten zusammen. Man stellt eine sehr gute Übereinstimmung der experimentellen ΔP_{exp} zu den theoretischen Werten ΔP_{theo} fest. Die Unsicherheiten beider Größen ergeben sich aus Messunsicherheiten bei der Bestimmung von x bzw. F_S . Im Mittel liegt das Verhältnis von ΔP_{exp} zu ΔP_{theo} bei 96%, was eine leichte Überschätzung der Polarisationsdiskontinuität durch die Theorie in [31] vermuten lässt.

6.3 Die Temperaturabhängigkeit der Polarisationsdiskontinuität

Aufgrund der Unterschiede in den thermischen Ausdehnungskoeffizienten zwischen AlGa_N und GaN bzw. zu dem verwendeten Substrat erwartet man eine probenspezifische Temperaturabhängigkeit der biaxialen Verspannung in den epitaktischen Schichten. Demzufolge müssen auch die jeweiligen Werte von P^{PE} unterschiedlich zu- oder abnehmen, so dass auch ΔP^{PE} eine Funktion der Temperatur ist. Die spontane Polarisation hängt linear vom zellinternen Parameter u ab [57]. Da die binären Verbindungen verschieden auf Temperaturänderungen ansprechen, ist auch eine Änderung von u bzw. P^{SP} und ΔP^{SP} mit der Temperatur denkbar.

Die Temperaturabhängigkeit der Polarisierung wird mit dem pyroelektrischen Koeffizienten

$$p = \frac{dP}{dT} \quad (6.3)$$

ausgedrückt. Die experimentelle Bestimmung dieser Größe ist mit einer relativ großen Unsicherheit behaftet. Meist wird p durch eine Kondensatoranordnung ermittelt, bei der ein dünner Film des zu untersuchenden Materials das Dielektrikum bildet und die Kondensatorspannung, welche einer Polarisationsladung entspricht, in Abhängigkeit von der Temperatur gemessen wird. Da eine Kondensatorplatte das (Hetero-)Substrat ist, ändert sich im Allgemeinen ϵ_{\parallel} mit der Temperatur. Außer dem Beitrag der spontanen Polarisierung wird bei dieser Methode auch ein piezoelektrischer Beitrag erzeugt. Für AlN wurden damit bei Raumtemperatur erstaunlich kleine Werte für p gefunden. Dubois und Muralt [156] geben für gesputterte AlN-Filme auf Pt/Ta/Si₃/SiO₂ einen Wert von $p = 4,8 \mu\text{Cm}^{-2}\text{K}^{-1}$ an. Fulyigin *et al.* [157] fanden mit einer Au/Ti/AlN/Si(Substrat)/Ti/Au-Anordnung p -Werte im Bereich von 6 bis $8 \mu\text{Cm}^{-2}\text{K}^{-1}$. Für GaN wurden bisher keine zuverlässigen Daten publiziert. Bykhovski *et al.* [158] schätzten aus experimentellen Daten $dF/dT \sim 10^4 \text{Vm}^{-1}\text{K}^{-1}$ ab, was $p \sim \epsilon_0 \epsilon_r 10^4 \text{Vm}^{-1}\text{K}^{-1} = 0,9 \mu\text{Cm}^{-2}\text{K}^{-1}$ entspricht. In einer anderen Publikation wird von einem 70-fach größeren Wert ausgegangen [159].

Im Folgenden werden theoretische Überlegungen zur Temperaturabhängigkeit von ΔP angestellt. Später werden diese im Zusammenhang mit den experimentellen Ergebnissen diskutiert.

6.3.1 Theorie

Die Änderung von ΔP^{PE} kann in einfacher Weise berechnet werden, wenn man die Gitterkonstanten aus Abschnitt 2.2 und die Polarisierung aus Abschnitt 2.3 zugrunde legt. Im Fall einer AlGa_xN-Schicht auf frei stehendem, unverspanntem GaN nimmt die Zugverspannung in der AlGa_xN-Schicht mit sinkender Temperatur ab, ΔP^{PE} verringert sich deshalb. Der Temperaturverlauf ist beispielhaft für $x = 0,2$ in Abb. 6.9 dargestellt. Die Änderung zwischen 295 und 5 K beträgt 0,9%, für kleinere bzw. größere Al-Gehalte sinkt bzw. steigt dieser Wert.

Werden die AlGa_xN/GaN-Heterostrukturen auf Fremdsubstraten abgeschieden, folgen die thermischen Ausdehnungen der dünnen epitaktischen Schichten denen der Substrate. Die Temperaturverläufe einer Al_{0,2}Ga_{0,8}N/GaN-Struktur auf einem Si-Substrat bzw. auf einem Saphirsubstrat sind ebenfalls in Abb. 6.9 gezeigt. Zur besseren Vergleichbarkeit wurde davon ausgegangen, dass die GaN-Schichten bei $T = 295 \text{K}$ gerade unverspannt ist. Die Kurve für Si-Substrat liegt bei niedrigen Temperaturen deutlich unter der für unverspanntes GaN. Die Ab-

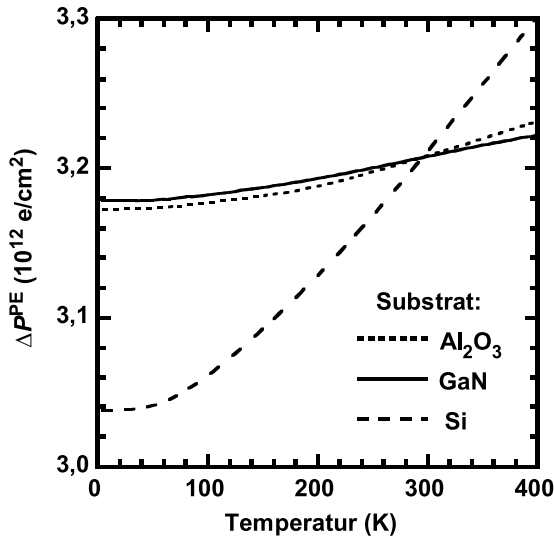


Abb. 6.9: Temperaturverlauf der Differenz der piezoelektrischen Polarisation an der $\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{N}/\text{GaN}$ -Grenzfläche für unverspanntes, frei stehendes GaN-Substrat und für Saphir- bzw. Si-Fremdsubstrate. Bei $T = 295\text{ K}$ wurde Relaxation des GaN-Kristallgitters angenommen.

weichung bei der Heterostruktur auf Saphirsubstrat fällt deutlich kleiner aus, da die Differenz der Ausdehnungskoeffizienten von AlGaN bzw. GaN zu Saphir im betrachteten Temperaturbereich nicht groß ist. Es verwundert zunächst, dass in beiden Fällen eine Verringerung von ΔP^{PE} vorausgesagt wird. Die Ursache ist der größere Ausdehnungskoeffizient von GaN gegenüber AlGaN. Hat das Substrat (wie z.B. Saphir) einen noch größeren Ausdehnungskoeffizienten, übt es bei Abkühlung einen biaxialen Druck auf das GaN aus, die Zugverspannung im AlGaN sinkt jedoch stärker, $P_{\text{AlGaN}}^{\text{PE}}$ geht stark zurück. Somit verringert sich ΔP^{PE} . Ist hingegen der Ausdehnungskoeffizient des Substrates (wie z.B. Silizium) kleiner als der des AlGaN, steigt die Zugverspannung im GaN stärker als im AlGaN. Es folgt die teilweise Angleichung der jeweiligen Werte von P^{PE} und damit ebenfalls eine Verringerung von ΔP^{PE} . Bei dem Si-Substrat beträgt der Effekt zwischen 295 und 5 K 5,6%, was sich unter Annahme einer konstanten spontanen Polarisation in einer Verringerung von ΔP um nur 2,1% niederschlagen würde. Theoretische Werte für die spontane Polarisation wurden nach Kenntnis des Autors bisher nicht publiziert.

6.3.2 Experiment

Ob es zwischen 5 K und 295 K zu signifikanten Änderungen im experimentell bestimmten ΔP kommt, wurde anhand von entsprechenden Messungen an den Proben MD1309 und MD1310 ermittelt. Exemplarisch sind die 295 K-Spektren der Probe MD1310 in Abb. 6.10 dargestellt [vgl. mit den Abb. 6.6(e) bis (h) für $T=5\text{ K}$]. Bei $T = 295\text{ K}$ treten die freien Exzitonen im Bereich der GaN-

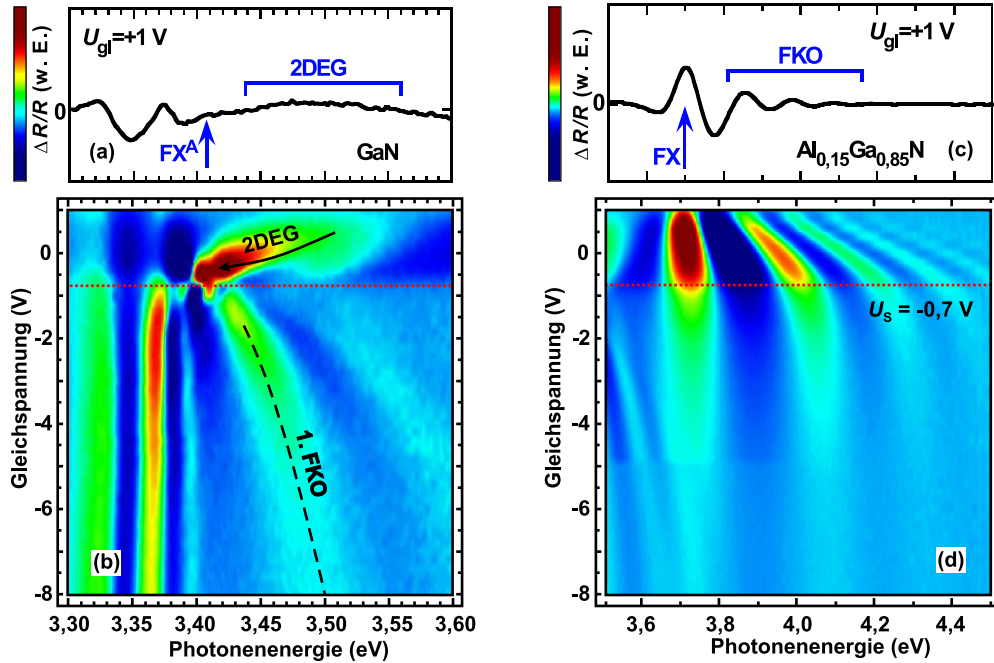


Abb. 6.10: ER-Spektren der Probe MD1310 ($x = 0,15$) aufgenommen bei $T = 295$ K. Spektren in der Umgebung der GaN bzw. der $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}$ -Bandkante für die angelegte Spannung von $U_{\text{gl}} = +1$ V sind in (a) und (c) dargestellt. Die ER-Karten sind in (b) und (d) abgebildet.

Bandkante zwar kaum noch in Erscheinung [siehe Abb. 6.10(a)]⁶ das 2DEG äußert sich jedoch weiterhin durch ein sehr starkes, BM-verschobenes Maximum, wie in Abb. 6.10(b) dargestellt ist. Damit kann ein U_{S} von $-0,7$ V eindeutig ermittelt werden. Im Bereich der AlGa_{0,85}N-Bandlücke [siehe Abb. 6.10(c)] erscheinen wieder das Exzitonenmaximum und darüber die Extrema der FKO in unveränderter Anzahl. Die Stärke des ER-Signals in Abb. 6.10(d) sinkt aber nicht mehr so abrupt, wenn U_{S} unterschritten wird. Es stellt sich die Frage, ob sich der Abstand der FKO-Extrema, und damit der Feldstärkeverlauf, mit der Temperatur verändert hat.

In Abb. 6.11 sind die aus den FKO bestimmten Spannungsverläufe $F(U_{\text{gl}})$ der beiden Proben für beide Temperaturen dargestellt. Vergleicht man die Feldstärken um $U_{\text{gl}} = 0$ V stellt man bei beiden Proben eine Verschiebung auf der Spannungsachse um ca. $0,2$ V fest, wenn die Temperatur auf 295 K erhöht wird. Dies entspricht einer Verringerung der effektiven Schottkybarrierenhöhe. Es ist bekannt, dass Φ_{B} mit $E_{\text{g}}(T)$ korreliert, siehe z.B. [160]. Dieser Anteil beträgt aber

⁶Die Übergangsenergie des FX^{A} -Exzitons wurde aus Lumineszenzspektren gewonnen und ist in diesem Diagramm mit einem Pfeil markiert.

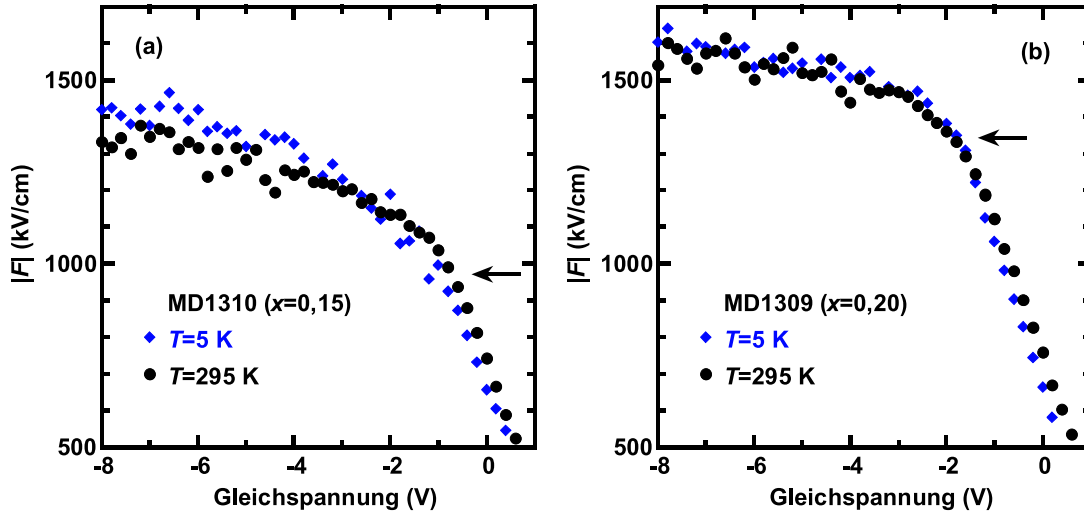


Abb. 6.11: Aus den FKO bestimmte Barrierenfeldstärken bei $T = 5$ K und 295 K für (a) die Probe MD1310 ($x = 0,15$) und (b) die Probe MD1309 ($x = 0,20$). Die Pfeile markieren die jeweiligen Schwellfeldstärken.

nur 61 mV. Es wäre darüber hinaus denkbar, dass sich infolge temperaturbedingter Umbesetzung von Defektzuständen an der Metall-Halbleiter-Grenzfläche die Barrierenhöhe weiter verringert. Dies kann im Modell der „metal induced gap states“ [160] diskutiert werden. Zukünftige Untersuchungen zu den Grenzflächeneigenschaften könnten hier aufschlussreiche Hinweise geben. Im Spannungsbereich $U_S \leq U_{gl} \leq 1$ V von Abb. 6.11(b) wird neben der Verschiebung auch eine Verkleinerung des Anstiegs in der $|F(U_{gl})|$ -Charakteristik beobachtet. Dies wird durch den erhöhten Stromfluss bei 295 K erklärt.

Trotz dieser Differenzen zwischen beiden Temperaturen werden im Rahmen der Messunsicherheit ($< 5\%$) keine Änderungen der jeweiligen F_S festgestellt, d.h. ΔP bleibt konstant. Zur gleichen Schlussfolgerung gelangten Lu *et al.* nach der temperaturabhängigen Bestimmung der 2DEG-Dichte einer $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}/\text{GaN}$ -Heterostruktur [161]. Wie oben gezeigt, ist der verspannungsinduzierte, piezoelektrische Beitrag zur Veränderung von ΔP im untersuchten Temperaturbereich sehr klein. Bei diesen beiden Proben kommt hinzu, dass die GaN-Kanalschicht (mutmaßlich durch den Einbau einer Tieftemperatur-Zwischenschicht) im untersuchten Temperaturbereich nicht der thermischen Ausdehnung des Si folgt [3] und somit die Verringerung von ΔP^{PE} vernachlässigbar ist. Daraus wird geschlossen, dass auch ΔP^{SP} im untersuchten Temperaturbereich für die Heterogrenze $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ mit $x < 0,2$ keiner signifikanten Änderung unterliegt.

6.4 Die Wirkung von Wasserstoff auf Pt/AlGaIn/GaN-Heterostrukturen

Abgesehen von den in Zukunft zu erwartenden Anwendungen der Gruppe-III-Nitride in Leucht- und Laserdioden und als HEMTs, werden zur Zeit sehr stark GaN-Schottkydioden und AlGaIn/GaN-HEMT-Strukturen im Hinblick auf ihre potenzielle Verwendung als chemische Sensoren untersucht. Die Empfindlichkeiten auf Wasserstoff (H_2 und D_2) [24, 143, 162–172], verschiedene gasförmige und in Flüssigkeiten gelöste Kohlenwasserstoffe (z.B. C_2H_2 , C_4H_{10} und Polystyrol) [162, 163, 168, 173, 174], gasförmige Oxide (z.B. CO, NO, NO_2) [162, 163] und auf Ionen in wässrigen Lösungen [162, 175–179] wurden kürzlich ermittelt. Es wurde gezeigt, dass HEMT-Strukturen sogar die Aufnahme der schwachen extrazellulären Aktionspotenziale biologischer Zellen gestatten [180, 181]. Hierbei ist von Vorteil, dass die AlGaIn-Oberfläche chemisch inert und biologisch kompatibel ist. Messungen der Abgase von Verbrennungsmotoren zeigten die Empfindlichkeit von Pt-kontaktierten AlGaIn/GaN-HEMTs gegenüber verschiedenen oxidierenden und reduzierenden Gasspezies [163]. Kohlenwasserstoffe dissoziieren bei hohen Temperaturen an katalytischen Metalloberflächen und können aufgrund ihrer reduzierenden Wirkung nachgewiesen werden. Die Materialien derartiger Sensoren müssen selbst bei Temperaturen von über $600^\circ C$ thermisch stabil sein. Diese Anforderung erfüllen die AlGaIn-Verbindungshalbleiter hervorragend.

Die Analyse H_2 -induzierter Veränderungen in den Strom-Spannungscharakteristiken von katalytisch kontaktierten Schottkydioden und HEMTs belegen zweifelsfrei die Abnahme von Φ_B . Die berichteten Maximaländerungen hängen von den experimentellen Bedingungen und von den Präparationsmethoden der Proben ab. Sie variieren zwischen einigen 10 mV [165–167, 169] und einigen 100 mV [143, 162–164]. Elastische Rückstreuexperimente wiesen auf das Vorhandensein von ca. einer Monolage Deuteriumatome ($\sim 10^{15} \text{ cm}^{-2}$) an der Pt/GaN-Grenzfläche hin. Dazu wurde die Probe D_2 -Gas ausgesetzt bis eine Sättigung des elektrischen Sensorsignals eintrat [164]. In dieser Studie konnte jedoch nicht geklärt werden, ob alle Deuteriumatome zum Sensorsignal beitragen.

Wie in den vorangegangenen Abschnitten gezeigt wurde, weisen ER-Experimente besonders empfindlich die internen elektrischen Felder nach. Nun wird die in Abschnitt 6.1.2 erarbeitete Methode zur Bestimmung der H-induzierten Änderung der totalen 2DEG-Dichte direkt unter der Gateelektrode eingesetzt. Bei den untersuchten Proben handelt es sich um MD1310 ($x = 0,15$) und MD1309 ($x = 0,20$). Da die Proben einige Wochen vor der Prozessierung des katalytischen Pt-Kontaktes unter Luftatmosphäre gelagert wurden, kann angenommen werden, dass sich eine natürliche Oxid-Zwischenschicht auf dem AlGaIn gebildet hat [142].

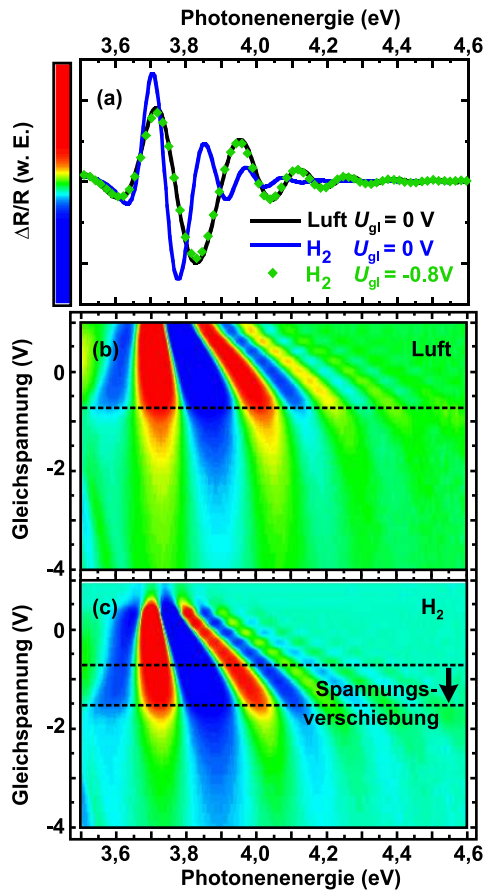


Abb. 6.12: (a) Vergleich der ER-Spektren der Probe MD1310 bei $T = 295$ K im Spektralbereich der $Al_{0,15}Ga_{0,85}N$ -Bandkante, aufgenommen unter verschiedenen Bedingungen. Die zugehörigen spannungsabhängigen, farbkodierten ER-Karten in Luft- und in H_2 -Atmosphäre sind in (b) bzw. (c) dargestellt.

Dies ist, wie Weidemann *et al.* [143] zeigten, die Grundvoraussetzung für eine hohe Wasserstoffempfindlichkeit derartiger Bauelemente.

Die ER-Experimente wurden bei Raumtemperatur durchgeführt. Die schwarze Kurve in Abb. 6.12(a) zeigt ein ER-Spektrum der Probe MD1310 in der Nähe der $Al_{0,15}Ga_{0,85}N$ -Bandkante, aufgenommen in Luftatmosphäre bei $U_{gl} = 0$ V. Oberhalb der Bandkante von 3,73 eV erscheinen ausgedehnte FKO bedingt durch die hohe Barrierenfeldstärke. Abb. 6.12(b) zeigt farbkodiert den Spannungsverlauf der ER-Spektren zwischen $U_{gl} = +1$ V und -4 V. Die gestrichelte Linie markiert die Schwellenspannung $U_S = -0,7$ V, bei der das 2DEG gerade vollständig verarmt ist. Nach dem Austausch der Luftatmosphäre in der Probenkammer durch 120 mbar reines H_2 wird qualitativ das gleiche Spannungsverhalten beobachtet, aber mit einer negativen Spannungsverschiebung aller aufgenommenen Spektren um den gleichen Betrag [vgl. Abb. 6.12(b) und (c)]. Als Beispiel ist in Abb. 6.12(a) die nahezu vollständige Übereinstimmung des Spektrums bei $U_{gl} = 0$ V in Luft

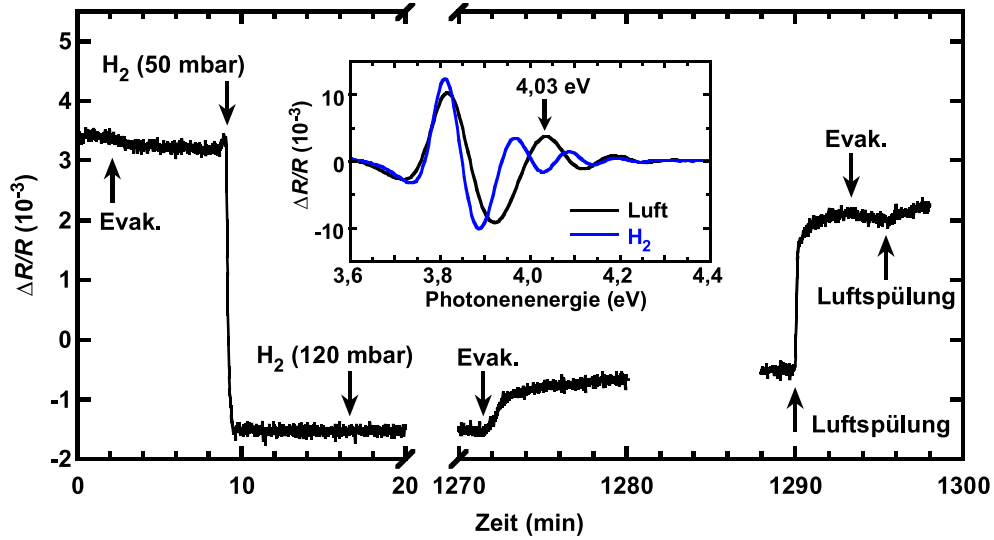


Abb. 6.13: Zeitliche Reaktion des ER-Signals der Probe MD1309 (bei $T = 295$ K, $\hbar\omega = 4,03$ eV, $U_{\text{gl}} = 0$ V) auf Wasserstoffeinwirkung, Vakuum (Evakuierung bis 10^{-3} mbar) und Spülen mit Luft. Die vollständigen Spektren vor und nach der Wasserstoffeinwirkung sind in der kleinen Abbildung gezeigt.

(schwarze Linie) mit dem bei $U_{\text{gl}} = -0,8$ V in H_2 -Atmosphäre (Symbole) dargestellt. Demnach beträgt die H-induzierte Verringerung von Φ_{B} ca. 0,8 V (die Spektren wurden alle 200 mV gemessen). Bei Spektren mit der gleichen angelegten Spannung, von z.B. 0 V, sinkt in Gegenwart von H_2 der Abstand der FKO-Extrema, damit sinkt auch $|F|$. Dies wird beim Vergleich der durchgezogenen Linien in Abb. 6.12(a) deutlich.

Abbildung 6.13 zeigt das zeitliche Verhalten des ER-Signals der Probe MD1309, detektiert bei einer festen Photonenergie von $\hbar\omega = 4,03$ eV und einer Spannung von $U_{\text{gl}} = 0$ V. Nach $t = 2$ min wurde die Probenkammer auf 10^{-3} mbar evakuiert. Durch Abtrennung des Pumpsystems und einen ersten Gaseinlass wurde nach $t = 9$ min ein H_2 -Partialdruck von 50 mbar hergestellt. Das resultierte in einem schnellen (ca. 7 s) Absinken des ER-Signals. Zugleich wurde der Abstand der FKO-Extrema verringert, was ebenfalls in Abb. 6.13 dargestellt ist (kleines Bild). Dies bedeutet eine Verringerung von Φ_{B} und eine beträchtliche Erhöhung von $N_{2\text{DEG}}$. Zu diesem Zeitpunkt war die Sättigung bereits eingetreten, was das trotz weiterer Erhöhung des H_2 -Partialdruckes (120 mbar, $t = 17$ min) konstante Signal beweist. Die erneute Evakuierung der Probenkammer nach $t = 1271$ min führte zur Verringerung von $N_{2\text{DEG}}$ wegen der H-Desorption von der Oberfläche des katalytischen Gates. Auf die Luftspülung nach $t = 1290$ min folgte eine weitere Verringerung von $N_{2\text{DEG}}$ aufgrund der Reaktion der verbliebenen H-Atome

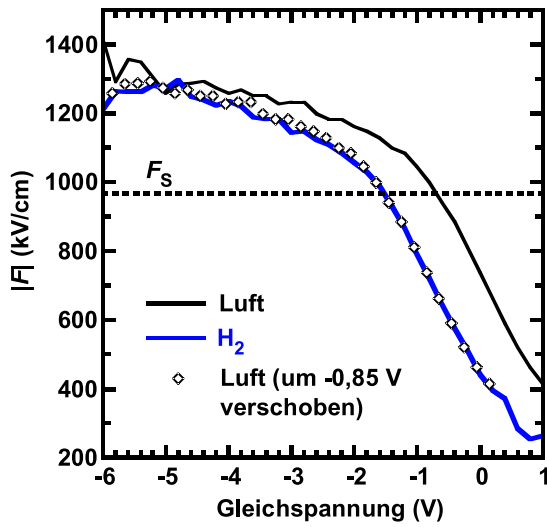


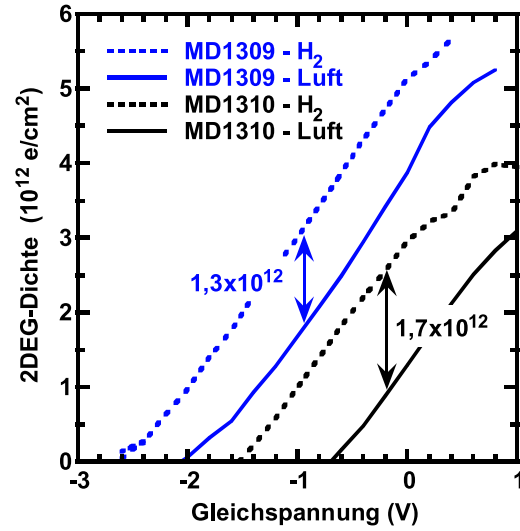
Abb. 6.14: Elektrische Feldstärke in der Barriere von Probe MD1310 als Funktion der angelegten Gleichspannung in Luft- und in H_2 -Atmosphäre. Die Kurve für Luft nach einer Verschiebung von $-0,85$ V demonstriert die ebenso große Verschiebung der Schottkybarrierenhöhe.

mit Luftsauerstoff [182]. Der Ausgangszustand wurde erst nach einigen Stunden wieder erreicht. Lange Rückstellzeiten wurden auch von Ali *et al.* [183] festgestellt, welche den zeitlichen Signalverlauf von Pt-kontaktierten GaN-Schottkydioden beobachteten. Beim Austausch der Mischatmosphäre (1 Vol.% H_2 in synthetischer Luft) durch synthetischer Luft beobachteten sie Rückstellzeiten von über einer Stunde bei $25^\circ C$, die jedoch mit Erhöhung der Temperatur deutlich abnahmen (15 s bei $T = 310^\circ C$).

Die vollständigen spannungsabhängigen Spektren vor und nach der Wasserstoffeinwirkung wurden wieder mit Gl. (4.6) ausgewertet, um aus der Analyse der FKO die AlGaIn-Barrierenfeldstärke zu bestimmen. Die schwarze Kurve in Abb. 6.14 zeigt die $F(U_{gl})$ -Abhängigkeit der Probe MD1310 in Luft. Oberhalb $U_S = -0,7$ V hängt F linear von U_{gl} ab. Dies entspricht wieder dem Verhalten des Plattenkondensators bestehend aus der Pt-Oberflächenelektrode, dem 2DEG und dem $Al_{0,15}Ga_{0,85}N$ -Dielektrikum. Der Verarmungsknick erscheint bei $F_S = 970$ kV/cm. Für die Spektren unter H_2 -Atmosphäre wird ein ähnliches Verhalten registriert (blaue Kurve). Die Kurve für Luft und die für H_2 fallen nach einer Verschiebung um $-0,85$ V zusammen (Symbole); d.h. F_S ist in beiden Fällen gleich. Da F_S nach Gl. (6.1) in direkter Beziehung zu ΔP steht, beweist dies, dass der Wasserstoff nur auf die Pt/AlGaIn-Grenzfläche einwirkt.

Nach Gl. (6.2) werden die jeweiligen 2DEG-Dichten aus $F(U_{gl})$ errechnet. Abbildung 6.15 fasst die gewonnenen Ergebnisse für die beiden Proben in Luft- und in H_2 -Atmosphäre zusammen. Die H_2 -Einwirkung führt zu einer signifikanten Erhöhung von N_{2DEG} um $1,3 \times 10^{12} e/cm^{-2}$ (MD1309) bzw. $1,7 \times 10^{12} e/cm^{-2}$ (MD1310). Im Gegensatz zu Messungen des Kanalwiderstandes in Feldeffekttran-

Abb. 6.15: 2DEG-Dichten der Proben MD1309 ($x = 0,20$) und MD1310 ($x = 0,15$) in Luft- und in H_2 -Atmosphäre als Funktion der angelegten Spannung.



sistoren, welche integrale Informationen über den gesamten Kanal ergeben, spiegelt die hier präsentierte Methode *ausschließlich* die direkt unter dem katalytischen Gatekontakt induzierte Erhöhung der Elektronendichte wider. Wegen der Ladungserhaltung geht mit der Erhöhung von N_{2DEG} eine dem Betrag nach gleich große Veränderung der ortsfesten Nettoladung an der Pt/AlGaIn-Grenzfläche einher.

Desweiteren ist die Verringerung der Schottkybarriere $\Delta\Phi_B$ gleich der Verschiebung auf der Spannungsachse zwischen den entsprechenden $F(U_{gl})$ - oder $N_{2DEG}(U_{gl})$ -Kurven. $\Delta\Phi_B$ beläuft sich auf jeweils $-0,65$ bzw. $-0,85$ V für die Probe MD1309 bzw. MD1310.⁷ Die leicht unterschiedlichen $\Delta\Phi_B$ -Werte der beiden Proben sind vermutlich durch unterschiedliche Oberflächenbedeckungen der natürlichen Oxidschicht oder Variationen der Pt-Dicke [183] verursacht.

$\Delta\Phi_B$ wird gewöhnlich in dem von Fogelberg *et al.* [184] entwickelten kinetischen Modell diskutiert. Molekularer Wasserstoff dissoziiert an der Oberfläche katalytischer Metalle und diffundiert dann sehr schnell zur Metall-Oxid-Grenzschicht. Dort finden die Wasserstoffatome eine bestimmte Dichte von Bindungsplätzen vor. Es wird angenommen, dass sich das anfänglich hohe Adsorptionspotenzial ($0,8$ V für Pd/SiO₂ [184]) linear mit der Belegung verringert bis alle Bindungsplätze besetzt sind und kein bindendes Potenzial mehr vorherrscht. Dann halten sich Adsorption und Desorption die Waage. Die Wasserstoffatome

⁷ $\Delta\Phi_B$ kann auch aus der H-induzierten Veränderung von F bei z.B. $U_{gl} = 0$ V und der Barrierendicke D abgeschätzt werden. Dies führt jedoch zu einem zu klein abgeschätzten Wert von $300 \text{ kV/cm} \times 22 \text{ nm} = 0,65$ V, da der Schwerpunkt der 2DEG-Volumendichte unter der Barrierengrenze, d.h. tiefer als 22 nm, liegt.

induzieren dort eine Dipolschicht, die mit einer Dipoldichte N_{Dip} belegt ist. Das Dipolmoment mit dem Betrag μ_{Dip} ist vom Oxid zum Metall orientiert, weshalb sich die Schottkybarriere um

$$\Delta\Phi_{\text{B}} = \frac{\mu_{\text{Dip}}N_{\text{Dip}}}{\varepsilon_0} \quad (6.4)$$

verringert. In der Sättigung, die in den hier dargestellten Experimenten erreicht wurde, beträgt N_{Dip} ca. 10^{15} cm^{-2} [164]. Mit $\Delta\Phi_{\text{B}} = -0,85 \text{ V}$ wird das Dipolmoment zu $\mu_{\text{Dip}} = 0,2 \text{ D}$ abgeschätzt,⁸ was kleiner als das der Pd/SiO₂-Grenzfläche mit $\mu_{\text{Dip}} = 2 \text{ D}$ ist [184]. Eriksson *et al.* [185] haben einige Metall-Oxid-Kombinationen, darunter auch Pt/SiO₂ und Pt/Al₂O₃, in C-V-Experimenten untersucht. Ihre Ergebnisse deuten im Gegensatz zur obigen Abschätzung auf höhere und ähnlich große Dipolmomente an allen Grenzflächen hin.

Es bleibt zu klären, ob alle adsorbierten Atome auch einen Dipol erzeugen, worin genau die Unterschiede zwischen verschiedenen Grenzflächen bestehen und welche Dipolmomente von anderen Gasen oder Flüssigkeiten induziert werden. Die elektro-optische Methode kann dabei ein wichtiges und genaues Werkzeug sein. Der Vorteil liegt in der Bestimmung lokaler Größen, d.h. nur die Fläche direkt unter dem Gate-Kontakt wird untersucht. Dies ist mit anderen elektrischen Methoden schwer möglich.

Eine weitere interessantes Thema ist der Sensormechanismus. Die starke Erhöhung von $N_{2\text{DEG}}$ muss durch eine H-induzierte Ladungsdichteänderung ΔN_{H} an der Pt/AlGaN-Grenzfläche kompensiert werden. Gleichzeitig sinkt die Schottkybarriere um $\Delta\Phi_{\text{B}}$. Welche der beiden letztgenannten Größen direkt von der H₂-Belegung abhängt, ist eine noch ungeklärte Fragestellung (beide Größen sind näherungsweise über die Barrierendicke durch $\Delta N_{\text{H}} = \Delta\Phi_{\text{B}}\varepsilon_0\varepsilon_{\text{r}}^{\text{AlGaN}}/eD$ verbunden).

⁸Das Dipolmoment wird in der Literatur üblicherweise in der *cgs*-Einheit „Debye“ angegeben, dabei ist $1 \text{ D} = 3,34 \times 10^{-30} \text{ Cm}$.

6.5 Die Modellierung feldabhängiger ER-Spektren

Die bisher dargestellte Interpretation bezog sich ausschließlich auf die Auswertung der Franz-Keldysh-artigen Oszillationen deutlich oberhalb der Bandlücke. Mit der Kenntnis der $F(U_{g1})$ -Abhängigkeit kann nun aber eine vollständige Spektrensimulation erfolgen unter Verwendung der in Kap. 3 berechneten dielektrischen Funktion.

Das dazu verwendete optische Modell enthält je nach der Spannung, für die das Spektrum berechnet wird, bis zu einige hundert Schichten. Für eine genaue und schnelle Berechnung wurde auf eine zuvor angelegte Datenbank mit den feldabhängigen DF zurückgegriffen. Die Erstellung dieser Datenbank wurde erst durch die numerisch effiziente und robuste DF-Berechnung des in dieser Arbeit entwickelten MATHEMATICA-Programms möglich. Die exzellente Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment untermauert die Genauigkeit der in den vorhergehenden Abschnitten dieses Kapitels dargestellten Resultate.

6.5.1 Vielschichtmodell

In Kapitel 4 wurde die Berechnung von ER-Spektren von Volumenhalbleitern beschrieben. Bei den in dieser Arbeit untersuchten Proben handelt es sich jedoch um epitaktische Schichtsysteme auf Fremdsubstraten. Hinzu kommt noch die Inhomogenität der Feldstärke in der GaN-RLZ, welche eine räumliche Variation der DF hervorruft. Dem muss in einer Simulation der optischen Eigenschaften Rechnung getragen werden. Aspnes und Frova [186] schlugen eine Mittelung von $\Delta\bar{\epsilon}$ über die Raumladungszone der Dicke $z_2 - z_1$ nach der Gleichung

$$\langle \Delta\bar{\epsilon} \rangle = \langle \epsilon_1 \rangle + i\langle \epsilon_2 \rangle = 2i\bar{k}_{\text{opt}} \int_{z_1}^{z_2} \Delta\bar{\epsilon}(z) e^{i2\bar{k}_{\text{opt}}z} dz \quad (6.5)$$

mit der Wellenzahl \bar{k}_{opt} [siehe Gl. (3.4)] vor. Diese Methode kann hier jedoch nicht angewandt werden, da als Voraussetzung die Seraphinkoeffizienten feld- und photonenergieunabhängig sein müssen (vgl. Abschnitt 4.2).

Deshalb ist das ER-Signal mit einem Vielschichtmodell [122, 187] zu berechnen. Dazu unterteilt man die Struktur in ein System planparalleler Schichten, welche durch eine (feldabhängige) DF charakterisiert sind. In der RLZ erfolgt die Abstufung der Feldstärke gemäß der Verarmungsnäherung linear mit dem Ort z über die gesamte RLZ-Weite z_{RLZ} . Der Maximalwert F_{GF} liegt an der AlGaIn/GaN-Grenzfläche vor. Als Abstufung wurde ein kleiner Wert von 2 kV/cm gewählt, um die scharfen Exzitonenmaxima, die vom Niedrigfeldbereich der RLZ

stammen, korrekt zu beschreiben. Die Größen F_{GF} und z_{RLZ} werden durch die angelegte Spannung U bestimmt:

$$z_{RLZ} = \sqrt{-\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_r}{eN_D^+}\varphi} \quad (6.6a)$$

$$F_{GF} = \frac{eN_D^+}{\varepsilon_0\varepsilon_r} z_{RLZ}, \quad (6.6b)$$

wobei das elektrostatische Potenzial an der AlGaIn/GaN-Grenzfläche $\varphi \simeq U - U_S - F_{GF}D$ noch den Potenzialabfall über der AlGaIn-Barriere (Dicke D) beinhaltet. N_D^+ ist die Konzentration ionisierter Donatoren.

Abbildung 6.16 stellt das Vielschichtmodell einer Struktur mit Pt-Schottkykontakt, AlGaIn-Barriere und GaN-Kanalschicht mit RLZ und Flachbandbereich dar, welche von oben durch ein umgebendes Medium und unten durch das Substrat begrenzt ist. Die optische Antwort dieses Schichtsystems wird mit Hilfe der Transfermatrixmethode berechnet, die sich aus den Stetigkeitsbedingungen für die Tangentialkomponenten des elektrischen und des magnetischen Feldstärkevektors an der Grenzfläche zweier Medien ergibt [99]. Die einzelnen Schichten mit den Indizes j sind durch ihre jeweiligen DFs und Dicken charakterisiert. In ihnen werden hin- (Index: +) und rücklaufende (Index: -) Wellen berücksichtigt. Der Einfluss

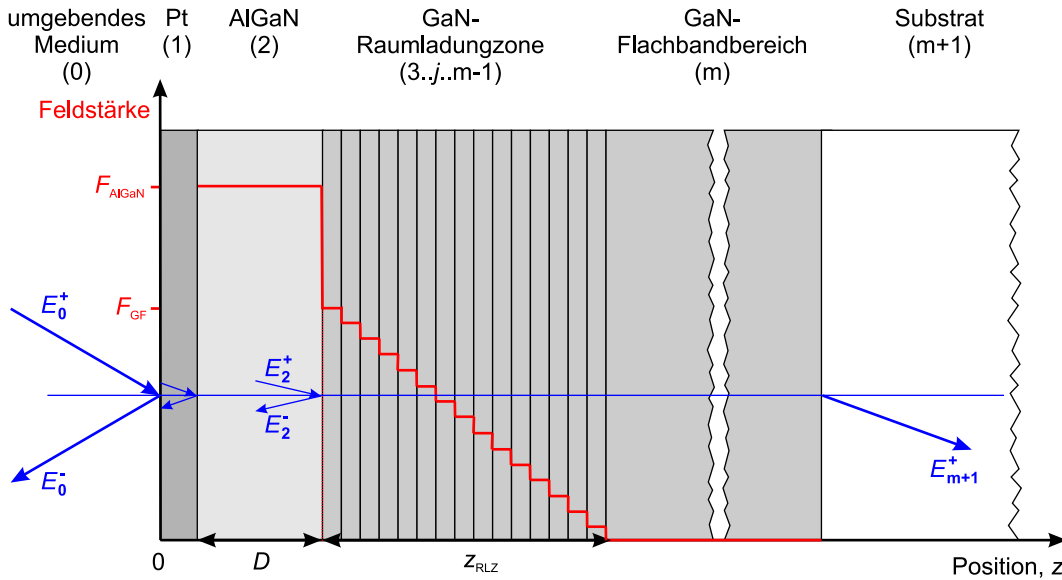


Abb. 6.16: Schichtmodell zur Berechnung der Reflektivität und des ER-Signals. Die Vektoren der Lichtfeldstärke in den jeweiligen Schichten sind blau dargestellt. Der modellhaft Verlauf des statischen elektrischen Feldes ist rot dargestellt.

des Schichtsystems auf die Amplitude E des elektrischen Feldstärkevektors wird in der Streumatrix \bar{S} zusammengefasst

$$\begin{pmatrix} E_0^+ \\ E_0^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{S}_{11} & \bar{S}_{12} \\ \bar{S}_{21} & \bar{S}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{m+1}^+ \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (6.7)$$

wobei die Elemente der Matrix durch die komplexen Fresnelkoeffizienten an jeder Grenzfläche bestimmt sind. Die Reflektivität ergibt sich aus

$$R = \left(\frac{E_0^-}{E_0^+} \right)^2 = \left| \frac{\bar{S}_{21}}{\bar{S}_{11}} \right|^2 \quad (6.8)$$

und das ER-Signal nach Gl. (4.2) aus der Differenz der Reflektivitäten zwischen den Spannungen $U = U_{\text{gl}} \pm U_{\text{mod}}$.

6.5.2 ER-Spektren der GaN-Kanalschicht

In diesem Abschnitt werden die experimentellen ER-Daten aus Abschnitt 6.2 modelliert. Mit dem Vielschichtmodell lassen sich die Spektren im Bereich der GaN-Bandkante unterhalb U_S berechnen. ER-Spektren im Spannungsbereich der 2DEG-Befüllung ($U_{\text{gl}} > U_S$) können mit dem gegenwärtigen DF-Modell nicht gezeigt werden, weil dazu eine DF-Rechnung notwendig wäre, welche die Effekte der Bandbefüllung, der Bandkantenrenormalisierung und der ladungsträgerdichte-abhängigen Exzitonenabschirmung einschließen müsste.

In dieser Arbeit wird für das Vielschichtmodell eine Hintergrunddotierung des GaN-Films von $N_D^+ = 1,2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ verwendet.⁹ Beispielsweise erhöht sich mit diesem Wert für die Probe MD1310 F_{GF} monoton von Null bei $U_{\text{gl}} = U_S = -0,9 \text{ V}$ bis 500 kV/cm bei $U_{\text{gl}} = -8,0 \text{ V}$, was $z_{\text{RLZ}} = 240 \text{ nm}$ entspricht. Beginnend mit $-0,2 \text{ V}$ unterhalb der Schwellspannung wurden Einzel- $\Delta R/R$ -Spektren der Proben MD1310 und MD1309 berechnet, die in den Abb. 6.17(a) und (c) dargestellt sind. Trotz der Feldinhomogenität erscheinen starke ER-Signale exakt bei den Photonenenergien, die den feldfreien FX^{A} - und FX^{C} -Resonanzenergien entsprechen. Die farbkodierten Karten beider Proben sind in den Abb. 6.17(b) und (d) dargestellt. Unterschiedliche Verbreiterungsenergien von $\Gamma = 2 \text{ meV}$ (MD1310) bzw. $\Gamma = 1 \text{ meV}$ (MD1309) waren notwendig, um die Besonderheiten der scheinbaren Verschiebungen der Maxima in den Abb. 6.6(b) und (f) vollständig wiederzugeben.

⁹Der hier verwendete Wert für N_D^+ ist größer als der tatsächlich vorhandene, sonst würde man derart scharfe Exzitonenresonanzen nicht im Experiment beobachten. Der zu große Wert ist aber zur korrekten Simulation der RLZ-Weite notwendig. Ein Spannungsabfall in der wegen $T = 5 \text{ K}$ hochreinen GaN-Schicht oder an den Kontakten ist realistischerweise anzunehmen, kann jedoch in der statischen Potenzialberechnung nicht berücksichtigt werden.

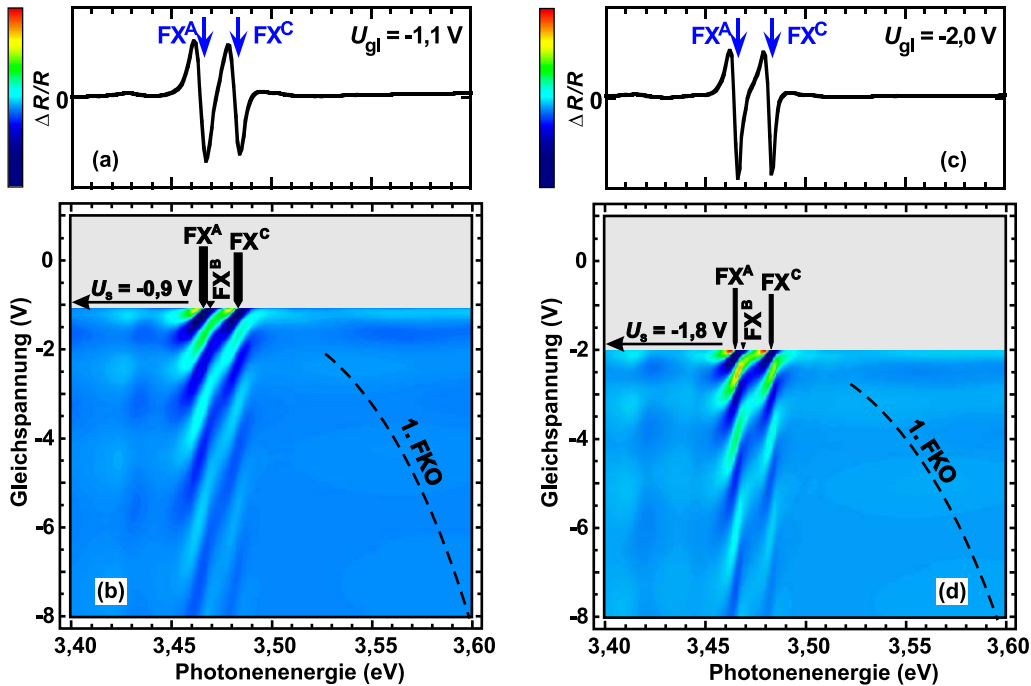


Abb. 6.17: Berechnete ER-Spektren der Probe MD1310 (a) und MD1309 (c) um die GaN-Bandlücke bei $T = 5$ K. Die Einzelspektren repräsentieren eine angelegte Spannung von $U_{gl} = U_S - 0,2$ V. Die entsprechenden farbkodierten ER-Karten sind in (b) bzw. (d) abgebildet. Die Energiepositionen der Nullfeld-FX^A, FX^B und FX^C-Resonanzen sind durch Pfeile gekennzeichnet. Ihre Breiten und Höhen entsprechen den Halbwertsbreiten (2Γ) bzw. den Oszillatorstärken. Das jeweils erste Maximum der Franz-Keldysh-Oszillationen ist durch die unterbrochenen Linien verdeutlicht.

Bei näherer Betrachtung von Abb. 6.17(d), welche mit der niedrigeren Verbreiterung berechnet wurde, offenbart sich die eindeutige Trennung der Signale, die FX^A bzw. FX^C zugeordnet werden. Dies bedeutet, dass keine kontinuierliche Verschiebung sondern eine optische Interferenz innerhalb der GaN-RLZ beobachtet wird.

Abbildung 6.18(a) macht diese Interpretation noch einmal durch den Vergleich mit den experimentellen Daten der Probe MD1310 deutlich. Hierzu wurden Spektren bei drei angelegten Spannungen herausgegriffen. Eine Veränderung von U_{gl} ruft in beiden Datensätzen nur eine optische Phasenverschiebung, d.h. die Inversion von Maxima und Minima, hervor. Zum Vergleich beträgt die Energieverschiebung bei einer Feldstärke von 300 kV/cm wie sie bei $U_{gl} = -3,8$ V an der AlGaIn/GaN-Heterogrenze vorliegt ca. 30 meV und die Verbreiterung ein Vielfaches davon (siehe Abb. 3.9 und 3.12). Die ER-Spektren weisen aber jeweils zwei scharfe Resonanzen auf. Daraus wird gefolgert, dass der Hauptbeitrag zum Signal

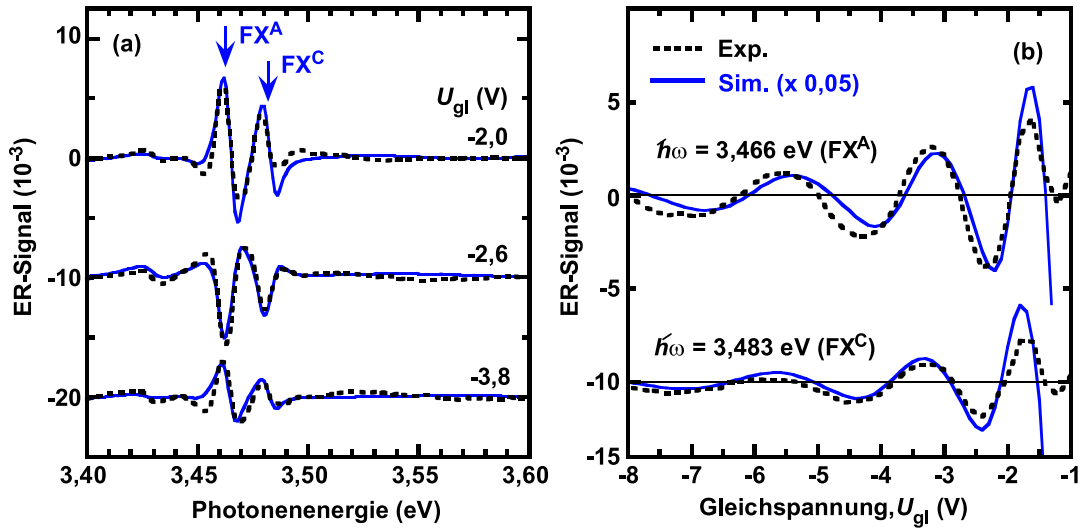


Abb. 6.18: Experimentelle und simulierte ER-Daten der Probe MD1310 bei $T = 5$ K. In (a) sind Spektren bei drei angelegten Spannungen dargestellt. Die Abhängigkeit des ER-Signals von der angelegten Spannung für zwei fixe Photonenergien wird in (b) gezeigt. Die Kurven wurden zur besseren Übersichtlichkeit vertikal verschoben.

durch die Modulation des nahezu feldfreien Bereiches an der Grenzfläche zwischen RLZ und Volumen erfolgt.

In Abb. 6.18(b) ist das ER-Signal der Probe MD1310 für zwei charakteristische Photonenergien als Funktion der angelegten Spannung aufgetragen. Der sich sowohl im Experiment als auch in der Simulation wiederholende Vorzeichenwechsel wird hier besonders gut sichtbar. Die Spannungsdifferenz benachbarter Extrema erhöht sich mit steigender Rückwärtsspannung, was auf die Abhängigkeit der RLZ-Weite von der Spannung hinweist, welche durch Gl. (6.6) gegeben ist. Die Phase des ER-Signals hat 2π durchlaufen, wenn sich z_{RLZ} um $\Delta z_{\text{RLZ}} = \lambda/2n$ verändert hat (λ und n sind die Wellenlänge und die Brechzahl). Das bedeutet, dass die Reflektivität und damit auch das ER-Signal als Funktion der angelegten Spannung oszillieren, was in dieser Weise experimentell beobachtet wird. Abgesehen von einem gemeinsamen Skalierungsfaktor von 0,05 für alle simulierten Spektren, welcher Effekte wie laterale Feldinhomogenitäten, Divergenz des Messlichtstrahls oder kapazitiven Ladungstransfer berücksichtigt, sind die berechneten Kurven in sehr guter Übereinstimmung mit den experimentellen Daten.

In den simulierten Spektren tritt als weiteres Merkmal das erste Maximum der FKO auf, was in den Abb. 6.17(b) und (d) durch unterbrochene Linien hervorgehoben ist. Wie auch im Experiment [siehe Abb. 6.6(b) und (f)] zu beobachten, verschiebt es sich zunehmender Rückwärtsspannung zu höheren Energien, was

einer Erhöhung der Grenzflächenfeldstärke F_{GF} entspricht. Im Experiment tritt das erste Maximum der FKO als ununterbrochener Höhenzug auf, während in der Simulation eine Hügelkette erscheint, die jedesmal, wenn die vollständige Rotation der FX^{A} - und FX^{C} -Resonanzen abgeschlossen ist, durch ein Tal unterbrochen wird. Diese Abweichung wird den gleichen Effekten zugeschrieben, welche den Skalierungsfaktor bestimmen. Wenn man die zusammengehörenden experimentellen und simulierten $\Delta R/R$ -Karten vergleicht, stellt man außerdem eine stärkere Spannungsabhängigkeit in der Simulation fest. Dies bedeutet, dass F_{GF} im verwendeten Potenzial-/Vielschichtmodell als zu groß angenommen wurde, was wiederum auf die schon besprochene Überbewertung der Hintergrunddotierung der vorliegenden Proben N_{D}^+ zurückzuführen ist.

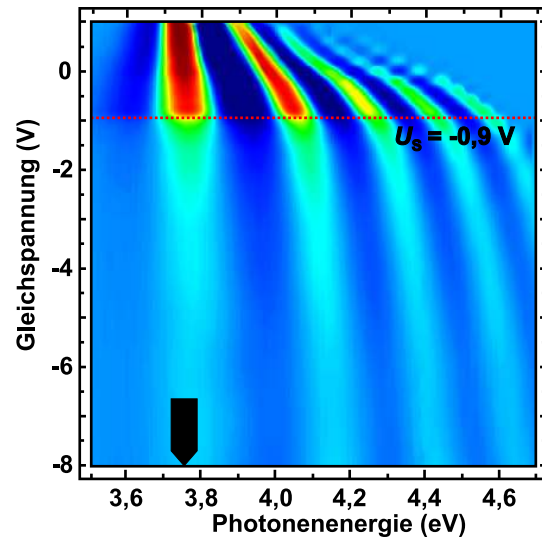
Der hier dargestellte Ansatz zur Datenanalyse ist bisher dadurch einzigartig, dass er die DF-Berechnung nach Blossey und das Vielschichtmodell integriert. Nur dadurch können die Interferenzerscheinungen in der RLZ *und* der Franz-Keldysh-Effekt geschlossen und in guter Übereinstimmung mit dem Experiment beschrieben werden.

6.5.3 ER-Spektren der AlGaN-Barrierenschicht

Die Ergebnisse für GaN haben gezeigt, dass die Einbeziehung der Elektron-Loch-Wechselwirkung wichtig für die vollständige quantitative Simulation von ER-Spektren ist. Konsequenterweise stellt sich nun die Frage, ob der selbe Ansatz zur Modellierung von Spektren in der Nähe der AlGaN-Bandkante geeignet ist. In den hier dargestellten Untersuchungen ist die niedrigste AlGaN-Feldstärke bereits dreimal größer als F_{ion} , was zwar die Beobachtung scharfer Exzitonresonanzen verhindert, dennoch sollten das Exzitonkontinuum oberhalb der Bandkante die charakteristische Feldabhängigkeit aufweisen [43]. Wie in Abschnitt 3.3.3 beschrieben, wurde die feldabhängige DF für $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}$ unter Berücksichtigung der Elektron-Loch-Wechselwirkung berechnet.

Zur Simulation des ER-Signals der Probe MD1310 in der Nähe der AlGaN-Bandkante wurde das zuvor für das GaN verwendete Vielschichtmodell leicht modifiziert. Eine räumlich konstante Barrierenfeldstärke F wurde für jede angelegte Spannung angenommen (siehe Abb. 6.7). Ein weiterer Eingangsparameter war die Modulationsfeldstärke, für die bei 2DEG-Befüllung ($U_{\text{gl}} \geq U_{\text{S}}$) $F_{\text{mod}} = U_{\text{mod}}/D$ gilt. Bei 2DEG-Verarmung ($U_{\text{gl}} < U_{\text{S}}$) wurde F_{mod} durch die Modulation von F_{GF} nach Gl. (6.6) approximiert. Die optischen Eigenschaften der GaN-Schicht wurden vereinfachend als konstant angenommen, wodurch man den kleinen Einfluss der Bandkantenbefüllung für $U_{\text{gl}} > U_{\text{S}}$ [188] bzw. die Feldabhängigkeit der GaN-DF für $U_{\text{gl}} < U_{\text{S}}$ vernachlässigt. Die in Abb. 6.19 farb-kodierten ER-Karten sind

Abb. 6.19: Farbkodierte ER-Karten für die Probe MD1310 in der Nähe der $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,15}\text{N}$ -Bandkante. Der Pfeil unten repräsentiert die Nullfeldexzitonenergie und ihre Halbwertsbreite (2Γ).



in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Daten aus Abb. 6.6(h). Die Verschiebung der FKO tritt klar hervor.

Wie in Abb. 6.20 dargestellt ist, werden die Werte des ER-Signals in der Nähe der feldfreien Exzitonengrundzustände (Pfeil) und der Abfall mit $\hbar\omega$ oberhalb E_g zu niedrig berechnet. Ein Grund dafür ist die Festlegung des Verbreiterungsparameters Γ auf konstant 35 meV, was die bestmögliche Anpassung an das experimentelle Spektrum darstellt. Für Photonenergien oberhalb E_g sollte sich Γ jedoch vergrößern, was zu einer stärkeren Dämpfung von $\Delta R/R$ führen würde. Im klassischen Franz-Keldysh-Bild wird dies durch die Zunahme der Ladungsträger-Streuerate bei größeren Photonenergien erklärt [125]. Die verstärkte Nichtparabolizität des Leitungsbandes mit größer werdender Photonenergie [189] resultiert in einer zusätzlichen Dämpfung [39]. Deswegen ist zu vermuten, dass die Einbeziehung dieser Effekte die Übereinstimmung zwischen Experiment und Theorie verbessern würde.

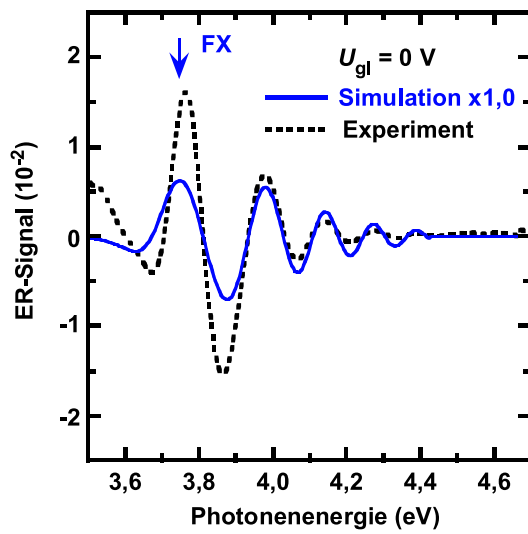


Abb. 6.20: Experimentelles und berechnetes ER-Spektrum der Probe MD1310 bei $T = 5 \text{ K}$ und $U_{\text{gl}} = 0 \text{ V}$ im Bereich der $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}$ -Bandkante.

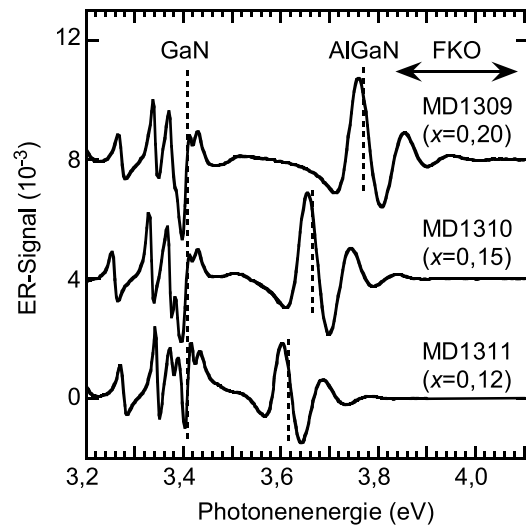
7 Unkontaktierte AlGaN/GaN-Heterostrukturen

Die Polarisationsdiskontinuität an der AlGaN/GaN-Grenzfläche wurde im Kapitel 6 betrachtet, welche zur Ausbildung eines 2DEGs führt. Dessen Dichte kann typischerweise bis zu einigen $10^{13} e/cm^2$ betragen und wird durch die Größen ΔP und F bedingt. Zur Dimensionierung von HEMT-Strukturen mit Hilfe der SPR müssen Annahmen über das Oberflächenpotenzial Φ_o bzw. die Dichte von Oberflächenzuständen und die Lage der Ionisationsenergie getroffen werden [190]. Die Schottkybarrierenhöhe kann aus ER-Messungen extrahiert werden [36, 37], während mit Kelvinsondenmikroskopie Φ_o der freien Oberfläche bestimmt wird [191, 192]. An unbehandelten Proben wurde der Richtungssinn der Vektoren \vec{P} und \vec{F} durch den Vergleich der Phaseninformationen des kontaktlos gemessenen ER-Signals mit denen der Photoreflexions- (PR-)Signals in der Umgebung der Bandkante bestimmt [193], wohingegen $|\vec{F}|$ durch die Auswertung der FKO in PR-Spektren ermittelt wurde [1, 2]. In Abschnitt 7.1 wird das letztgenannte Verfahren angewendet, um von $|F|$ mit Hilfe der SPR auf Φ_o und die Flächendichte der geladenen Oberflächenzustände σ_o zu schließen.

Da die meisten AlGaN/GaN-Heterostrukturen auf Fremdsubstraten abgeschieden werden, unterliegt die Verspannung und damit die piezoelektrische Polarisation P_{AlGaN}^{PE} einer Temperaturabhängigkeit. Für Saphirsubstrate wurde gezeigt, dass die beobachtete Abnahme von $|F|$ bei Verringerung der Temperatur mit der Abnahme von $|P_{AlGaN}^{PE}|$ erklärt werden kann [1]. In Abschnitt 7.2 wird untersucht, ob diese Relation auch für ähnliche Heterostrukturen auf Si(111)-Substrat gültig ist. Die mittels PR-Spektroskopie ermittelte $F(T)$ -Abhängigkeit wird im Zusammenhang mit der Schichtverspannung betrachtet.

Nitridheterostrukturen sind sehr attraktiv für Anwendungen als chemische und biologische Sensoren. Der Grund ist die chemische Stabilität und die Biokompatibilität ihrer Oberflächen, welche für die unterschiedlichsten (DNS-)Moleküle funktionalisiert wurden [153, 194, 195]. AlGaN/GaN-HEMTs mit offenem Gate wurden erfolgreich als ionensensitive Feldeffekttransistoren (ISFETs) eingesetzt, um in wässrigen Lösungen den pH -Wert zu messen [175, 176, 196] oder Halogenidionen zu detektieren [177]. Das Schlagen von Herzmuskelzellen, welche auf der

Abb. 7.1: PR-Spektren der Proben MD1309, MD1310 und MD1311 bei $T = 295\text{ K}$. Die die jeweiligen Bandabstände $\Gamma_7^c - \Gamma_9^v$ sind durch unterbrochene Linien hervorgehoben. Zur besseren Übersichtlichkeit wurden die Kurven vertikal verschoben.



Sensoroberfläche kultiviert wurden, konnte mit einem im Vergleich zu Si-basierten Bauelementen besseren Signal/Rausch-Verhältnis detektiert werden [180,181]. Mit Saphir als Substratmaterial eröffnet sich die Möglichkeit, biologische Prozesse auf der Transistoroberfläche gleichzeitig elektronisch *und* mikroskopisch zu detektieren. Ein weiteres Einsatzgebiet von ISFETs auf GaN-Basis ist die Detektion polarer Flüssigkeiten [196,197]. Dieser Sensormechanismus wird in Abschnitt 7.3 mit der PR-Spektroskopie genauer untersucht. Aus der Änderung von F nach der Benetzung der Heterostruktureoberfläche durch eine polare Flüssigkeit (Azeton) wird auf die dadurch induzierten Änderungen von Φ_o und σ_o geschlossen.

7.1 Photoreflexionsuntersuchungen bei Raumtemperatur

Die PR-Untersuchungen wurden an den Proben MD1309 bis MD1311 bei $T = 295\text{ K}$ durchgeführt. Die 325 nm-Linie eines HeCd-Lasers wurde zur Modulation der internen elektrischen Felder verwendet. Abbildung 7.1 zeigt die PR-Spektren der drei Proben. In der Nähe der GaN-Bandkanten (ca. 3,41 eV) werden ausgeprägte Strukturen beobachtet. Das Signal in diesem Spektralbereich ist wegen der Überlagerung Resonanzen der freien Exzitonen mit Interferenzoszillationen kompliziert. Knapp oberhalb der GaN-Bandlücken folgen jeweils Maxima, die durch Anregung in das befüllte GaN-Leitungsband verursacht werden (vgl. Abschnitt 6.1.2). Im Folgenden wird der hochenergetische Bereich der Spektren, der

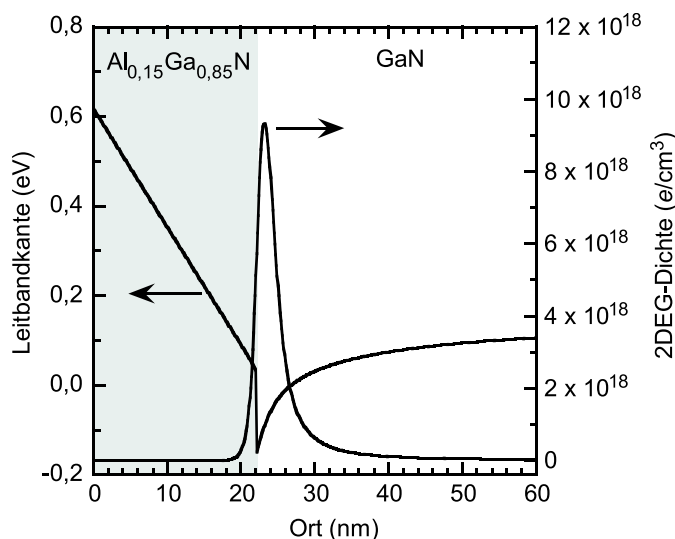


Abb. 7.2: Leitbandkanten- und Elektronendichteprofil für die Probe MD1310 mit einem Oberflächenpotenzial von $\Phi_0 = 0,62$ V. Die Referenzenergie ist das Fermi-niveau ($E_F = 0$).

durch die optischen Übergänge in den AlGaIn-Schichten dominiert wird, diskutiert. Der durch den Vergleich mit einem errechneten Spektrum ermittelte Bandabstand E_g zwischen dem Γ_7^c -Leitungsband und dem Γ_9^v -Valenzband ist im jeweiligen experimentellen Spektrum markiert. Oberhalb E_g werden deutliche FKO beobachtet. Interessanterweise ergibt die Analyse nach der Aspnes'schen Näherung [Gl. (4.6)] für alle drei Proben trotz der unterschiedlichen Al-Gehalte Feldstärkebeträge von ca. -270 kV/cm.

Die experimentell bestimmten Feldstärken werden nun zur Bestimmung der Oberflächenladung verwendet. Dazu wird in der SPR der experimentell gefundene Wert von ΔP (siehe Abschnitt 6.2) berücksichtigt. ΔP entspricht einer festen positiven Grenzflächenladung, die zur Ausbildung des 2DEG an der Heterogrenze führt. In der Rechnung wird Φ_0 so lange variiert bis der aus den PR-Spektren bestimmte Wert von F erreicht ist. Abbildung 7.2 zeigt den Bandkantenverlauf und das Elektronendichteprofil der Probe MD1310. Die für die Proben MD1309 und MD1310 ermittelten 2DEG-Flächenladungsdichten N_{2DEG} mit der freien Oberfläche (siehe Tab. 7.1) werden durch die Daten der Raumtemperatur-ER-Experimente mit der Pt-kontaktierten Oberfläche bestätigt (siehe Abb. 6.15), wenn man die Werte bei niedrigen Feldern ($U_{gl} = 1$ V) zugrunde legt. Da das 2DEG die Leitbandkante des GaN-Kanals am Fermi-niveau festhält, gestattet $\Phi_0 \sim F \times D = 0,59$ V eine untere Abschätzung des Oberflächenpotenzials. Die mit der SPR ermittelten Werte für die drei Proben sind ebenfalls in Tab. 7.1 aufgeführt. Die so ermittelten Werte für Φ_0 liegen zwischen 0,6 und 0,7 V und sind in guter Übereinstimmung zu Ergebnissen aus röntgenangeregter Photoelektronenspektroskopie (XPS) von Kočan *et al.* [198]. An Proben auf Saphirsubstrat

($x = 0,06$ bis $x = 0,10$) wurden ähnlich große Oberflächenpotenziale (0,5 bis 0,7 V) gefunden [2]. In diesen Untersuchungen konnte weder eine Korrelation mit dem Al-Gehalt noch mit D beobachtet werden. Es wurde aber sehr wohl festgestellt, dass die Polarität einen Einfluss hat: bei N-polaren GaN/AlGaN Proben lag Φ_o bei ca. 1 V. Chevtchenko *et al.* [192] untersuchten a -Ebenen-orientiertes GaN, bei dem die (0001)-Achse und der Polarisationsvektor in der Probenoberfläche lagen (siehe Abb. 2.1 der Wurtzit-Einheitszelle). Für diese unpolare Oberfläche ermittelten sie ein zur Oberfläche ansteigendes Potenzial von 1,1 V.

Unter der Annahme idealen undotierten Materials ist das elektrische Feld an der Oberfläche eine Folge der makroskopischen Polarisierung und der Oberflächenladung. Die Oberflächenladungsdichte σ_o kann aus der Stetigkeitsbedingung für die Verschiebungsdichte berechnet werden. Es gilt:

$$\varepsilon_0\varepsilon_r F = P + \sigma_o. \quad (7.1)$$

Die ermittelten σ_o -Werte sind positiv (siehe Tab. 7.1), sie kompensieren fast vollständig die Polarisationsladung. Andernfalls wären Felder von mehreren MV/cm vorhanden. Im vorliegenden Fall scheint ihre große Dichte das Oberflächenpotenzial, unabhängig vom Al-Gehalt der Barriere, bei ca. 0,6 V festzulegen. Die Ladungen sind nach Ibbetson *et al.* [82] gleichzeitig die Quelle der Elektronen an der AlGaN/GaN-Heterogrenze. Im Gegensatz dazu wurde bei N-polaren Heterostrukturen auf die Existenz von Oberflächenakzeptoren geschlossen [2].

Tab. 7.1: Gemessene und berechnete Parameter für die Proben MD1309, MD1310 und MD1311.

Probe	MD1309 $x = 0,20$	MD1310 $x = 0,15$	MD1311 $x = 0,12$
^a F (kV/cm)	-271	-266	-273
^b Φ_o (V)	0,68	0,62	0,64
^b $N_{2\text{DEG}}$ ($10^{12}e/\text{cm}^{-2}$)	5,9	4,0	3,1
^c P ($10^{12}e/\text{cm}^{-2}$)	-30,2	-27,9	-26,7
^d σ_o ($10^{12}e/\text{cm}^{-2}$)	+28,7	+26,4	+25,1

^aexperimentell bestimmt.

^bdurch Lösen der Schrödinger- und der Poissongleichung berechnet.

^cwie in [31] berechnet.

^dnach Gl. (7.1) berechnet.

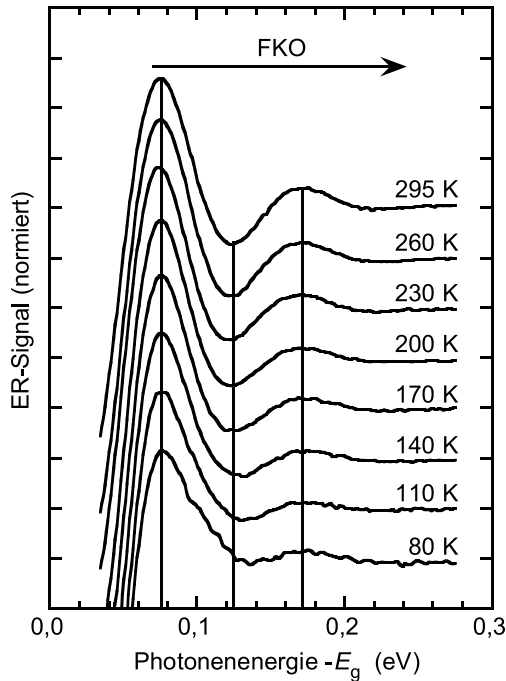


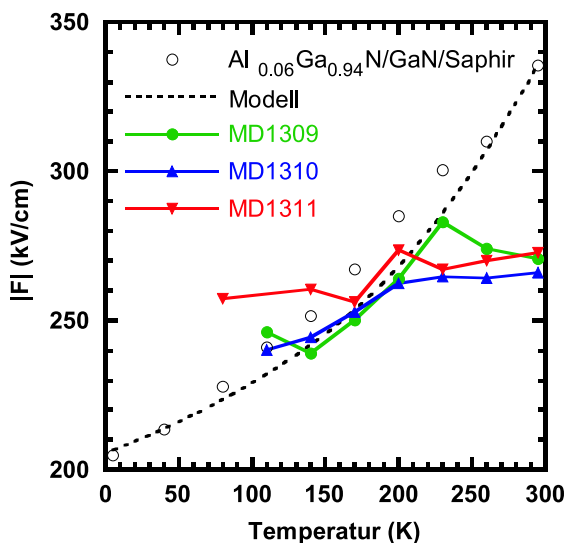
Abb. 7.3: PR-Spektren im Spektralbereich der FKO der Probe MD1310 bei verschiedenen Temperaturen. Zur besseren Vergleichbarkeit der Oszillationsperiode wurden die temperaturabhängige Bandlückenenergien von der Photonenenergie abgezogen. Die Spektren sind normiert und vertikal verschoben.

7.2 Temperaturabhängigkeit der Feldstärke in der AlGaN-Barriere

Die Temperaturabhängigkeit der Barrierenfeldstärke wird aus der Entwicklung der FKO mit T abgeleitet. Abbildung 7.3 zeigt Spektren der Probe MD1310 im Temperaturbereich von 80 K bis 295 K. Zur besseren Vergleichbarkeit der Oszillationen wurden alle Spektren um Wert von $E_g(T)$ verschoben.¹ Es werden eindeutig keine signifikanten Änderungen in der Periode und im Phasenwinkel beobachtet, was nach Gl. (4.6) auf ein konstantes elektrisches Feld in der Barriere hinweist. Dies steht im Gegensatz zu den Resultaten für AlGaN/GaN-Heterostrukturen auf Saphirsubstrat [1]. Dort hat sich $|F|$ bei Temperaturverringerung wesentlich verkleinert (siehe offenen Kreise in Abb. 7.4). Berücksichtigt man in Gl. (7.1) nur die Auswirkung von P auf F , erhält man mit $x = 0,09$, den Gl. (2.16), (2.15a), (2.6) und den Daten der Abb. 2.3(a) die unterbrochen dargestellte Kurve. Dass sie in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Werten ist, bedeutet eine Temperaturunabhängigkeit von σ_o . Die Ursache der Polarisationsänderung ist die Abnahme der Zugverspannung in der AlGaN-Barriere aufgrund des größeren

¹ E_g wurde aus der jeweiligen Übergangsenergie des freien Exzitons FX^A aus PLE-Experimenten bestimmt, siehe unten.

Abb. 7.4: Temperaturabhängigkeit des Feldstärkebeträge in den Al-GaN-Schichten der Proben MD1309 ($x = 0,20$), MD1310 ($x = 0,15$) und MD1311 ($x = 0,11$). Zum Vergleich sind Ergebnisse der Probe 072499B ($x = 0,06$) auf Saphirsubstrat (offene Kreise) zusammen mit dem modellhaften Verlauf (unterbrochene Kurve) eingezeichnet [1].



thermischen Ausdehnungskoeffizienten des Saphir-Substrates gegenüber den Nitridschichten.

Für die drei Proben auf Siliziumsubstrat sollte sich nach derselben Betrachtung $|F|$ bei Temperaturverringerung erhöhen. Es bleibt jedoch nahezu konstant bzw. sinkt leicht, siehe geschlossene Symbole in Abb. 7.4. Um dieses Verhalten zu verstehen, betrachtet man den Temperaturverlauf der biaxialen Verspannung. Ihn erhält man durch den Vergleich Übergangsenergien der freien Exzitonen homoepitaktischen Galliumnitrids von Thonke *et al.* [199] mit denen der GaN-Schichten der jeweiligen Heterostruktur. Dazu wurden Lumineszenzspektren bei verschiedenen Temperaturen aufgenommen. Bevor jedoch auf die Temperaturabhängigkeit eingegangen wird, sollen die Übergänge der freien Exzitonen identifiziert und von der Vielfalt der anderen strahlenden Übergänge unterschieden werden. In Abb. 7.5 ist ein für die drei Proben repräsentatives PL-Spektrum der Probe MD1309 bei $T = 5$ K dargestellt (durchgezogene Kurve). Die Struktur ist hochkomplex, da GaN typischerweise eine Vielzahl von Defekten aufweist, was unter anderem an der Gitterfehlanspassung zum Substrat liegt. Über dieses Thema wurde bereits mehrere Hundert Arbeiten publiziert, Reshchikov und Morkoç [200] veröffentlichten jüngst eine kritische Zusammenfassung. Die hohe natürliche Defektdichte in Nitridschichten schmälert ihre Verwertbarkeit für optoelektronische Bauelemente nicht [201]. Im niederenergetischen Spektralbereich erscheint das sog. Band der gelben Lumineszenz mit einer Breite von mehr als 400 meV. Bei vielen Proben ist es unstrukturiert. Im vorliegenden Fall treten jedoch drei Maxima auf. Es spielen vermutlich Interferenzeffekte bei der Auskopplung der Strahlung aus der Schicht

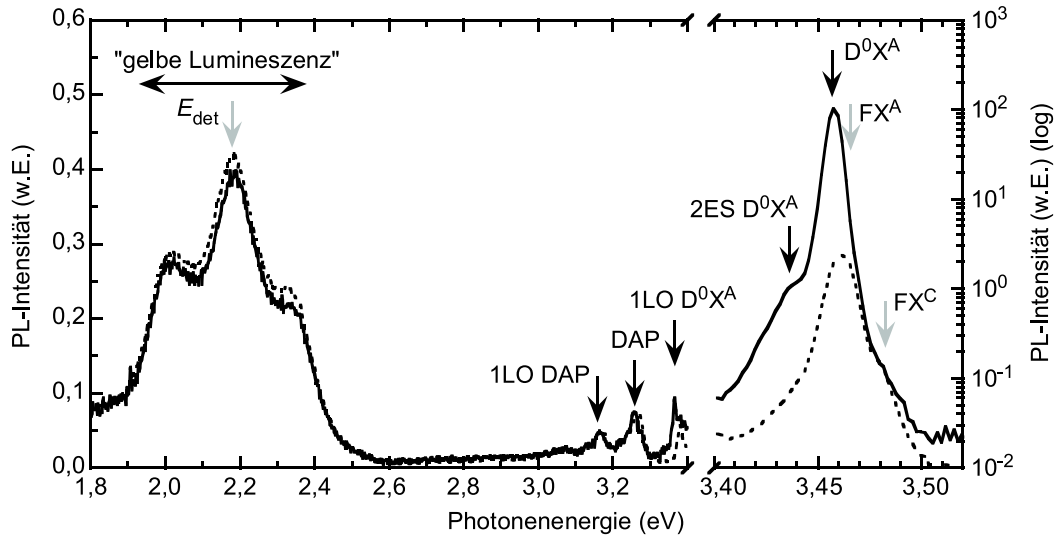
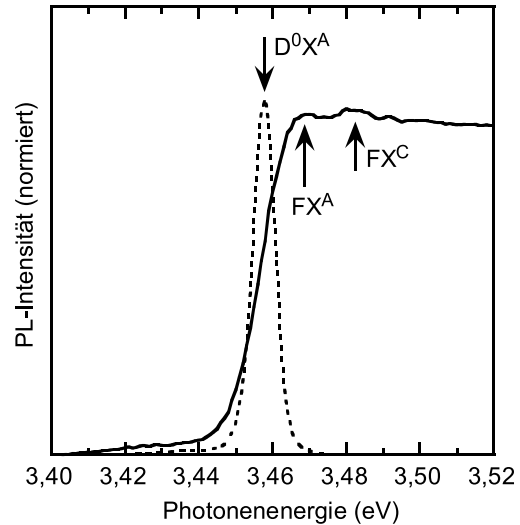


Abb. 7.5: PL-Spektrum der Probe MD1309 bei $T = 5$ K (durchgezogene Linie) und $T = 60$ K (unterbrochene Linie), aufgenommen mit der Anregungsenergie von $E_{\text{ex}} = 3,815$ eV. Der linke Teil des Diagramms ist linear, der rechte logarithmisch eingeteilt. Im rechten Teil ist das Signal um einige Größenordnungen stärker. Die Übergänge der „gelben Lumineszenz“, der Donator-Akzeptor-Paarübergänge (DAP), des störstellengebundenen Exzitonen (D^0X^A) und ihrer Phononenrepliken (1LO...) sind mit schwarzen Pfeilen markiert. Die grauen Pfeile markieren die PLE-Detektionsenergie E_{det} bzw. die in der PLE ermittelten Übergänge der freien Exzitonen.

eine Rolle. Dass der gleiche Abstand der Maxima in der Pseudo-DF (SE-Daten) dieser Probe beobachtet wurde, unterstützt diese These. Die Ursache der gelben Lumineszenz ist noch nicht vollkommen geklärt. Höchstwahrscheinlich sind V_{Ga} -Vakanzen beteiligt, welche in n-Typ-GaN sehr häufig sind [200]. Bei tiefen Temperaturen erscheinen nach Dingle und Ilegems [202] das Band der Donator-Akzeptor-Übergänge (DAP) zentriert bei 3,2571 eV und die dazugehörige Phononenreplik bei 3,1672 eV. Der erste Werte wird im vorliegenden Spektrum mit minimaler Abweichung (0,4 meV) reproduziert. Die Energie der longitudinalen Phononen ist verspannungsabhängig [203] und beträgt hier 93 meV. Der mit Abstand stärkste Übergang ist der des donatorgebundenen FX^A -Exzitons (D^0X^A) bei 3,4578 eV. Die Differenz von 22 meV zum Zwei-Elektronen-Satelliten (2ES D^0X^A) deutet auf Si_{Ga} -Defekte hin [204]. Die LO-Phononenreplik des störstellengebundenen Exzitons (1LO D^0X^A) wird bei 3,3645 eV beobachtet. Die Übergänge der freien Exzitonen, FX^A und FX^C , werden vom donatorgebundenen Übergang überdeckt. Ihre Übergangsenergien sind im Diagramm durch graue Pfeile markiert. Um die Verspannung der GaN-Schicht zu bestimmen, könnte man nun die Bindungsenergie des freien Exzitons FX^A an den Donator von 6 bis 7 meV [205], je nach Störstellen-

Abb. 7.6: PLE- und PL-Spektren der Probe MD1309 bei $T = 5\text{ K}$. Die Übergangsenergien der freien und der donatorgebundenen Exzitonen sind mit Pfeilen markiert.



typ, hinzuaddieren und mit den Daten von Thonke *et al.* und Gl. (2.25) berechnen. Zur Bewertung der Temperaturabhängigkeit ist diese Methode jedoch ungeeignet, weil der D^0X^A -Übergang wegen der geringen Bindungsenergie schon ab einer Temperatur von unter $T = 6\text{ meV}/k = 70\text{ K}$ sehr unwahrscheinlich ist. Dies wird im Spektrum bei 60 K beobachtet (siehe unterbrochene Kurve in Abb. 7.5). Außerdem findet eine scheinbare Verschiebung des Maximums zu höheren Energien statt, weil der FX^A -Übergang bei höheren Temperaturen dominiert.

Es ist methodisch einfacher, statt des komplizierten Emissionsspektrums absorptionsbezogene Spektren auszuwerten, in welchen Störstellen eine untergeordnete Rolle spielen. Aus diesem Grund wurden PLE-Spektren aufgenommen. Zur Detektion der optischen Übergänge wurde das Maximum der gelben Lumineszenz gewählt, da es gegenüber den anderen defektbedingten Übergängen stärker und außerdem nahezu temperaturunabhängig ist [200]. Der zum Signal beitragende Detektionsbereich war 24 meV und die Bandbreite des Anregungssystems 4 meV. Typische PL- und PLE-Spektren bei $T = 5\text{ K}$ sind in Abb. 7.6 abgebildet. Im Gegensatz zum PL-Spektrum beobachtet man im PLE-Spektrum die verhältnismäßig breiten Übergänge der freien Exzitonen und das Exzitonenkontinuum. Diese Zuordnung wird eindeutig durch die Photostrommessungen an der gleichen Probe belegt (siehe Abb. 3.10).

Die so bestimmten Energien der freien Exzitonen sind in Abb. 7.7 aufgetragen. Es existieren keine signifikanten Unterschiede zwischen den Proben. Zum Vergleich wurden auch die Positionen der exzitonen PL-Maxima eingezeichnet. Die scheinbare Verringerung der Übergangsenergie ist unterhalb von 60 K

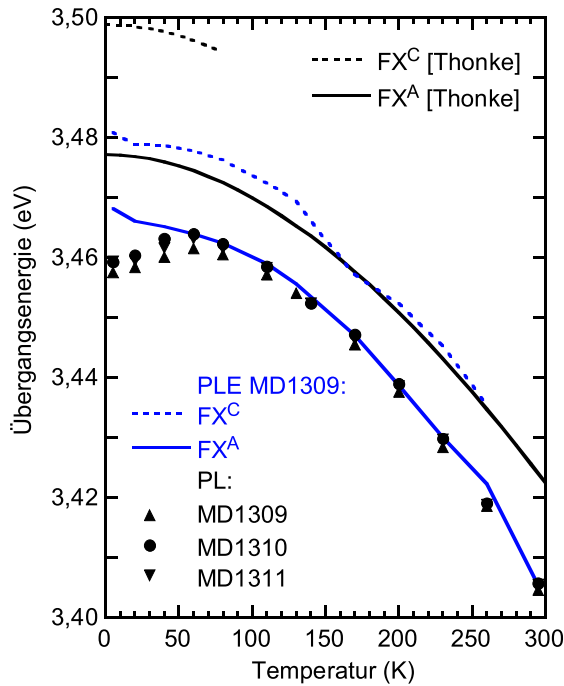


Abb. 7.7: Übergangsenergien der freien Exzitonen FX^A und FX^C aus PLE-Experimenten an der Probe MD1309 und Energien der PL-Maxima aller drei Proben für verschiedene Temperaturen. Zum Vergleich sind Daten von Thonke *et al.* [199] aus Reflektivitätsmessungen für homoepitaktisches GaN abgebildet.

zu groß, um ϵ_{\parallel} verlässlich aus PL-Daten zu bestimmen. Im gesamten betrachteten Temperaturbereich ist die Verschiebung der aus PLE-Spektren ermittelten Übergangsenergien zu denen von Thonke *et al.* annähernd gleich und beträgt durchschnittlich -16 meV (FX^A) und -19 meV (FX^C), was mit Gl. (2.25) eine positive Gitterdeformation von $\epsilon_{\parallel} = 19 \times 10^{-4}$ ergibt. Zu niedrigen Temperaturen kann man eine leichte Tendenz zur Verringerung von ϵ_{\parallel} feststellen. Dies bestätigt die Annahme $\sigma_o \approx konst.$ in Gl. (7.1). Unklar bleibt erst einmal, warum ϵ_{\parallel} und $|F|$ nicht bei Abkühlung der Proben zunehmen, was man wegen des kleinen thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Si (siehe Abb. 2.3) erwartet. Eine mögliche Erklärung ist, dass die Verwendung von Niedertemperatur-AlN-Zwischenschichten, wie in den hier vorliegenden Proben, die Verspannung der darüber gewachsenen Filme effektiv mindert [140] und dass solche Zwischenschichten zu einer partiellen mechanischen Entkopplung zu den benachbarten Schichten führen [141].

Zusammenfassend wird mit den dargestellten Resultaten das Modell, dass jede Änderung von $|F|$ in unkontaktierten Proben auf eine Änderung der Schicht-Polarisation zurückführt, untermauert. Die Unabhängigkeit der Oberflächenfeldstärke vom Al-Gehalt und der Temperatur weist auf eine große, temperaturunabhängige Dichte geladener Oberflächendonatoren hin. Durch sie wird das Fermi-niveau bei 0,6 bis 0,7 V unter der Leitbandkante festgehalten (siehe Tab. 7.1).

7.3 Polare Flüssigkeiten auf der Oberfläche

Der Einfluss der Bedeckung der Oberfläche einer AlGaIn/GaN-Heterostruktur mit der stark polaren Flüssigkeit Azeton (C_3H_6O , $\mu_{Dip} = 2,69 D$) wurde mittels PR-Spektroskopie bei Raumtemperatur untersucht. Die Probe 072499B ($x = 0,06$) wurde dazu in eine Küvette gebracht und nahe der Wand positioniert, so dass sich nach dem Einfüllen nur ein dünner Flüssigkeitsfilm zwischen Küvettenwand und Oberfläche befand. Dies war wegen des hohen Absorptionskoeffizienten von Azeton im ultravioletten Spektralbereich notwendig.

Abbildung 7.8(a) zeigt die jeweiligen ER-Spektren mit und ohne Azetonbedeckung. Der starke Anstieg des Signals bei bedeckter Oberfläche kann zwar auch auf die erhöhte Brechzahl des umgebenden Mediums zurückgeführt werden [siehe Gl. (4.3) und (4.5)], für die Aufweitung der FKO gibt es jedoch keine andere Erklärung als die Vergrößerung von $|F|$. Die FKO-Analyse ergibt $|F| = 336 \text{ kV/cm}$ in Luft und $|F| = 355 \text{ kV/cm}$ in Azeton.

Die SPR, siehe Abb. 7.8(b), ergibt damit eine Erhöhung des Oberflächenpotenzials um $\Delta\Phi_o = 33 \text{ mV}$. Im Helmholtzmodell wird diese Erhöhung durch die Ausrichtung der Azetonmoleküle auf der Nitrid-Oberfläche erklärt. Es gilt:

$$\Delta\Phi_o = \frac{N_{Dip}\mu_{Dip} \cos \theta}{\epsilon_0\epsilon_r}, \quad (7.2)$$

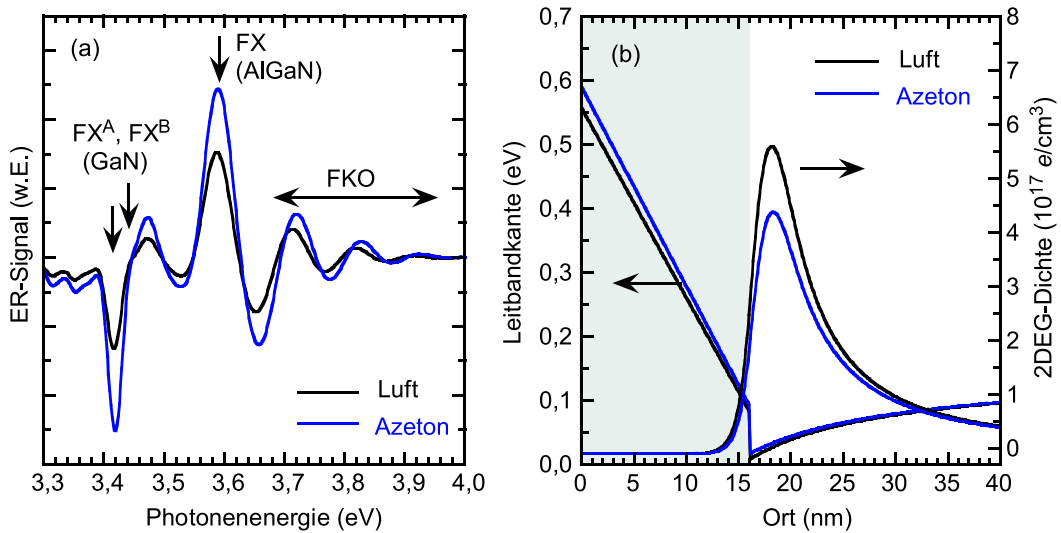


Abb. 7.8: (a) PR-Spektren der Probe 072499B ($x = 0,06$) in Luft und bei Bedeckung der Oberfläche mit Azeton. In (b) sind die dazugehörigen Ergebnisse der SP-Rechnung dargestellt.

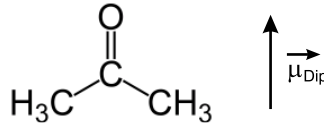


Abb. 7.9: (a) PR-Spektren der Probe 072499B ($x = 0,06$) in Luft und bei Bedeckung der Oberfläche mit Azeton. In (b) sind die dazugehörigen Ergebnisse der SP-Rechnung dargestellt.

wobei θ der Winkel zwischen dem Dipolmomentvektor und der Oberflächennormalen und $\varepsilon_r = 20,7$ [206] die statische Dielektrizitätskonstante des Azetons ist. Kokawa *et al.* [196] führten systematische Untersuchungen zum Sensorsignal von AlGaIn/GaN-ISFETs durch und bestätigten eine lineare Abhängigkeit des Source-Drain-Stroms vom $\mu_{\text{Dip}}/\varepsilon_r$ -Verhältnis. Mit der Massendichte ($0,7899 \text{ g/cm}^3$) und der molaren Masse ($58,08 \text{ g/mol}$) von Azeton lässt sich unter der Annahme, dass die Moleküle in allen drei Raumrichtungen die gleiche Ausdehnung besitzen, $N_{\text{Dip}} \sim 4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ abschätzen. Falls alle Dipole senkrecht auf der Oberfläche mit dieser Dichte stehen, kann mit Gl. 7.2 $\Delta\Phi_o \sim 200 \text{ mV}$ als Obergrenze angegeben werden kann. Dieses Ergebnis ist wesentlich größer, als der experimentellen Wert von 33 mV . Der erste Grund dafür ist, dass das Azetonmolekül (siehe Abb. 7.9) senkrecht zum Dipolmoment eine größere Ausdehnung als parallel dazu besitzt. Zweitens werden sich nicht alle Moleküle senkrecht auf der Oberfläche anlagern.

In einer alternativen Interpretation reduzieren die Azetonmoleküle nach Gl. (7.1) die Ladung an der Oberfläche um $\Delta\sigma_o = 0,1 \times 10^{12} \text{ e/cm}^2$. Da die Ladungsneutralität erfüllt werden muss, verringert sich $N_{2\text{DEG}}$ um den gleichen Betrag. Dieses Ergebnis wird durch die SPR reproduziert, in der Ladungsneutralität nicht erzwungen wurde. Zu ähnlichen Schlussfolgerungen gelangten auch Neuberger *et al.* [197], die eine Verringerung des Source-Drain-Stromes in HEMTs feststellten, wenn das offene Gate verschiedenen polaren Flüssigkeiten ausgesetzt wird. Jedoch konnte in dieser Arbeit nicht wie hier zwischen einem Mobilitäts- bzw. einem Elektronendichteeffekt unterschieden werden.

8 Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit behandelt die elektronischen Materialeigenschaften von AlGaN/GaN-Heterostrukturen. Die Auswertung optischer Spektren mit komplexen Modellen ermöglichte es, den bisherige Kenntnisstand um folgende Punkte zu erweitern:

- Der wichtigste Befund ist die erstmalige zuverlässige, experimentelle Bestätigung des in [31,57] theoretisch vorausgesagten Verlaufes der Polarisationsdiskontinuität ΔP an der AlGaN/GaN-Heterogrenze in Abhängigkeit vom Al-Gehalt.
- ΔP ist im Bereich von 5 K bis Raumtemperatur konstant.
- Ein zur Bestimmung von ΔP geeignetes Verfahren basiert auf der Auswertung von ER-Spektren und nutzt die spezifische Abhängigkeit der AlGaN-Schichtfeldstärke von der angelegten elektrischen Spannung. In dieser Arbeit wurde es konsequent weiterentwickelt und übertrifft so alle alternativen Methoden in der Genauigkeit.
- Die etablierten Analysemethoden für ER-Spektren, welche für schmallückige Halbleiter gültig sind, müssen vor der Anwendung an AlGaN und GaN kritisch hinterfragt werden. In unmittelbarer Nähe zur Bandkante kann man das ER-Spektrum nicht mit Seraphinkoeffizienten beschreiben. Mit der Analyse der FKO oberhalb der Bandkante nach Aspnes erhält man jedoch die korrekten Feldstärkebeträge.
- Optische und insbesondere ER-Spektren von Gruppe-III-Nitridschichten lassen sich nur vollständig durch Berücksichtigung der Exzitonen im elektrischen Feld beschreiben. Dazu wurde in dieser Arbeit ein von Blossey vorgeschlagenes Modell [42] auf die Nitride angewandt und in einer Software umgesetzt. Der dargestellte Ansatz zur Spektrensimulation ist dadurch einzigartig, dass man mit ihm Exzitonen in inhomogenen elektrischen Feldern quantitativ analysieren kann. Die gute Übereinstimmung von berechneten und experimentellen ER-Spektren bestätigt die verwendete Analysemethode für ER- und PR-Spektren und bekräftigt die Zuverlässigkeit der hiermit bestimmten Materialgrößen.

- Im Blossmodell folgen die energetische Position der Exzitonenhauptresonanz und deren spektrale Breite näherungsweise einer linearen Abhängigkeit von der elektrischen Feldstärke.
- In Pt-kontaktierten AlGaIn/GaN-Heterostrukturen, die als chemische Sensoren einem ausreichendem Wasserstoffangebot ausgesetzt werden, erhöht sich die Dichte des 2DEG um einige 10^{12} e/cm² und die Schottkybarriere verringert sich um bis zu 0,85 V.
- Das Potenzial der freien, unkontaktierten AlGaIn-Oberfläche liegt zwischen 0,6 und 0,7 V. Es ist wie die AlGaIn-Schichtfeldstärke unabhängig von der Temperatur und dem Al-Gehalt. Daraus wurde auf eine große, temperaturunabhängige Dichte geladener Oberflächendonatoren geschlossen.
- Das Potenzial und die Nettoladung an der freien AlGaIn-Oberfläche wird durch Benetzung mit einer polaren Flüssigkeit wie Azeton geändert.

Nach Meinung des Autors sind die folgenden Themen interessante und wichtige zukünftige Forschungsaufgaben: Parametrisierung der DF unterhalb der Bandlücke zur vereinfachten Dimensionierung optoelektronischer Bauelemente; Erweiterung des DF-Modells auf mehrere Valenzbänder z.B. mit der Methode der Green'schen Funktionen nach Aronov und Iosevich [207]; Experimentelle Bestimmung von ΔP anderer Materialpaarungen; Untersuchung der Schichtfeldstärke von kontaktierten und unkontaktierten Heterostrukturen bei hohen Temperaturen; Klärung der Ursache der Abweichung in den feldinduzierten Resonanzverschiebungen zwischen Photostrom- und Absorptionsspektren, wie sie z.B. auch in [130] berichtet wurde; Erweiterung des DF-Modells um die Effekte der Bandbefüllung und Bandkantenrenormierung zur Simulation von ER-Spektren mit ausgebildetem 2DEG an der AlGaIn/GaN-Heterogrenze (z.B. in Anlehnung an [37]); Klärung der Frage ob das in den Abschnitten 6.4 und 7.3 beobachtete Sensorverhalten primär das elektrostatische Potenzial oder die Flächenladung beeinflusst.

A Anhang

Simulationsparameter der dielektrischen Funktion

Tab. A.1: Parameter zur Berechnung der dielektrischen Funktion von GaN und $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}$ unter Zugverspannung und bei einer Temperatur von $T = 5$ K.

	GaN	$\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}$
E_g (eV)	3,491	3,785
$E_{p\perp}$ (eV)	20,6	22,5
f_A	1,0 ^a	1
f_B	0,1 ^a	0
f_C	0,9 ^a	1
μ (m_0)	0,197 ^b	0,212 ^b
ε_r	10,4 ^c	10,1 ^{c,d}
ε_∞	5,18 ^e	5,02 ^e
R_y (meV)	25 ^f	33
F_{ion} (kV/cm)	89,5	112,2
Γ (meV)	2	40

^a aus [90].

^b aus [105].

^c aus [106].

^d aus [150].

^e aus [108].

^f aus [92].

Literaturverzeichnis

- [1] A.T. Winzer, R. Goldhahn, C. Buchheim, O. Ambacher, A. Link, M. Stutzmann, Y. Smorchkova, U. K. Mishra, J. S. Speck, *Photoreflectance Studies of N- and Ga-face AlGa_N/Ga_N Heterostructures Confining a Polarisation Induced 2DEG*, Physica Status Solidi B **240**, 380 (2003).
- [2] C. Buchheim, A.T. Winzer, R. Goldhahn, G. Gobsch, O. Ambacher, A. Link, M. Eickhoff, M. Stutzmann, *Photoreflectance studies of (Al)Ga- and N-face AlGa_N/Ga_N heterostructures*, Thin Solid Films **450**, 155 (2004).
- [3] A. T. Winzer, R. Goldhahn, G. Gobsch, A. Dadgar, H. Witte, A. Krtschil, A. Krost, *Temperature dependence of the built-in electric field strength of AlGa_N/Ga_N heterostructures on Si(111) substrate*, Superlatt. Microstruct. **36**, 693 (2004).
- [4] R. Goldhahn, A.T. Winzer, V. Cimalla, O. Ambacher, C. Cobet, W. Richter, N. Esser, J. Furthmüller, F. Bechstedt, H. Lu, W.J. Schaff, *Anisotropy of the Dielectric Function for wurtzite InN*, Superlatt. Microstruct. **36**, 591 (2004).
- [5] A.T. Winzer, R. Goldhahn, G. Gobsch, A. Link, M. Eickhoff, U. Rossow, A. Hangleiter, *Determination of the polarization discontinuity at the Al-Ga_N/Ga_N interface by electroreflectance spectroscopy*, Appl. Phys. Lett. **86**, 181912 (2005).
- [6] A. T. Winzer, R. Goldhahn, G. Gobsch, A. Dadgar, A. Krost, O. Weidemann, M. Stutzmann, M. Eickhoff, *Electroreflectance spectroscopy of Pt/AlGa_N/Ga_N heterostructures exposed to gaseous hydrogen*, Appl. Phys. Lett. **88**, 024101 (2006).
- [7] R. Goldhahn, P. Schley, A.T. Winzer, G. Gobsch, V. Cimalla, O. Ambacher, C. Rakel, M. Cobet, N. Esser, H. Lu, W.J. Schaff, *Detailed analysis of the dielectric function for wurtzite InN and In-rich InAlN alloys*, Physica Status Solidi A **203**, 42 (2006).

- [8] R. Goldhahn, P. Schley, A.T. Winzer, C. Rakel, M. Cobet, N. Esser, H. Lu, W.J. Schaff, *Critical points of the band structure and valence band ordering at the Γ point of wurtzite InN*, J. Cryst. Growth **288**, 273 (2006).
- [9] P. Schley, R. Goldhahn, A.T. Winzer, G. Gobsch, V. Cimalla, O. Ambacher, M. Rakel, C. Cobet, N. Esser, H. Lu, W.J. Schaff, *Transition energies and Stokes shift analysis for In-rich InGaN alloys*, Physica Status Solidi B **243**, 1572 (2006).
- [10] R. Goldhahn, P. Schley, A.T. Winzer, M. Rakel, C. Cobet, N. Esser, H. Lu, W. J. Schaff, *Transition energies and bowing parameters for In-rich InGaN and InAlN alloys*, in K. Godehusen (Hg.), *BESSY Highlights 2005: Annual Report*, 153 (Berliner Elektronenspeicherring-Gesellschaft für Synchrotronstrahlung m.b.H, Berlin, 2006).
- [11] C. Buchheim, R. Goldhahn, A. T. Winzer, C. Cobet, M. Rakel, N. Esser, U. Rossow, D. Fuhrmann, A. Hangleiter, O. Ambacher, *Critical points of the bandstructure of AlN/GaN superlattices investigated by spectroscopic ellipsometry and modulation spectroscopy*, Physica Status Solidi C **3**, 2009 (2006).
- [12] A. T. Winzer, G. Gobsch, R. Goldhahn, D. Fuhrmann, A. Hangleiter, A. Dadgar, A. Krost, *Influence of excitons and electric fields on the dielectric function of GaN: Theory and Experiment*, Phys. Rev. B **74**, 125207 (2006).
- [13] C. Buchheim, R. Goldhahn, A.T. Winzer, G. Gobsch, U. Rossow, D. Fuhrmann, A. Hangleiter, F. Furtmayr, M. Eickhoff, *Stark shift of interband transitions in AlN/GaN superlattices*, Appl. Phys. Lett. **90**, 241906 (2007).
- [14] P. Schley, R. Goldhahn, A. T. Winzer, G. Gobsch, V. Cimalla, O. Ambacher, H. Lu, W. J. Schaff, M. Kurouchi, Y. Nanishi, M. Rakel, C. Cobet, N. Esser, *Dielectric function and Van Hove singularities for In-rich $In_xGa_{1-x}N$ alloys: Comparison of N- and metal-face materials*, Phys. Rev. B **75**, 205204 (2007).
- [15] R. Goldhahn, A. T. Winzer, A. Dadgar, A. Krost, O. Weidemann, M. Eickhoff (Editor's Choice), *Modulation spectroscopy of AlGaIn/GaN heterostructures: The influence of electron-hole interaction*, Physic Status Solidi A **204**, 447 (2007).
- [16] R. Goldhahn, C. Buchheim, P. Schley, A.T. Winzer, H. Wenzel, *Optical constants of wurtzite group-III nitrides*, in J. Piprek (Hg.), *Nitride Semiconductor Devices: Principles and Simulation*, 95 (Wiley-VCH, Weinheim, 2007).

-
- [17] G. Purvis, *Competition and challenge markets for III-Vs*, III-Vs Review **19**, 42 (2006).
- [18] *Toshiba Announces Gallium Nitride Power FET with World's Highest Output Power in X-band*, Pressemeldung Toshiba (2006).
- [19] Y. Inoue, S. Masuda, M. Kanamura, T. Ohki, K. Makiyama, N. Okamoto, K. Imanishi, H. Shigematsu, T. Kikkawa, N. Hara, K. Joshin, *Degradation-Mode Analysis for Highly Reliable GaN-HEMT*, International Microwave Symposium (IEEE, Honolulu, USA, 2007).
- [20] K. Gurnett, T. Adams, *GaN makes inroads in the wireless infrastructure*, III-Vs Review **19**, 33 (2006).
- [21] F. Schulze, A. Dadgar, J. Bläsing, A. Diez, A. Krost, *Metalorganic vapor phase epitaxy grown InGaN/GaN light-emitting diodes on Si(001) substrate*, Appl. Phys. Lett. **88**, 121114 (2006).
- [22] M. Shatalov, S. Wu, V. Adivarahan, W.H. Sun, A. Chitnis, J. Yang, Y. Bilenko, R. Gaska, M. Asif Khan, *White light generation using 280 nm light emitting diode pumps*, Physica Status Solidi C **7**, 2832 (2005).
- [23] Y. Taniyasu, M. Kasu, T. Makimoto, *An aluminium nitride light-emitting diode with a wavelength of 210 nanometres*, Nature **441**, 325 (2006).
- [24] J.R. Huang, W.C. Hsu, H.I. Chen, W.C. Liu, *Comparative study of hydrogen sensing characteristics of a Pd/GaN Schottky diode in air and N₂ atmospheres*, Sens. Actuators B **123**, 1040 (2007).
- [25] A. Kuramata, K. Horino, K. Abd Domen, *GaN-based blue laser diodes grown on SiC substrate as light source of high-density optical data storage*, Fujitsu Scientific and Technical J. **34**, 191 (1998).
- [26] H.X. Jiang, S.X. Jin, J. Li, J. Shakya, J.Y. Lin, *III-nitride blue microdisplays*, Appl. Phys. Lett. **78**, 1303 (2001).
- [27] J.L. Pau, J. Anduaga, C. Rivera, A. Navarro, I. Alava, M. Redondo, E. Muñoz, *Optical sensors based on III-nitride photodetectors for flame sensing and combustion*, Appl. Opt. **45**, 7498 (2006).
- [28] A.A. Burk Jr., M.J. O'Loughlin, R.R. Siergiej, A.K. Agarwal, S. Sriram, R. C. Clarke, M.F. MacMillan, V. Balakrishna, C.D. Brandt, *SiC and GaN wide bandgap semiconductor materials and devices*, Solid-State Electron. **43**, 1456 (1999).
- [29] 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_N/Ga_N heterostructures*, J. Appl. Phys. **85**, 3222 (1999).
- [30] A. Hangleiter, F. Hitzel, S. Lahmann, U. Rossow, *Composition dependence of polarization fields in GaInN/GaN quantum wells*, Appl. Phys. Lett. **83**, 1169 (2003).
- [31] 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)Ga_N/Ga_N hetero- and quantum well structures*, J. Phys.: Condens. Matter **14**, 3399 (2002).
- [32] E. J. Miller, E. T. Yu, C. Poblenz, C. Elsass, J. S. Speck, *Direct measurement of the polarization charge in AlGa_N/Ga_N heterostructures using capacitance-voltage carrier profiling*, Appl. Phys. Lett. **80**, 3551 (2002).
- [33] J. A. Garrido, J. L. Sanchez-Rojas, A. Jimenez, E. Munoz, F. Omnes, P. Gibart, *Polarization fields determination in AlGa_N/Ga_N heterostructure field-effect transistors from charge control analysis*, Appl. Phys. Lett. **75**, 2407 (1999).
- [34] L. Jia, E. T. Yu, D. Keogh, P. M. Asbeck, P. Miraglia, A. Roskowski, R. F. Davis, *Polarization charges and polarization-induced barriers in Al_xGa_{1-x}N/GaN and In_yGa_{1-y}N/GaN heterostructures*, Appl. Phys. Lett. **79**, 2916 (2001).
- [35] H. Zhang, E. J. Miller, E. T. Yu, C. Poblenz, J. S. Speck, *Measurement of polarization charge and conduction-band offset at In_xGa_{1-x}N/GaN hetero-junction interfaces*, Appl. Phys. Lett. **84**, 4644 (2004).
- [36] A. Drabińska, K. P. Korona, R. Bożek, J. M. Baranowski, K. Pakuła, T. Tomaszewicz, J. Gronkowski, *Investigation of 2D Electron Gas on Al-GaN/GaN Interface by Electroreflectance*, Physica Status Solidi C **0**, 329 (2002).
- [37] S. R. Kurtz, A. A. Allerman, D. D. Koleske, A. G. Baca, R. D. Briggs, *Electronic properties of the AlGa_N/Ga_N heterostructure and two-dimensional electron gas observed by electroreflectance*, J. Appl. Phys. **95**, 1888 (2004).
- [38] D E Aspnes, A A Studna, *Schottky-Barrier Electroreflectance: Application to GaAs*, Phys. Rev. B **7**, 4605 (1973).
- [39] D. E. Aspnes, *Band nonparabolicities, broadening, and internal field distributions: The spectroscopy of Franz-Keldysh oscillations*, Phys. Rev. B **10**, 4228 (1974).

-
- [40] J. D. Dow, D. Redfield, *Electroabsorption in Semiconductors: The Excitonic Absorption Edge*, Phys. Rev. B **1**, 3358 (1970).
- [41] J. D. Dow, D. Redfield, *Toward a Unified Theory of Urbach's Rule and Exponential Absorption Edges*, Phys. Rev. B **5**, 594 (1972).
- [42] D. F. Blossey, *Wannier Exciton in an Electric Field. I. Optical Absorption by Bound and Continuum States*, Phys. Rev. B **2**, 3976 (1970).
- [43] D. F. Blossey, *Wannier Exciton in an Electric Field. II. Electroabsorption in Direct-Band-Gap Solids*, Phys. Rev. B **3**, 1382 (1971).
- [44] W. Franz, *Einfluss eines elektrischen Feldes auf eine optische Absorptionskante*, Zeits. Naturforsch. **13**, 484 (1958).
- [45] L. V. Keldysh, *The effect of a strong electric field on the optical properties of insulating solids*, Sov. Phys. JETP **7**, 788 (1958).
- [46] J. H. Edgar (Hg.), *Properties of Group-III Nitrides* (INSPEC, London, 2004).
- [47] P. E. Van Camp, V. E. Van Doren, J. T. Devreese, *High-pressure properties of wurtzite- and rocksalt-type aluminum nitride*, Phys. Rev. B **44**, 9056 (2005).
- [48] J. F. Nye, *Physical Properties of Crystals* (Clarendon Press, Oxford, 1985).
- [49] A. Zoroddu, F. Bernardini, P. Ruggerone, V. Fiorentini, *First-principles prediction of structure, energetics, formation enthalpy, elastic constants, polarization, and piezoelectric constants of AlN, GaN, and InN: Comparison of local and gradient-corrected density-functional theory*, Phys. Rev. B **64**, 045208 (2001).
- [50] E. S. Hellman, *The Polarity of GaN: a Critical Review*, MRS Int. J. Nitr. Semicond. Res. **3**, 11 (1998).
- [51] C. D. Lee, Dong Y., R. M. Feenstra, J. E. Northrup, J. Neugebauer, *Reconstructions of the AlN(0001) surface*, Phys. Rev. B **68**, 205317 (2003).
- [52] R. M. Feenstra, Northrup J. E., J. Neugebauer, *Review of Structure of Bare and Adsorbate-Covered GaN(0001) Surfaces*, MRS Int. J. Nitr. Semicond. Res. **7**, 3 (2002).
- [53] S. Sloboshanin, F. S. Tautz, V. M. Polyakov, U. Starke, A. S. Usikov, B. J. Ber, J. A. Schaefer, *Structural, vibrational and electronic properties of faceted GaN (000 $\bar{1}$) surfaces*, Surf. Sci. **428**, 250 (1999).
- [54] D. H. Lim, K. Xu, S. Arima, A. Yoshikawa, Takahashi K., *Polarity inversion of GaN films by trimethyl-aluminum preflow in low-pressure metalorganic vapor phase epitaxy growth*, J. Appl. Phys. **91**, 6461 (2002).

- [55] M. Stutzmann, O. Ambacher, M. Eickhoff, U. Karrer, A. L. Pimenta, R. Neuberger, J. Schalwig, R. Dimitrov, P. J. Schuck, R. D. Grober, *Playing with polarity*, Physica Status Solidi B **228**, 505 (2001).
- [56] T. Nakayama, Mikami J., *Ultrathin metal layers to convert surface polarity of nitride semiconductors*, Physica Status Solidi B **242**, 1209 (2005).
- [57] F. Bernardini, V. Fiorentini, *Nonlinear macroscopic polarization in III-V nitride alloys*, Phys. Rev. B **64**, 085207 (2001).
- [58] A. F. M. Anwar, R. T. Webster, K. V. Smith, *Bias induced strain in AlGaN/GaN heterojunction field effect transistors and its implications*, Appl. Phys. Lett. **88**, 203510 (2006).
- [59] C. Roder, S. Einfeldt, S. Figge, D. Hommel, *Temperature dependence of the thermal expansion of GaN*, Phys. Rev. B **72**, 085218 (2005).
- [60] K. Wang, R. R. Reeber, *Thermal Expansion of GaN and AlN*, Proc. Mat. Res. Soc. **482**, 863 (1998).
- [61] J. A. Floro, D. M. Follstaedt, P. Provencio, S. J. Hearne, S. R. Lee, *Misfit dislocation formation in the AlGa_N/Ga_N heterointerface*, J. Appl. Phys. **96**, 7087 (2004).
- [62] V. Potin, P. Ruterana, G. Nouet, R. C. Pond, H. Morkoç, *Mosaic growth of GaN on (0001) sapphire: A high-resolution electron microscopy and crystallographic study of threading dislocations from low-angle to high-angle grain boundaries*, Phys. Rev. B **61**, 5587 (2000).
- [63] S. Yoshida, S. Misawa, S. Gonda, *Improvements on the electrical and luminescent properties of reactive molecular-beam epitaxially grown GaN films by using AlN-coated sapphire substrates*, Appl. Phys. Lett. **42**, 427 (1983).
- [64] H. Amano, N. Sawaki, I. Akasaki, Y. Toyoda, *Metalorganic vapor-phase epitaxial-growth of a high-quality GaN film using an AlN buffer layer*, Appl. Phys. Lett. **48**, 353 (1986).
- [65] K. Hiramatsu, S. Itoh, H. Amano, I. Akasaki, N. Kuwano, T. Shiraishi, K. Oki, *Growth mechanism of GaN grown on sapphire with AlN buffer layer by MOVPE*, J. Cryst. Growth **115**, 628 (1991).
- [66] N. V. Edwards, *Residual stress in III-V nitrides*, in O. Manasreh (Hg.), *III-Nitride Semiconductors: Electrical, Structural and Defect Properties* (Elsevier, Amsterdam, 2000).
- [67] K. G. Lyon, G. L. Salinger, C. A. Wenson, G. K. White, *Linear thermal expansion measurements on silicon from 6 to 340 K*, J. Appl. Phys. **48**, 865 (1977).

-
- [68] V. M. Glazov, A. S. Pashinkin, *The Thermophysical Properties (Heat Capacity and Thermal Expansion) of Single-Crystal Silicon*, High Temperature **39**, 413 (2001).
- [69] 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-Al₂O₃ in the temperature range 4.5-250 K using the Mössbauer wavelength standard*, J. Appl. Crystallography **36**, 1075 (2003).
- [70] M. Leszczynski, T. Suski, H. Teisseyre, P. Perlin, I. Grzegory, J. Jun, S. Porowski, T. D. Moustakas, *Thermal expansion of gallium nitride*, J. Appl. Phys. **76**, 4909 (1994).
- [71] R. R. Reeber, K. Wang, *Lattice parameters and thermal expansion of GaN*, J. Mat. Res. **15**, 40 (2000).
- [72] W. Paszkowicz, M. Knapp, S. Podsiadlo, G. Kamler, J. B. Pelka, *Lattice parameters of aluminium nitride in the range 10-291 K*, Acta Phys. Polonica A **101**, 781 (2002).
- [73] O. Lagerstedt, B. Monemar, *Variation of lattice-parameters in GaN with stoichiometry and doping*, Phys. Rev. B **19**, 3064 (1979).
- [74] V. Okada, *Diamond cubic Si: structure, lattice parameters and density*, in R. Hull (Hg.), *Properties of crystalline silicon* (INSPEC, London, 1999).
- [75] H. Ibach, H. Lüth, *Festkörperphysik – Einführung in die Grundlagen* (Springer, Berlin, 1999).
- [76] U. M. E. Christmas, A. D. Andreev, D. A. Faux, *Calculation of electric field and optical transitions in InGaN/GaN quantum wells*, J. Appl. Phys. **98**, 073522 (2005).
- [77] V. Tilak, P. Batoni, J. Jiang, A. Knobloch, *Measurement of piezoelectric coefficient of gallium nitride using metal-insulator-semiconductor capacitors*, Appl. Phys. Lett. **90**, 043508 (2007).
- [78] M. J. Manfra, K. W. Baldwin, A. M. Sergent, R. J. Molnar, J. Caissie, *Electron mobility in very low density GaN/AlGaIn/GaN heterostructures*, Appl. Phys. Lett. **85**, 1277 (2004).
- [79] C. Wetzel, T. Takeuchi, H. Amano, I. Akasaki, *Electric-field strength, polarization dipole, and multi-interface band offset in piezoelectric Ga_{1-x}In_xN/GaN quantum-well structures*, Phys. Rev. B **61**, 2159 (2000).
- [80] F. A. Ponce, S. Srinivasan, A. Bell, L. Geng, R. Liu, M. Stevens, J. Cai, H. Omiya, H. Marui, S. Tanaka, *Microstructure and electronic properties of InGaIn alloys*, Physica Status Solidi B **240**, 273 (2003).

- [81] A. Drabińska, *Photo- and electroreflectance spectroscopy of low-dimensional III-nitride structures*, Acta Phys. Pol. A **104**, 149 (2003).
- [82] J. B. 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 AlGa_N/Ga_N heterostructure field effect transistors*, Appl. Phys. Lett. **77**, 250 (2000).
- [83] V. Nakov, *Modellierung der statischen elektronischen Eigenschaften von Halbleiterheterostrukturen*, Dissertation, Technische Universität Ilmenau (1998).
- [84] I. N. Bronstein, K. A. Semendjajew, G. Musiol, H. Mühlig, *Taschenbuch der Mathematik* (Verlag Harri Deutsch, Frankfurt/M., 2001).
- [85] B. Jogai, *Free electron distribution in AlGa_N/Ga_N heterojunction field-effect transistors*, J. Appl. Phys. **91**, 3721 (2002).
- [86] L. S. Yu, D. J. Qiao, Q. J. Xing, S. S. Lau, K. S. Boutros, J. M. Redwing, *Ni and Ti Schottky barriers on n-AlGa_N grown on SiC substrates*, Appl. Phys. Lett. **73**, 238 (1998).
- [87] E. T. Yu, X. Z. Dang, L. S. Yu, D. Qiao, P. M. Asbeck, S. S. Lau, *Schottky barrier engineering in III-V nitrides via the piezoelectric effect*, Appl. Phys. Lett. **73**, 1880 (1998).
- [88] J. J. Hopfield, *Fine structure in the optical absorption edge of anisotropic crystals*, J. Phys. Chem. Solids **15**, 97 (1960).
- [89] P. Carrier, S.-H. Wei, *Theoretical study of the band-gap anomaly of InN*, J. Appl. Phys. **97**, 033707 (2005).
- [90] B. Gil, *Stress Effects on Optical Properties*, in J. I. Pankove, T. D. Moustakas (Hg.), *Gallium Nitride (Ga_N) II*, 209–273 (Academic Press, San Diego, 1999).
- [91] L. Chen, B.J. Skromme, R.F. Dalmau, R. Schlessler, Z. Sitar, C. Chen, W. Sun, J. Yang, M.A. Khan, M.L. Nakarmi, J.Y. Lin, H.X. Jiang, *Band-edge exciton states in AlN single crystals and epitaxial layers*, Appl. Phys. Lett. **85**, 4334 (2004).
- [92] 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 Ga_N films*, Phys. Rev. B **60**, 1471 (1999).
- [93] B. Gil, O. Briot, *Internal structure and oscillator strengths of excitons in strained α -Ga_N*, Phys. Rev. B **55**, 2530 (1997).

-
- [94] S. R. Lee, A. F. Wright, M. H. Crawford, G. A. Petersen, J. Han, R. M. Biefeld, *The band-gap bowing of $Al_xGa_{1-x}N$ alloys*, Appl. Phys. Lett. **74**, 3344 (1999).
- [95] 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 AlGaN alloys*, Physica Status Solidi B **242**, 2610 (2005).
- [96] 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).
- [97] 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).
- [98] C. F. Klingshirn, *Semiconductor Optics* (Springer, Berlin, 1995).
- [99] S. L. Chuang, *Physics of Optoelectronic Devices* (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1995).
- [100] K. Tharmalingam, *Optical Absorption in the Presence of a Uniform Field*, Phys. Rev. **130**, 2204 (1963).
- [101] D. E. Aspnes, *Electric-Field Effects on Optical Absorption near Thresholds in Solids*, Phys. Rev. **147**, 554 (1966).
- [102] D. E. Aspnes, *Electric Field Effects on the Dielectric Constant of Solids*, Phys. Rev. **153**, 972 (1967).
- [103] G. H. Wannier, *The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals*, Phys. Rev. **52**, 191 (1937).
- [104] J. Frenkel, *On the Transformation of Light into Heat in Solids. II*, Phys. Rev. **37**, 1276 (1931).
- [105] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, *Band parameters for nitrogen-containing semiconductors*, J. Appl. Phys. **94**, 3675 (2003).
- [106] A. S. Barker, M. Ilegems, *Infrared Lattice Vibrations and Free-Electron Dispersion in GaN*, Phys. Rev. B **7**, 743 (1973).
- [107] A. Shikanai, T. Azuhata, T. Sota, S. Chichibu, A. Kuramata, K. Horino, S. Nakamura, *Biaxial strain dependence of exciton resonance energies in wurtzite GaN*, J. Appl. Phys. **81**, 417 (1997).
- [108] S. Shokhovets, R. Goldhahn, G. Gobsch, S. Piekh, R. Lantier, A. Rizzi, V. Lebedev, W. Richter, *Determination of the anisotropic dielectric function for wurtzite AlN and GaN by spectroscopic ellipsometry*, J. Appl. Phys. **94**, 307 (2003).

- [109] R. J. Elliott, *Intensity of Optical Absorption by Excitons*, Phys. Rev. **108**, 1384 (1957).
- [110] H. T. Grahn, *Introduction of Semiconductor Physics* (World Scientific Publishing, New York, 2001).
- [111] L. D. Landau, E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der theoretischen Physik*, Band III (Akademie-Verlag, Berlin, 1979).
- [112] I. Galbraith, *Excitonic electroabsorption and electrorefraction in semiconductors*, Phys. Rev. B **48**, 5105 (1993).
- [113] S. Wolfram, *The Mathematica Book* (Wolfram Media, Champaign, 2003).
- [114] J. H. Verner, *Explicit Runge-Kutta methods with estimates of the local truncation error*, J. Num. Anal. **15**, 772 (1978).
- [115] P. Harrison, *Quantum Wells, Wires and Dots* (John Wiley & Sons, Chichester, 2000).
- [116] G. Wentzel, *Eine Verallgemeinerung der Quantenbedingung für die Zwecke der Wellenmechanik*, Zeits. f. Phys. **38**, 518 (1926).
- [117] H. A. Kramers, *Wellenmechanik und halbzahlige Quantisierung*, Zeits. Phys. **39**, 828 (1926).
- [118] L. Brillouin, *La mécanique ondulatoire de Schrödinger, une méthode générale de résolution par approximations successives*, Comptes Rendus Acad. Sci. **183**, 24 (1926).
- [119] F. L. Lederman, J. D. Dow, *Theory of electroabsorption by anisotropic and layers semiconductors. I. Two-dimensional excitons in a uniform electric field*, Phys. Rev. B **13**, 1633 (1976).
- [120] F. Evangelisti, A. Frova, J. U. Fischbach, *Electric-Field-Induced Interference Effects at the Ground Exciton Level in GaAs*, Phys. Rev. Lett. **29**, 1001 (1972).
- [121] L. Schultheis, I. Balslev, *Excitonic reflectance of GaAs crystals cleaved in liquid helium*, Phys. Rev. B **28**, 2292 (1983).
- [122] L. Schultheis, J. Lagois, *Excitonic Polaritons in electric fields at GaAs surfaces*, Phys. Rev. B **29**, 6784 (1984).
- [123] L. Schultheis, C.W. Tu, *Influence of a surface electric field on the line shape of the excitonic emission in GaAs*, Phys. Rev. B **32**, 6978 (1985).
- [124] L. Schultheis, K. Köhler, C. W. Tu, *Energy shift and line broadening of three-dimensional excitons in electric fields*, Phys. Rev. B **36**, 6609 (1987).

-
- [125] A. Jaeger, G. Weiser, *Excitonic electroabsorption spectra and Franz-Keldysh effect of $In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP$ studied by small modulation of static fields*, Phys. Rev. B **58**, 10674 (1998).
- [126] P. Trautman, K. Pakula, R. Bozek, J.M. Baranowski, *Light-induced narrowing of excitonic absorption lines in GaN*, Appl. Phys. Lett. **83**, 3510 (2003).
- [127] P. Trautman, K. Pakula, J. M. Baranowski, *The fundamental absorption edge of high crystalline quality GaN and that of amorphous GaN grown at low temperature*, Physica Status Solidi C **2**, 1027 (2005).
- [128] S. Shokhovets, D. Fuhrmann, R. Goldhahn, G. Gobsch, O. Ambacher, M. Hermann, U. Karrer, *Study of exciton dead layers in GaN Schottky diodes with N and Ga-face polarity*, Physica Status Solidi A **194**, 480 (2002).
- [129] A. E. Oberhofer, J. F. Muth, M. A. L. Johnson, Z. Y. Chen, E. F. Fleet, G. D. Cooper, *Planar gallium nitride ultraviolet optical modulator*, Appl. Phys. Lett. **83**, 2748 (2003).
- [130] F. Binet, J. Y. Duboz, E. Rosencher, F. Scholz, V. Härle, *Electric field effects on excitons in gallium nitride*, Phys. Rev. B **54**, 8116 (1996).
- [131] S. Shokhovets, G. Gobsch, O. Ambacher, *Momentum matrix element and conduction band nonparabolicity in wurtzite GaN*, Appl. Phys. Lett. **86**, 161908 (2005).
- [132] Y. M. Sirenko, J. B. Jeon, B. C. Lee, K. W. Kim, M. A. Littlejohn, M. A. Strosio, G. J. Iafrate, *Hole scattering and optical transitions in wide-band-gap nitrides: Wurtzite and zinc-blende structures*, Phys. Rev. B **55**, 4360 (1997).
- [133] R. K. Willardson, A. C. Beer, *Modulation Techniques*, Band 9 von *Semiconductors and Semimetals* (Academic Press, London, 1972).
- [134] J. D. Dow, B. Y. Lao, S. A. Newman, *Differential Electroabsorption*, Phys. Rev. B **3**, 2571 (1971).
- [135] H. Shen, F. H. Pollak, *Generalized Franz-Keldysh theory of electromodulation*, Phys. Rev. B **42**, 7097 (1990).
- [136] B. O. Seraphin, N. Bottka, *Franz-Keldysh Effect of the Refractive Index in Semiconductors*, Phys. Rev. **139**, A560 (1965).
- [137] B. O. Seraphin, N. Bottka, *Band-Structure Analysis from Electro-Reflectance Studies*, Phys. Rev. **145**, 628 (1966).
- [138] D. Fuhrmann, *Optische Untersuchungen an Pt/GaN Schottky-Dioden mit Ga- und N-Polarität*, Diplomarbeit, TU Ilmenau (2003).

- [139] A. Link, *Zweidimensionale Elektronen- und Löchergase in GaN/AlGaN Heterostrukturen*, Dissertation, Technische Universität München (2004).
- [140] A. Dadgar, J. Bläsing, A. Dietz, A. Alam, M. Heuken, A. Krost, *Metalorganic Chemical Vapor Phase Epitaxy of Crack-Free GaN on Si (111) Exceeding 1 μm in Thickness*, Jpn. J. Appl. Phys. **39**, L1183 (2000).
- [141] J. Bläsing, A. Reiher, A. Dadgar, A. Dietz, A. Krost, *The origin of stress reduction by low-temperature AlN interlayers*, Appl. Phys. Lett. **81**, 2722 (2002).
- [142] K. Prabhakaran, T. G. Andersson, K. Nozawa, *Nature of native oxide on GaN surface and its reaction with Al*, Appl. Phys. Lett. **69**, 3212 (1996).
- [143] O. Weidemann, M. Hermann, G. Steinhoff, H. Wingbrant, A. L. Spetz, M. Stutzmann, M. Eickhoff, *Influence of surface oxides on hydrogen-sensitive Pd : GaN Schottky diodes*, Appl. Phys. Lett. **83**, 773 (2003).
- [144] O. Weidemann, E. Monroy, E. Hahn, M. Stutzmann, M. Eickhoff, *Influence of thermal oxidation on the electronic properties of Pt Schottky contacts on GaN grown by molecular-beam epitaxy*, Appl. Phys. Lett. **86**, 083507 (2005).
- [145] I. Akasaki, H. Amano, Y. Koide, K. Hiramatsu, N. Sawaki, *Effects of AlN buffer layer on crystallographic structure and on electrical and optical properties of GaN and Ga_{1-x}Al_xN (0 < x \leq 0.4) films grown on sapphire substrate by MOVPE*, J. Cryst. Growth **98**, 209 (1989).
- [146] S. Nakamura, *GaN Growth Using GaN Buffer Layer*, Jpn. J. Appl. Phys. **30**, L1705 (1991).
- [147] I. P. Smorchkova, C. R. Elsass, B. Heying, P. Fini, E. Haus, S. P. DenBaars, J. S. Speck, *Polarization-induced charge and electron mobility in AlGaN/GaN heterostructures grown by plasma-assisted molecular-beam epitaxy*, J. Appl. Phys. **86**, 4520 (1999).
- [148] M. Schuster, P. O. Gervais, B. Jobst, W. Hösler, R. Averbek, H. Riechert, A. Iberl, R. Stömmer, *Determination of the chemical composition of distorted InGaN/GaN heterostructures from x-ray diffraction data*, J. Phys. D: Appl. Phys. **32**, A56 (1999).
- [149] R. Goldhahn, A. T. Winzer, A. Dadgar, A. Krost, O. Weidemann, M. Eickhoff, *Modulation spectroscopy of AlGaN/GaN heterostructures: the influence of electron-hole interaction*, Physica Status Solidi A **204**, 477 (2007).
- [150] Yu. Goldberg, *Aluminum Nitride*, in M. E. Levinshtein, S. L. Rumyantsev, Shur M. S. (Hg.), *Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe*, 31–47 (John Wiley & Sons, New York, 2001).

-
- [151] K. Y. Park, B. J. Kwon, Y. H. Cho, S. A. Lee, J. H. Son, *Growth and characteristics of Ni-based Schottky-type $Al_xGa_{1-x}N$ ultraviolet photodetectors with AlGaN/GaN superlattices*, J. Appl. Phys. **98**, 124505 (2005).
- [152] X. Q. Shen, K. Furuta, N. Nakamura, H. Matsuhata, M. Shimizu, H. Okumura, *Growth and characteristics of Ni-based Schottky-type $Al_xGa_{1-x}N$ ultraviolet photodetectors with AlGaN/GaN superlattices*, J. Cryst. Growth **301**, 404 (2007).
- [153] I. Cimalla, F. Will, K. Tonisch, M. Niebelschuetz, V. Cimalla, V. Lebedev, G. Kittler, M. Himmerlich, S. Krischok, J. A. Schaefer, M. Gebinoga, A. Schober, T. Friedrich, O. Ambacher, *AlGaN/GaN biosensor - effect of device processing steps on the surface properties and biocompatibility*, Sens. Actuators B **123**, 740 (2007).
- [154] S. Shokhovets, R. Goldhahn, G. Gobsch, *Study of the linear electro-optic effect in alpha-GaN by electroreflectance*, Mater. Sci. Eng. B **93**, 215 (2002).
- [155] T. Klein, *Modulationsspektroskopie an GaN und AlGaN/GaN-Heterostrukturen*, Diplomarbeit, TU Ilmenau (2006).
- [156] M.-A. Dubois, P. Muralt, *Properties of aluminum nitride thin films for piezoelectric transducers and microwave filter applications*, Appl. Phys. Lett. **74**, 3032 (1999).
- [157] V. Fuflyigin, E. Salley, A. Osinsky, P. Norris, *Pyroelectric properties of AlN*, Appl. Phys. Lett. **77**, 3075 (2000).
- [158] A. D. Bykhovski, V. V. Kaminski, M. S. Shur, Q. C. Chen, M. A. Khan, *Pyroelectricity in gallium nitride thin films*, Appl. Phys. Lett. **69**, 3254 (1996).
- [159] M. S. Shur, A. D. Bykhovski, R. Gaska, *Pyroelectric and piezoelectric properties of GaN-based materials*, Mater. Res. Soc. Int. J. Nitr. Semicond. Res. S **4S1**, G16 (1999).
- [160] W. Mönch, *Electronic Properties of Semiconductor Interfaces* (Springer, Berlin, 2004).
- [161] H. Lu, P. Sandvik, A. Vertiatchikh, J. Tucker, A. Elasser, *High temperature Hall effect sensors based on AlGaN/GaN heterojunctions*, J. Appl. Phys. **99**, 114510 (2006).
- [162] M. Eickhoff, J. Schalwig, G. Steinhoff, O. Weidemann, L. Görgens, R. Neuberger, M. Hermann, B. Baur, G. Müller, O. Ambacher, M. Stutzmann, *Electronics and sensors based on pyroelectric AlGaN/GaN heterostructures Part B: Sensor applications*, Physica Status Solidi B **0**, 1908 (2003).

- [163] J. Schalwig, G. Müller, M. Eickhoff, O. Ambacher, M. Stutzmann, *Gas sensitive GaN/AlGaN-heterostructures*, Sens. Actuators B **87**, 425 (2002).
- [164] J. Schalwig, G. Müller, U. Karrer, M. Eickhoff, O. Ambacher, M. Stutzmann, L. Görgens, G. Dollinger, *Hydrogen response mechanism of Pt-GaN Schottky diodes*, Appl. Phys. Lett. **80**, 1222 (2002).
- [165] B. S. Kang, F. Ren, B. P. Gila, C. R. Abernathy, S. J. Pearton, *AlGaN/GaN-based metal-oxide-semiconductor diode-based hydrogen gas sensor*, Appl. Phys. Lett. **84**, 1123 (2004).
- [166] B. S. Kang, R. Mehandru, S. Kim, F. Ren, R. C. Fitch, J. K. Gillespie, N. Moser, G. Jessen, T. Jenkins, R. Dettmer, D. Via, A. Crespo, B. P. Gila, C. R. Abernathy, S. J. Pearton, *Hydrogen-induced reversible changes in drain current in Sc_2O_3 /AlGaN/GaN high electron mobility transistors*, Appl. Phys. Lett. **84**, 4635 (2004).
- [167] B. S. Kang, S. Kim, F. Ren, B. P. Gila, C. R. Abernathy, S. J. Pearton, *Comparison of MOS and Schottky W/Pt-GaN diodes for hydrogen detection*, Sens. Actuators B **104**, 232 (2005).
- [168] L. Voss, B. P. Gila, S. J. Pearton, H.-T. Wang, F. Ren, *Charakterization of bulk GaN rectifiers for hydrogen gas sensing*, J. Vac. Sci. Technol. B **23**, 2373 (2005).
- [169] K. Matsuo, N. Negoro, J. Kotani, T. Hashizume, H. Hasegawa, *Pt Schottky diode gas sensors formed on GaN and AlGaN/GaN heterostructure*, Appl. Surf. Sci. **244**, 273 (2005).
- [170] H.T. Wang, T.J. Anderson, B.S. Kang, F. Ren, C.Z. Li, Z.N. Low, J.S. Lin, B.P. Gila, S.J. Pearton, A. Osinsky, A. Dabiran, *Stable hydrogen sensors from AlGaN/GaN heterostructure diodes with TiB₂-based Ohmic contacts*, Appl. Phys. Lett. **90**, 252109 (2007).
- [171] M. Ali, V. Cimalla, V. Lebedev, V. Tilak, P.M. Sandvik, D.W. Merfeld, O. Ambacher, *A study of hydrogen sensing performance of Pt-GaN Schottky diodes*, IEEE Sens. J. **6**, 1115 (2006).
- [172] M. Ali, V. Cimalla, V. Lebedev, H. Romanus, V. Tilak, D. Merfeld, P. Sandvik, O. Ambacher, *Pt/GaN Schottky diodes for hydrogen gas sensors*, Sens. Actuators B **113**, 797 (2006).
- [173] B. S. Kang, S. Kim, F. Ren, K. Ip, Y. W. Heo, B. Gila, C. R. Abernathy, D. P. Norton, S. J. Pearton, *Detection of C_2H_4 using wide-bandgap semiconductor sensors AlGaN/GaN MOS diodes and bulk ZnO Schottky rectifiers*, J. Electrochem. Soc. **151**, G468 (2004).

-
- [174] B. S. Kang, G. Louche, R. S. Duran, Y. Gnanou, S. J. Pearton, F. Ren, *Gateless AlGaN/GaN HEMT response to block co-polymers*, Solid-State Electron. **48**, 851 (2004).
- [175] G. Steinhoff, M. Hermann, W. J. Schaff, L. F. Eastman, M. Stutzmann, M. Eickhoff, *pH response of GaN surfaces and its application for pH-sensitive field-effect transistors*, Appl. Phys. Lett. **83**, 177 (2003).
- [176] M. Bayer, C. Uhl, P. Vogl, *Theoretical study of electrolyte gate AlGaN/GaN field effect transistors*, J. Appl. Phys. **97**, 033703 (2005).
- [177] B. S. Kang, F. Ren, M. C. Kang, C. Lofton, W. H. Tan, S. J. Pearton, A. Dabiran, A. Osinsky, P. P. Chow, *Detection of halide ions with AlGaN/GaN high electron mobility transistors*, Appl. Phys. Lett. **86**, 173502 (2005).
- [178] N. A. Chaniotakis, Y. Alifragis, A. Georgakilas, G. Konstantinidis, *GaN-based anion selective sensor: Probing the origin of the induced electrochemical potential*, Appl. Phys. Lett. **86**, 164103 (2005).
- [179] H.T. Wang, B.S. Kang, T.F. Chancellor, T.P. Lele, Y. Tseng, F. Ren, S.J. Pearton, J.W. Johnson, P. Rajagopal, J.C. Roberts, E.L. Piner, K.J. Linthicum, *Fast electrical detection of Hg(II) ions with AlGaN/GaN high electron mobility transistors*, Appl. Phys. Lett. **91**, 042114 (2007).
- [180] G. Steinhoff, B. Baur, G. Wrobel, S. Ingebrandt, A. Offenhausser, A. Dadgar, A. Krost, M. Stutzmann, M. Eickhoff, *Recording of cell action potentials with AlGaN/GaN field-effect transistors*, Appl. Phys. Lett. **86**, 033901 (2005).
- [181] G. Steinhoff, B. Baur, G. Wrobel, S. Ingebrandt, A. Offenhausser, A. Dadgar, A. Krost, M. Stutzmann, M. Eickhoff, *Erratum: Recording of cell action potentials with AlGaN/GaN field-effect transistors [Appl. Phys. Lett. **86**, 033901 (2005)]*, Appl. Phys. Lett. **89**, 019901 (2006).
- [182] L.-G. Petersson, H.-M. Dannelun, I. Lundström, *The water-forming reaction on palladium*, Surf. Sci. **161**, 77 (1985).
- [183] M. Ali, V. Cimalla, V. Lebedev, H. Romanusa, V. Tilak, D. Merfeld, P. Sandvik, O. Ambacher, *Pt/GaN Schottky diodes for hydrogen gas sensors*, Sens. Actuators B **113**, 797 (2006).
- [184] J. Fogelberg, M. Eriksson, H. Dannelun, L.-G. Petersson, *Kinetic modeling of hydrogen adsorption/absorption in thin films on hydrogen-sensitive field-effect devices: Observation of large hydrogen-induced dipoles at the Pd-SiO₂ interface*, J. Appl. Phys. **78**, 988 (1995).

- [185] M. Eriksson, A. Salomonsson, I. Lundström, D. Briand, A. E. Åbom, *The influence of the insulator surface properties on the hydrogen response of field-effect gas sensors*, J. Appl. Phys. **98**, 034903 (2005).
- [186] D. E. Aspnes, A. Frova, *Influence of spatially dependent perturbations on modulated reflectance and absorption of solids*, Solid State Commun. **7**, 155 (1969).
- [187] U. Behn, H. Röppischer, *Effect of Back-Surface Reflection on the Electrorreflectance Spectra of GaAs*, Phys. Stat. Solidi **141**, 325 (1987).
- [188] B. Jogai, *Complex dielectric function of AlGaN/GaN/InGaN heterojunction structures*, Physica Status Solidi B **241**, 952 (2004).
- [189] S. Syed, J. B. Heroux, Y. J. Wang, M. J. Manfra, R. J. Molnar, Störmer H. L., *Nonparabolicity of the conduction band of wurtzite GaN*, Appl. Phys. Lett. **83**, 4553 (2003).
- [190] B. Jogai, *Influence of surface states on the two-dimensional electron gas in AlGaN/GaN heterojunction field-effect transistors*, J. Appl. Phys. **93**, 1631 (2003).
- [191] G. Koley, Ho-Young Cha, C. I. Thomas, M. G. Spencer, *Laser-induced surface potential transients observed in III-nitride heterostructures*, Appl. Phys. Lett. **81**, 2282 (2002).
- [192] S. Chevtchenko, X. Ni, Q. Fan, A. A. Baski, H. Morkoç, *Surface band bending of a-plane GaN studied by scanning Kelvin probe microscopy*, Appl. Phys. Lett. **88**, 122104 (2006).
- [193] R. Katayama, K. Onabe, H. Yaguchi, T. Matsushita, T. Kondo, *Modulation spectroscopic investigation on lattice polarity of gallium nitride*, Appl. Phys. Lett. **91**, 061917 (2007).
- [194] B.S. Kang, S.J. Pearton, J.J. Chen, F. Ren, J.W. Johnson, R.J. Therrien, P. Rajagopal, J.C. Roberts, E.L. Piner, K.J. Linthicum, *Electrical detection of deoxyribonucleic acid hybridization with AlGaN/GaN high electron mobility transistors*, Appl. Phys. Lett. **89**, 122102 (2006).
- [195] B.S. Kang, H.T. Wang, T.P. Lele, Y. Tseng, F. Ren, S.J. Pearton, J.W. Johnson, P. Rajagopal, J.C. Roberts, E.L. Piner, K.J. Linthicum, *Prostate specific antigen detection using AlGaN/GaN high electron mobility transistors*, Appl. Phys. Lett. **91**, 112106 (2007).
- [196] T. Kokawa, T. Sato, H. Hasegawa, T. Hashizume, *Liquid-phase sensors using open-gate AlGaN/GaN high electron mobility transistor structure*, J. Vac. Sci. Technol. B **24**, 1972 (2006).

-
- [197] R. Neuberger, G. Müller, O. Ambacher, M. Stutzmann, *High-Electron-Mobility AlGa_N/Ga_N Transistors (HEMTs) for Fluid Monitoring Applications*, Physica Status Solidi A **185**, 85 (2001).
- [198] M. Kočan, A. Rizzi, H. Lüth, S. Keller, U. K. Mishra, *Surface Potenzial at as-Grown GaN(0001) MBE Layers*, Physica Status Solidi B **234**, 773 (2002).
- [199] K. Thonke, K. Kornitzer, M. Grehl, R. Sauer, C. Kirchner, V. Schwegler, M. Kamp, M. Leszczynski, I. Grzegory, S. Porowski, in Proc. Int. Workshop on Nitride Semiconductors – *High-Resolution Polariton spectra of homoepitaxial GaN: Temperature dependence*, IPAP Conf. Series **1**, 587 (2000).
- [200] M. A. Reshchikov, H. Morkoç, *Luminescence properties of defects in GaN*, J. Appl. Phys. **97**, 061301 (2005).
- [201] A. Hangleiter, F. Hitzel, C. Netzel, D. Fuhrmann, U. Rossow, G. Ade, P. Hinze, *Suppression of Nonradiative Recombination by V-Shaped Pits in GaInN/GaN Quantum Wells Produces a Large Increase in the Light Emission Efficiency*, Phys. Rev. Lett. **95**, 127402 (2005).
- [202] R. Dingle, M. Ilegems, *Donor-acceptor pair recombination in GaN*, Solid State Commun. **9**, 175 (1971).
- [203] J.-M. Wagner, F. Bechstedt, *Properties of strained wurtzite GaN and AlN: Ab initio studies*, Phys. Rev. B **66**, 115202 (2002).
- [204] W. J. Moore, J. A. Freitas, S. K. Lee, S. S. Park, J. Y. Han, *Magneto-optical studies of free-standing hydride-vapor-phase epitaxial GaN*, Phys. Rev. B **65**, 081201 (2002).
- [205] 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 GaN*, Phys. Rev. B **66**, 233311 (2002).
- [206] W. R. Fawcett, *The Solvation of Polar Molecules in Organic Solvents*, in *14th Symposium on Thermophysical Properties* (Boulder, USA, 2000).
- [207] A.G. Aronov, A.S. Ioselevich, *Excitons*, Band 2 von *Modern Problems in Condensed Matter Sciences*, Kapitel Exciton Electrooptics (North Holland, Amsterdam, 1982).

Danksagung

Prof. Dr. Gerhard Gobsch möchte ich für seine großartige Unterstützung und das stete Interesse am Fortgang dieser Arbeit danken.

Herrn Dr. Rüdiger Goldhahn danke ich für die exzellente fachliche Betreuung. Seine Bereitschaft zu kritischen, spannenden Diskussionen und sein Engagement haben entscheidend zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

Herrn Daniel Fuhrmann danke ich für die Vorstudien zur Berechnung des ER-Signals. Sie gaben den Anreiz, stundenlange Messreihen durch stundenlange Rechnungen zu simulieren. Dies wurde durch die von Herrn Dr. Henning Schwanbeck vom Rechenzentrum sehr gut betreuten Clusterrechner wesentlich erleichtert.

Den Herren Carsten Buchheim, Pascal Schley und Thomas Klein gilt mein Dank dafür, dass ich mit ihnen interessante Fragen zu den Gruppe-III-Nitriden beantworten durfte. Den Herren Dr. Norbert Stein und Dr. Slava Shokhovets bin ich für den Beratungsservice in Optik und Elektronik dankbar. Herrn Tobias Erb danke ich für die unermüdliche Unterstützung bei den vielen kleinen Dingen.

Herrn Prof. Oliver Ambacher und Frau Katja Tonisch von Zentrum für Mikro- und Nanotechnologien möchte ich meinen Dank für die Bereitstellung von Proben und deren Röntgendaten aussprechen.

Herrn Prof. Alois Krost und Herrn Dr. Armin Dadgar von der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg danke ich vor allem für die enge Zusammenarbeit und Bereitstellung der Proben auf den Siliziumsubstraten.

Bei Herrn Prof. Martin Stutzmann, Herrn Dr. Martin Eickhoff und Herrn Olaf Weidemann von der TU München möchte ich mich für den Crashkurs in Probenkontaktierung und die zur Verfügung gestellten Proben danken.

Herrn Prof. Andreas Hangleiter und Herrn Dr. Uwe Rossow von der TU Braunschweig danke ich für die sehr wichtige Probe BS210. Frau Dr. Angela Link von der TU München möchte ich meinen Dank dafür aussprechen, das Elektrogenas dieser Probe ausgezeichnet charakterisiert zu haben.

Meiner Frau Kati und meiner Tochter Sigrid möchte ich ganz besonders für ihre Geduld, Aufmunterung und Unterstützung danken.