

**Marco Greve**

**Optische Spektroskopie an  
ultraviolett-emittierenden GaN /  
AlGaN-Heterostrukturen**

**Diplomarbeit**

## **Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek:**

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek: Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de/> abrufbar.

Dieses Werk sowie alle darin enthaltenen einzelnen Beiträge und Abbildungen sind urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung, die nicht ausdrücklich vom Urheberrechtsschutz zugelassen ist, bedarf der vorherigen Zustimmung des Verlanges. Das gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Bearbeitungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen, Auswertungen durch Datenbanken und für die Einspeicherung und Verarbeitung in elektronische Systeme. Alle Rechte, auch die des auszugsweisen Nachdrucks, der fotomechanischen Wiedergabe (einschließlich Mikrokopie) sowie der Auswertung durch Datenbanken oder ähnliche Einrichtungen, vorbehalten.

Copyright © 2003 Diplomica Verlag GmbH  
ISBN: 9783832477448

**Marco Greve**

**Optische Spektroskopie an ultraviolett-emittierenden  
GaN / AlGaN-Heterostrukturen**



---

Marco Greve

# Optische Spektroskopie an ultraviolett-emittierenden GaN / AlGaN- Heterostrukturen

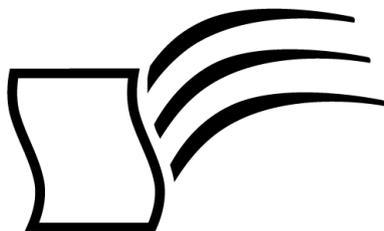
Diplomarbeit

Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig

Fachbereich Physik und Geowissenschaften

Institut für Technische Physik

Abgabe September 2003



***Diplom.de***

Diplomica GmbH \_\_\_\_\_  
Hermannstal 119k \_\_\_\_\_  
22119 Hamburg \_\_\_\_\_

Fon: 040 / 655 99 20 \_\_\_\_\_  
Fax: 040 / 655 99 222 \_\_\_\_\_

agentur@diplom.de \_\_\_\_\_  
www.diplom.de \_\_\_\_\_

ID 7744

Greve, Marco: Optische Spektroskopie an ultraviolett-emittierenden GaN / AlGaN-Heterostrukturen  
Hamburg: Diplomatica GmbH, 2004  
Zugl.: Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Technische Universität, Diplomarbeit, 2003

---

Dieses Werk ist urheberrechtlich geschützt. Die dadurch begründeten Rechte, insbesondere die der Übersetzung, des Nachdrucks, des Vortrags, der Entnahme von Abbildungen und Tabellen, der Funksendung, der Mikroverfilmung oder der Vervielfältigung auf anderen Wegen und der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen, bleiben, auch bei nur auszugsweiser Verwertung, vorbehalten. Eine Vervielfältigung dieses Werkes oder von Teilen dieses Werkes ist auch im Einzelfall nur in den Grenzen der gesetzlichen Bestimmungen des Urheberrechtsgesetzes der Bundesrepublik Deutschland in der jeweils geltenden Fassung zulässig. Sie ist grundsätzlich vergütungspflichtig. Zuwiderhandlungen unterliegen den Strafbestimmungen des Urheberrechtes.

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in diesem Werk berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, dass solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Die Informationen in diesem Werk wurden mit Sorgfalt erarbeitet. Dennoch können Fehler nicht vollständig ausgeschlossen werden, und die Diplomarbeiten Agentur, die Autoren oder Übersetzer übernehmen keine juristische Verantwortung oder irgendeine Haftung für evtl. verbliebene fehlerhafte Angaben und deren Folgen.

Diplomatica GmbH  
<http://www.diplom.de>, Hamburg 2004  
Printed in Germany

# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b>	<b>5</b>
<b>1 Theoretische Grundlagen</b>	<b>7</b>
1.1 Grundlegendes zu Halbleitern . . . . .	7
1.1.1 Effektive Massen und Bandstruktur . . . . .	7
1.1.2 Eigenleitung und Störstellenleitung . . . . .	9
1.1.3 Energetische Verteilung der Ladungsträger und Zustandsdichte . . . . .	10
1.1.4 Direkte und indirekte Halbleiter . . . . .	11
1.2 Niederdimensionale Halbleiterheterostrukturen . . . . .	13
1.2.1 Energiequantisierung und Zustandsdichte in dimensionsreduzierten Halbleiterstrukturen . . . . .	13
1.2.2 Quantenfilmstrukturen unter dem Einfluss elektrischer Felder	16
1.3 Eigenschaften der Gruppe III-Nitride . . . . .	17
1.3.1 Kristallstrukturen . . . . .	17
1.3.2 Bandstruktur . . . . .	19
1.3.3 Optische Eigenschaften . . . . .	20
1.3.4 Elektrische Felder in Gruppe III-Nitriden . . . . .	23
<b>2 Optische Untersuchungsmethoden</b>	<b>26</b>
2.1 Spektroskopische Ellipsometrie . . . . .	26
2.1.1 Prinzip der Ellipsometrie . . . . .	27
2.1.2 Ellipsometer mit rotierendem Analysator . . . . .	28
2.1.3 Simulation der effektiven dielektrischen Funktion von Schichtsystemen . . . . .	30
2.1.4 Experimenteller Aufbau . . . . .	33
2.2 Photolumineszenz (PL) . . . . .	36
2.2.1 Elektron-Loch-Paar-Erzeugung und -Rekombination . . . . .	37
2.2.2 Experimenteller Aufbau . . . . .	38
2.2.3 Linienformmodelle . . . . .	44

---

<b>3</b>	<b>Untersuchungen an GaN- und AlGaIn-Volumenschichten</b>	<b>45</b>
3.1	Herstellung und Struktur der untersuchten Proben . . . . .	45
3.2	Charakterisierung der GaN-Probe . . . . .	48
3.2.1	Temperaturabhängige PL-Messungen . . . . .	49
3.2.2	Ellipsometrische Messungen . . . . .	52
3.3	Komposition der AlGaIn-Schichten . . . . .	54
3.4	Linienbreiten exzitonischer Lumineszenz . . . . .	62
3.4.1	Ergebnisse der PL-Messungen . . . . .	62
3.4.2	Modellierung der Halbwertsbreite . . . . .	65
3.5	Lokalisierung von Exzitonen in AlGaIn . . . . .	68
3.5.1	Ergebnisse der temperaturabhängigen PL-Messungen . . .	68
3.5.2	Ermittlung der Lokalisierungsenergie . . . . .	70
<b>4</b>	<b>Untersuchungen an GaN/AlGaIn-Quantenfilmstrukturen</b>	<b>74</b>
4.1	Wachstumsparameter und Struktur der Proben . . . . .	74
4.2	Lumineszenz bei tiefer Temperatur . . . . .	76
4.2.1	Ergebnisse der PL-Messungen . . . . .	76
4.2.2	Vergleich mit Modellrechnungen . . . . .	80
4.2.3	„Störlumineszenz“ und Optimierungsversuche . . . . .	86
4.3	Temperaturaufgelöste PL-Messungen . . . . .	88
4.3.1	Temperaturabhängigkeit der Lumineszenzintensität . . . .	88
4.3.2	Linienpositionen in Abhängigkeit von der Temperatur . . .	90
	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>93</b>
	<b>Anhang</b>	<b>96</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>98</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>107</b>

# Einleitung

Die binären Halbleitermaterialien Aluminiumnitrid (AlN), Galliumnitrid (GaN) und Indiumnitrid (InN) bilden die Basis des Materialsystems der Gruppe III-Nitride, das ein großes Anwendungspotential insbesondere im Bereich optoelektronischer Bauelemente besitzt. Durch Legierungsbildung der binären Ausgangskomponenten lassen sich direkte Bandlücken im ausgedehnten Bereich von etwa 0.8 bis 6.1 eV bei Raumtemperatur realisieren. Dies macht die Gruppe III-Nitride zu einem vielversprechenden Kandidaten, der, im Gegensatz zu den konventionellen III-V-Halbleitern wie beispielsweise Galliumarsenid (GaAs), auch den kurzwelligen sichtbaren und den ultravioletten (UV) Spektralbereich abdeckt.

Obwohl Juza und Hahn [6] bereits 1938 erstmals die Synthese von GaN gelang, wurde die Forschung auf diesem Gebiet lange Zeit aufgrund der schlechten Probenqualität erschwert. Erst durch Anwendung der Gasphasenepitaxie mit anfänglicher Abscheidung einer Nukleationsschicht [7] gelang in den 1980er Jahren die Herstellung qualitativ höherwertiger Schichten. In den 1990er Jahren folgte dann eine rasante Entwicklung GaN-basierter elektronischer Bauelemente. Bei den schon erwähnten optoelektronischen Bauelementen wurden sowohl Leuchtdioden (LEDs) [1] als auch Laserdioden (LDs) [2] realisiert. Der Einsatz von blau statt rot-emittierenden LDs z.B. für das Auslesen optischer Speichermedien wie DVDs verspricht eine deutliche Steigerung der Speicherdichte infolge der besseren Fokussierbarkeit des kurzwelligeren Lichtes.

Neben dem Einsatz in Lichtemittern ist das Materialsystem auch für die Herstellung von UV-Detektoren interessant [3]. Eine unerwünschte Empfindlichkeit für sichtbares Licht kann hier aufgrund der realisierbaren hohen Bandlückenenergie ausgeschlossen werden, weshalb man auch von „solar-blind detectors“ spricht.

Eine große Bandlückenenergie verhindert neben ungewollter optischer auch thermische Generation von Überschussladungsträgern, was die Gruppe III-Nitride für Anwendungen im Bereich von Hochleistungs- [4] und Hochtemperaturbauelementen [5] prädestiniert.

Trotz der bemerkenswerten Erfolge bei der Herstellung GaN-basierter Bauelemente und der Vielzahl von Untersuchungen, die an diesem Materialsystem durch-

geführt wurden, sind bei weitem noch nicht alle involvierten Mechanismen und fundamentalen physikalischen Eigenschaften der Gruppe III-Nitride verstanden. Da bei den meisten Anwendungen die ternären Verbindungen eine wichtige Rolle spielen, ist ein grundlegendes Verständnis ihrer strukturellen, elektronischen und optischen Eigenschaften essentiell, um Bauelemente mit verbesserten Eigenschaften zu realisieren.

Diese Arbeit beschränkt sich dabei auf die Untersuchung des Mischungshalbleiters  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , wobei der Grenzfall  $x = 0$ , also reines Galliumnitrid, eingeschlossen ist. AlGaN findet insbesondere als Barrierenmaterial in Quantenfilmstrukturen Anwendung, bei denen die aktive Schicht beispielsweise aus GaN besteht. Ziel dieser Arbeit war zunächst die Charakterisierung von Volumenmaterial. Die dabei gewonnenen Erkenntnisse sollten dann als Basis für die außerdem durchgeführten Untersuchungen an GaN/AlGaN-Quantenfilmstrukturen dienen. Die eingesetzten optischen Untersuchungsmethoden - temperaturo aufgelöste Photolumineszenz (PL) und spektroskopische Ellipsometrie - bieten die Möglichkeit einer zerstörungsfreien Probencharakterisierung, die insbesondere Informationen über die Bandstruktur des Halbleiters liefert. Die Ellipsometrie erlaubt zusätzlich die Ermittlung von Schichtdicken.

Die vorliegende Arbeit ist in vier Kapitel gegliedert. Das erste befasst sich mit den relevanten theoretischen Grundlagen, während das zweite die angewandten Untersuchungsmethoden sowohl prinzipiell als auch in ihrer konkreten experimentellen Realisierung erläutert. Die Ergebnisse der Messungen an GaN- und AlGaN-Volumenschichten sind Gegenstand von Kapitel 3. Der untersuchte Satz von Proben unterschiedlichen Aluminiumgehaltes lässt es dabei zu, interessante Größen wie die PL-Linienbreite oder die Lokalisierungsenergie von Exzitonen kompositionsabhängig zu betrachten. Die Arbeit schließt mit der Vorstellung der Resultate aus den Messungen an GaN/AlGaN-Quantenfilmstrukturen. Deren Lumineszenzeigenschaften werden im Hinblick auf die Quantenfilmdicke sowie auf die Wachstumsparameter bei der Herstellung der Strukturen untersucht.

# Kapitel 1

## Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel sollen die für die vorliegende Arbeit relevanten physikalischen Grundlagen behandelt werden. Nach einigen allgemeineren Anmerkungen zu Halbleitern im ersten Abschnitt befasst sich der zweite mit den speziellen Eigenschaften niederdimensionaler Halbleiterheterostrukturen. Schließlich wird im letzten Abschnitt des Kapitels das Materialsystem der Gruppe III-Nitride vorgestellt.

### 1.1 Grundlegendes zu Halbleitern

#### 1.1.1 Effektive Massen und Bandstruktur

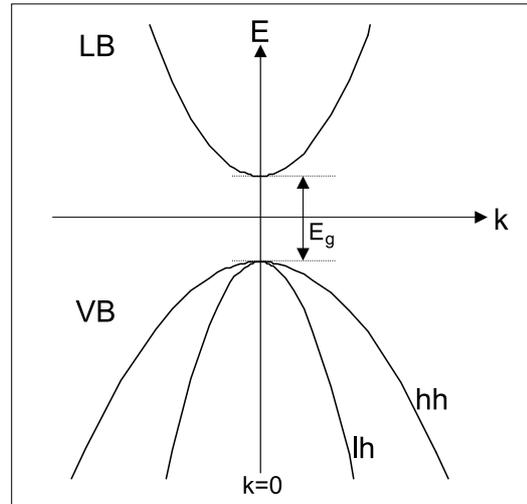
Ein Elektron bzw. Loch im periodischen Gitterpotential wird durch eine äußere Kraft  $\vec{F}$  relativ zum Gitter so beschleunigt, als wäre seine Masse gleich seiner sogenannten effektiven Masse  $m^*$ . Es gilt also die Bewegungsgleichung

$$\vec{F} = m^* \cdot \frac{d\vec{v}_g}{dt}$$

mit der Gruppengeschwindigkeit  $\vec{v}_g$  der die Elektronen- bzw. Lochbewegung beschreibenden Wellenpakete. Die effektive Masse ist mit der Bandstruktur  $E(\vec{k})$  über die Beziehung

$$m^* = \hbar^2 \left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1} \quad (1.1)$$

verknüpft. Abb. 1.1 zeigt beispielhaft den schematischen Verlauf von Valenz- und Leitungsband eines sogenannten direkten Halbleiters in der Umgebung von  $k = 0$ , also im Zentrum der 1. Brillouinzone. Auf die Unterscheidung zwischen direkten und indirekten Halbleitern wird in Abschnitt 1.1.4 noch näher eingegangen. Die



**Abbildung 1.1:** Schematischer Bandverlauf eines direkten Halbleiters mit der Bandlücke  $E_g$  im Bereich des Zentrums der 1. Brillouinzone.

Entartung des Valenzbandes ist aufgehoben, und man beobachtet Bänder unterschiedlicher Krümmung. Nach Gl. (1.1) ist  $m^*$  gerade umgekehrt proportional zur Bandkrümmung, was die Benennung der Valenzbänder als Schwerloch- (hh) bzw. Leichtlochband (lh) erklärt.

Im einfachsten Fall einer isotropen, parabolischen Bandstruktur gilt:

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}.$$

In diesem Fall ist  $m^*$  ein Skalar und die Flächen konstanter Energie im  $\vec{k}$ -Raum sind Kugeloberflächen. Im allgemeinen jedoch ist die Bandstruktur anisotrop, d.h. die effektive Masse ist ein Tensor der Form

$$m_{ij}^* = \hbar^2 \left( \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \right)^{-1}.$$

Durch Hauptachsentransformation erreicht man, dass gilt:

$$m_{xy}^* = m_{xz}^* = m_{yz}^* = 0.$$

Mit der Umbenennung  $m_{xx}^* \equiv m_x^*$ ,  $m_{yy}^* \equiv m_y^*$ ,  $m_{zz}^* \equiv m_z^*$  erhält man für den Bandverlauf

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{k_x^2}{m_x^*} + \frac{k_y^2}{m_y^*} + \frac{k_z^2}{m_z^*} \right).$$