



# Kapitel 1.

## Grundlagen

### 1.1. AlGaN-Materialsystem

Die Untersuchung AlGaN-basierter MSM-Photodetektoren erfordert ein Verständnis der grundlegenden Eigenschaften von Galliumnitrid (GaN), Aluminiumnitrid (AlN) und Aluminiumgalliumnitrid (AlGaN). Deshalb sollen in diesem Abschnitt, die zum Aufbau dieser Arbeit relevanten Informationen über die Kristallstruktur sowie die elektronischen und optischen Eigenschaften des Gruppe-III-Nitrid Halbleiters  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  zusammengetragen und erläutert werden.

#### 1.1.1. Strukturelle Eigenschaften

**Kristallstruktur** Das Materialsystem  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  ist ein ternäres Halbleitergemisch aus den binären Komponenten GaN und AlN. Das Mischverhältnis von Al- zu Ga- Atomen  $x_{\text{Al}}$ , der Aluminium-Molenbruch, wird häufig kurz als Al-Gehalt  $x$  bezeichnet. Sowohl die binären als auch die ternären III-Nitride sind polymorph, da sie sowohl in der hexagonalen Wurtzit-Struktur als auch in den kubischen Strukturen Zinkblende und Kochsalz vorliegen können [30]. Die thermodynamisch stabilste Form, in der AlGaN kristallisiert, ist jedoch die Wurtzit-Struktur. Das Wurtzit-Gitter hat eine primitive Einheitszelle mit zwei Stickstoff- (N) und zwei Metallatomen (Al oder Ga) und kann durch die Gitterkonstanten  $a$  und  $c$  beschrieben werden, die nach dem Vegard'schen Gesetz [31] linear interpoliert werden können:

$$a(x) = x \cdot a_{\text{AlN}} + (1 - x) \cdot a_{\text{GaN}} \quad \text{bzw.} \quad (1.1)$$

$$c(x) = x \cdot c_{\text{AlN}} + (1 - x) \cdot c_{\text{GaN}}. \quad (1.2)$$

Werte für  $a$  und  $c$  für GaN und AlN sind im Anhang in Tabelle A.2 angegeben.

Die Wurtzit-Struktur gehört zur Raumgruppe  $P6_3mc$  und besteht aus zwei hexagonal dichtestgepackten (hcp), um  $5/8$  entlang der sechszähligen Drehachse ( $c$ -Achse) verschobenen Untergittern jeder Atomsorte mit je einatomiger Basis. Daraus ergibt sich unmittelbar die Stapelfolge  $aA, bB, aA, bB, \dots$  aus den Doppellagen  $aA$  bzw.  $bB$ , die wiederum aus Kationen ( $a$  bzw.  $b$ ) und Anionen ( $A$  bzw.  $B$ ) aufgebaut sind. Insgesamt sind die Positionen der übernächsten Nachbarn entlang der  $c$ -Achse damit nicht inversionssymmetrisch und es liegt je nach Blickrichtung eine unterschiedliche Polarität vor: Al- bzw. Ga-polar entlang der  $c$ -Achse und N-polar in entgegengesetzter Richtung ( $-c$ ). In dieser Arbeit wird ausschließlich Ga- bzw. Al-polares Material untersucht.

**Verspannungen und Versetzungen** Das Wachstum AlGa<sub>x</sub>N-basierter Halbleiterbauelemente findet typischerweise auf Fremdsubstraten, wie z. B. Saphir (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), Silizium (Si) oder Siliziumcarbid (SiC) statt. Dabei weisen die unterschiedlichen funktionalen Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N-Schichten, wie z. B. Pufferschichten, dotierte Schichten, Quantenfime etc., i. A. unterschiedliche Gitterkonstanten auf. Ein Maß für die Gitterfehlpassung ist durch [32]

$$f_m = \frac{a_S - a_0}{a_0} \quad (1.3)$$

gegeben, wobei  $a_0$  die natürliche Gitterkonstante der aufwachsenden Schicht und  $a_S$  die des darunterliegenden Substrats ist. Nach Tabelle A.2 besteht also zwischen Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N und (relaxiertem) AlN eine Spanne für die Gitterfehlpassung von bis zu 2,4%. Lateral gitterangepasstes Wachstum ist unter bestimmten Bedingungen jedoch trotzdem möglich. Dabei bewirkt die aufgeprägte mechanische Verspannung  $\hat{\sigma}$  innerhalb der basalen Ebene allerdings eine entsprechende Verformung  $\hat{\varepsilon}$  des Kristalls, welche gemäß dem Hooke'schen Gesetz  $\hat{\sigma} = \overline{\overline{C}} \cdot \hat{\varepsilon}$  über den Elastizitätsmoduln  $\overline{\overline{C}}$  des Materials vermittelt wird. Für die Wurtzit-Struktur mit  $C_{6v}$ -Punktsymmetrie lassen sich die Verzerrungen in der Schichtebene ( $x, y$ ) bzw. senkrecht dazu ( $z$ ) bestimmen [32]

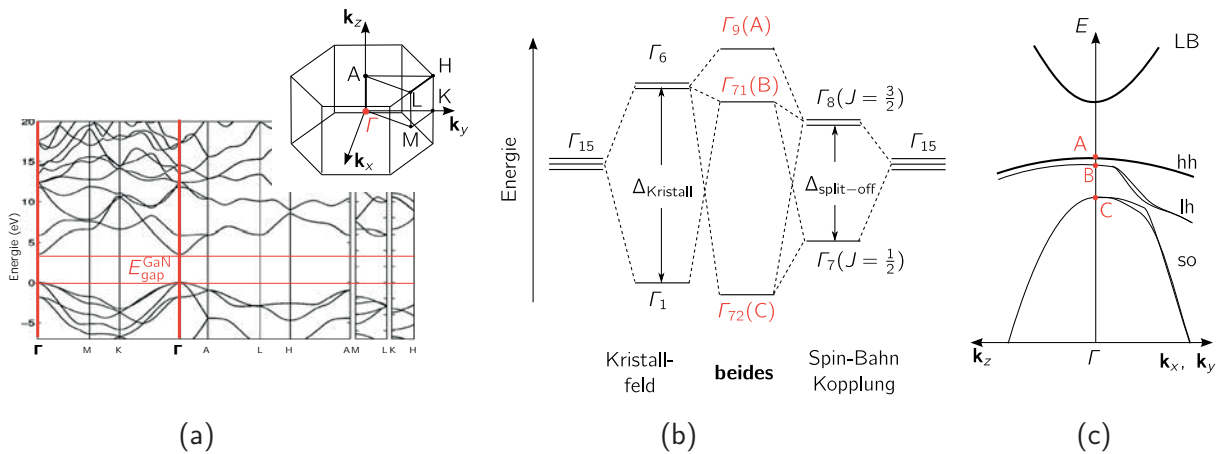
$$\varepsilon_{\parallel} := \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a - a_0}{a_0} \quad (1.4)$$

$$\varepsilon_{\perp} := \varepsilon_{zz} = -2 \frac{C_{13}}{C_{33}} \cdot \varepsilon_{\parallel}, \quad (1.5)$$

wobei  $a$  die „verzerrte“ Gitterkonstante der verspannten Schicht ist und  $C_{13}$  und  $C_{33}$  zwei voneinander unabhängige Komponenten des Elastizitätsmoduls. Die in dieser Arbeit verwendeten Werte für  $C_{ij}$  sind für AlN und GaN in Tabelle A.2 angegeben. Zwischen ihnen ist für Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N in erster Näherung wieder eine lineare Interpolation in  $x_{Al}$  gemäß Gln. (1.1) und (1.2) zulässig. Für  $a < a_0$  ist  $\varepsilon_{\parallel} < 0$  und die Schicht ist in der Ebene zugverzerrt (tensil). Senkrecht dazu ist die Schicht wegen  $\varepsilon_{\perp} \propto -\varepsilon_{\parallel}$  entlang der  $c$ -Achse druckverzerrt (kompressiv) – es gilt dann  $c > c_0$ . Umgekehrte Verhältnisse ergeben sich für  $a > a_0$ . Die in einer Schicht gespeicherte Verformungsenergie  $E$  pro Einheitsfläche  $A$  ist  $E_{\varepsilon}/A \propto t \cdot \varepsilon_{\parallel}^2$  und wächst mit deren Schichtdicke  $t$  [33, 32]. Oberhalb einer kritischen Schichtdicke wird die Bildung von Versetzungen energetisch begünstigt und die Schicht beginnt zu relaxieren, wobei sie ihre natürliche Gitterkonstanten  $a_0$  und  $c_0$  annimmt. Grundsätzlich wird zwischen basalen und durchstoßenden Versetzungen (auch: Durchstoßversetzungen) unterschieden, wobei letztere Stufen-, Schrauben- oder gemischten Charakter aufweisen können. Durchstoßversetzungen mit Stufencharakter bilden einen nichtstrahlenden Rekombinationspfad für Überschussladungsträger [23, 24].

### 1.1.2. Elektronische Eigenschaften

**Bandstruktur** In Abbildung 1.1 a ist die nach der Pseudopotential-Methode berechnete elektronische Bandstruktur von GaN in Wurtzitstruktur entlang ausgezeichneter Symmetrieachsen innerhalb der ersten Brillouin-Zone dargestellt. Die  $s$ -Zustände aller beteiligten



**Abbildung 1.1.:** (a) Elektronische Bandstruktur von GaN in Wurtzitstruktur entlang ausgezeichnete Symmetrieachsen in der ersten Brillouin-Zone (kleines Bild), bestimmt mittels Pseudopotential-Methode [34]. (b) Kristallfeldaufspaltung und Spin-Bahn-Kopplung führen zusammen zur Aufhebung der Entartung der obersten Valenzbandzustände in hexagonalem GaN [35]. (c) Schema der jeweiligen (VB-, hh-, lh- und so-) Dispersionsrelation in der Nähe des  $\Gamma$ -Punktes. Illustration einer Berechnung mittels  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie in [36].

Atomsorten bilden das Leitungsband. Im Valenzband bilden Linearkombinationen von Produkten aus den  $p_x$ -,  $p_y$ - und  $p_z$ -Orbitalen mit den Spin-Funktionen die obersten Zustände. Deren dreifache Entartung wird durch das Kristallfeld der Wurtzitstruktur teilweise und unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung schließlich vollständig aufgehoben (vgl. Abb. 1.1 (b)). Die drei so entstehenden Valenzbänder werden als Schwerlochband (A-Valenzband, heavy hole), Leichtlochband (B-Valenzband, light hole) und Split-Off-Band (C-Valenzband, crystal-field split-off) bezeichnet. Bei AlN wird allerdings von einer negativen Kristallfeldaufspaltung [37] ausgegangen, so dass hier, anders als bei GaN und InN, das C-Valenzbandmaximum oberhalb der übrigen Valenzbandmaxima liegt. In der Nähe des  $\Gamma$ -Punktes ( $(k) \approx 0$ ) können alle elektronischen Zustände in erster Näherung durch einen parabolischen Verlauf mit isotropen effektiven Massen

$$m_{ij}^* = \hbar^2 \left( \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \right)^{-1} = m_{ji}^* \quad (1.6)$$

für das entsprechende Band beschrieben werden.

Wie in Abbildung 1.1 (c) zu erkennen ist, sind die effektiven Massen entlang der verschiedenen  $k$ -Achsen in der Dispersionsrelation i. A. nicht für alle Valenzbänder isotrop bzw. konstant. Für viele praktische Fälle, reicht es jedoch aus, sich auf das oberste Valenzband (hh-Band) zu beschränken, für das diese Annahmen sogar bei etwas größeren Impulsen  $\mathbf{k} \neq 0$  noch gut erfüllt sind.

**Bandlücke** Die Bandlücke  $E_g$  eines Volumen-Halbleiters nimmt aufgrund der thermischen Ausdehnung des Kristallgitters mit steigender Temperatur  $T$  ab. Experimentell ermittelte Temperaturverläufe für die Bandlücken von GaN und AlN lassen sich anhand des empirischen Varshni-Verlaufs [38]

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (1.7)$$

beschreiben. In der Literatur häufig zitierte Werte aus Ref. [39] für die Varshni-Parameter  $\alpha$  und  $\beta$  sowie für  $E_g(0)$  sind im Anhang in Tabelle A.2 zusammengetragen. Die Kompositionsabhängigkeit der Bandlücke  $E_g(x)$  des ternären  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  ist durch

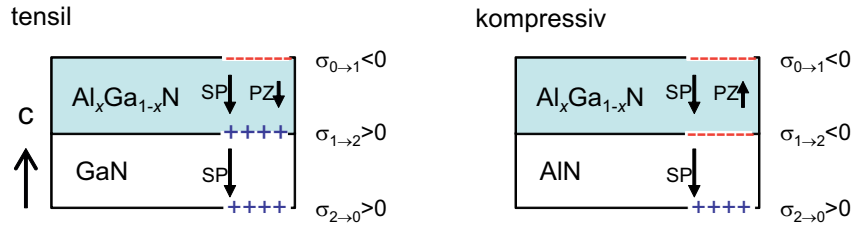
$$E_g(x) = x \cdot E_{\text{AlN}} + (1 - x) \cdot E_{\text{GaN}} - x(1 - x) \cdot b_{\text{AlGaN}} \quad (1.8)$$

gegeben und führt bei Raumtemperatur ( $T \approx 300$  K) auf eine Spanne von 3,43 eV für GaN bis ca. 6,14 eV für AlN [1, 37]. Die quadratische Abweichung in Gl. (1.8) – durch den Bowing-Parameter  $b_{\text{AlGaN}}$  gegeben – kann i. A. auf die zufällige Anordnung verschieden großer Anionen (hier: Ga und Al) im ternären Material zurückgeführt werden [40].

**Spontane und piezoelektrische Polarisierung** Im Vergleich zu anderen III-V Halbleitern weisen die III-Nitride mit Wurtzit-Struktur eine besonders ausgeprägte spontane und piezoelektrische Polarisierung auf, welche die Funktionsweise elektronischer und optoelektronischer Bauteile maßgeblich beeinflussen oder teilweise sogar erst ermöglichen.

Im  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  liegt eine Abweichung des Verhältnisses  $c/a$  vom hcp-Idealwert  $\sqrt{8/3}$  vor, welcher sich bei Gleichheit aller tetraedisch angeordneten Bindungen zum jeweils nächsten Nachbarn ergibt. Außerdem ist das Verhältnis der Bindung entlang der  $c$ -Richtung zur  $c$ -Gitterkonstanten, der interne Zellparameter  $u$ , in AlGaN größer als der Wurtzit-Idealwert von  $3/8$ , was einer Streckung der  $c$ -Bindung entspricht [41, S. 35]. Zusätzlich bewirken die Elektronegativitätsdifferenzen zwischen N und Ga bzw. Al eine Polarisierung der kovalenten Metall-Stickstoffbindungen, durch die Verschiebung der Bindungselektronen zum Stickstoff. Dieser ionische Charakter und die o. g. Deformation des Bindungstetraeders haben einen entscheidenden Einfluss auf die spontane Polarisierung  $P_{\text{SP}}$  des AlGaN-Materials, da sich die Summe der vier Dipolmomente entlang aller Bindungen nicht komplett aufheben und ein Dipolmoment in entgegengesetzter Richtung zur  $c$ -Achse resultiert. Unabhängig von externen Einflüssen ist deshalb in  $c$ -planaren  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ -Schichten eine damit verknüpfte spontane Polarisierung  $P_{\text{SP}}$  vorhanden [42]. Für metallpolares  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  sind ihre Werte im gesamten Kompositionsbereich negativ und ihr Betrag nimmt zudem mit steigendem Al-Anteil zu, was offenbar durch den Anstieg des Zellparameters  $u$  bedingt ist [43].

Die piezoelektrische Polarisierung  $P_{\text{PZ}}$  wird durch die innerhalb einer AlGaN-Schicht aufgebauten Verzerrungen aufgrund mechanischer Verspannungen des Kristallgitters hervorgerufen. Solche Verspannungen werden sowohl beim AlGaN-Wachstum durch eine Gitterfehlpassung nach Gl. (1.3) als auch beim Abkühlen durch Unterschiede in den thermischen Ausdehnungskoeffizienten aufgebaut. Unter Ausnutzung bestimmter Symmetrieeigenschaften der Wurtzit-Struktur (Dreh-Punktgruppe  $C_{6v}$ ) und unter Vernachlässigung von Scherspannungen lässt sich für den Fall einer durch Gitterfehlpassung hervorgerufenen, biaxialen Verspannung von  $c$ -orientiertem AlGaN ein Ausdruck für die verbleibende Komponente der piezoelektrischen Polarisierung entlang der  $c$ -Achse ableiten (s. z. B. [41, S. 48ff])



**Abbildung 1.2.:** Komponenten der Polarisation in  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ -Schichten auf GaN bzw. AlN. Skizze zur Orientierung der spontanen (SP) und der piezoelektrischen (PZ) Polarisation in c-planarem, verspanntem  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  auf GaN (links) bzw. AlN (rechts) – die Vorzeichen der jeweiligen Flächenladung  $\sigma_{i \rightarrow j}$  sind ebenfalls mit angedeutet.

$$P_{\text{PZ}} = 2 \frac{a_{\text{S}} - a_0}{a_0} \left( e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right). \quad (1.9)$$

Hier sind  $e_{ij}$  und  $C_{ij}$  wieder die auf die basale Ebene ( $ij = 13$ ) bzw. auf die c-Achse ( $ij = 33$ ) bezogenen piezoelektrischen bzw. elastischen Konstanten der verspannten Schicht und  $a_i$  ihre Gitterkonstante ( $i = 0$ ) bzw. jene des Substrats ( $i = \text{S}$ ). Mit Beispielwerten aus Tabelle A.2 ist ersichtlich, dass der Klammerterm für alle Kompositionen  $x$  negativ ist und deshalb das Vorzeichen von  $P_{\text{PZ}}$  durch die Fehlanpassung, also den Vorfaktor in Gl. (1.9) bestimmt wird.

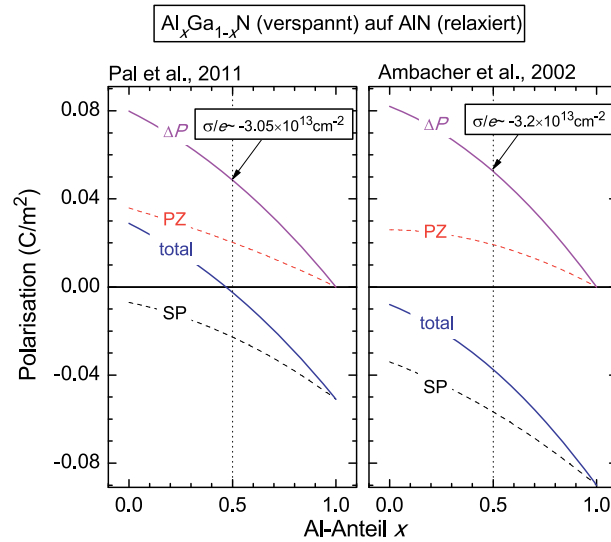
Wie in Abbildung 1.2 skizziert, ist  $P_{\text{PZ}}$  bei tensiler ( $a_{\text{S}} > a_0$ ) Verspannung parallel bzw. bei kompressiver ( $a_{\text{S}} < a_0$ ) Verspannung antiparallel zu  $P_{\text{SP}}$  orientiert, so dass die Gesamtpolarisation  $P_{\text{tot}}$  der  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  Schicht, gegeben durch

$$P_{\text{tot}} = P_{\text{SP}} + P_{\text{PZ}}, \quad (1.10)$$

durch die Verspannung verstärkt bzw. reduziert wird. Im Bauteil ist allerdings nicht die Höhe der Polarisation einer Schicht entscheidend, sondern vielmehr die durch einen Polarisationsprung  $\Delta P$  an einem Materialübergang  $i \rightarrow j$  induzierte Grenzflächenladung

$$\sigma_{i \rightarrow j} = -\Delta P_{\text{tot}} = -(P_{\text{tot},i} - P_{\text{tot},j}), \quad (1.11)$$

wobei  $i$  die obere bzw.  $j$  die untere Schicht bzgl. der c-Achse bezeichnet. Qualitativ ist diese Grenzflächenladung am Übergang einer verspannten  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ -Schicht zur relaxierten GaN- bzw. AlN-Schicht (s. Abb.1.2 a) positiv ( $\sigma_{1 \rightarrow 2} > 0$ ) bzw. negativ ( $\sigma_{1 \rightarrow 2} < 0$ ) [44]. An der Oberfläche (bzw. Unterseite) einer hypothetischen, freistehenden und unverspannten  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ -Schicht wird wegen  $P_{\text{tot,AlGa}_x\text{N}} = P_{\text{SP,AlGa}_x\text{N}} < 0$  und  $P_{\text{tot,Luft}} = 0$  nach Gl.(1.11) eine positive (bzw. negative) Flächenladungsdichte  $\sigma/e < 0$  (bzw.  $> 0$ ) induziert. Diese Ladungen werden jedoch teilweise durch Oberflächenzustände [45] oder Adsorbate aus der Umgebung abgeschirmt [46, 47]. Die Kompensation nicht abgeschirmter Oberflächenladung erfolgt dann über die in der Schicht vorhandenen Ladungen, also



**Abbildung 1.3.:** Berechnungen der Polarisationskomponenten (SP und PZ), der Gesamtpolarisation (total) sowie des Polarisationssprungs ( $\Delta P$ ) am Übergang von verpanntem  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  zu relaxiertem AlN als Funktion des Al-Anteils  $x$  nach Pal *et al.* [48] (*links*) und Ambacher *et al.* [41] (*rechts*).

ionisierte Dotanden und sonstige freie Ladungsträger. Dies führt zur Ausbildung von Raumladungszonen (RLZ) mit hohen elektrischen Feldern an den Übergängen in denen die Bänder entsprechend der netto wirksamen Flächenladung und ihres Vorzeichens verbogen sind [49].

Für Werte der spontanen und der piezoelektrischen Polarisation wird häufig auf die älteren theoretischen Arbeiten von Bernardini und Fiorentini verwiesen (vgl. Ref. [42, 50, 51, 52]), in denen die Werte für die spontane Polarisation zu ca.  $-0,03 \text{ C/m}^2$  für GaN und ca.  $-0,09 \text{ C/m}^2$  für AlN abgeleitet wurden. Inzwischen deuten jedoch einige experimentelle Untersuchungen [53, 36, 54] aber auch eine theoretische Ableitung von Pal *et al.* [48] darauf hin, dass insbesondere die zuerst berechneten Werte für die spontane Polarisation voraussichtlich deutlich überschätzt wurden. Für den in dieser Arbeit überwiegend betrachteten Fall von verpanntem  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  auf relaxiertem AlN sind die Komponenten  $P_{\text{SP}}$  und  $P_{\text{PZ}}$  nach den neueren Berechnungen von Pal *et al.* [48]

$$P_{\text{SP}}^{\text{AlGa}_x\text{N}} = (-0,025 \cdot x^2 - 0,019 \cdot x - 0,007) \text{ C/m}^2 \quad (1.12)$$

$$P_{\text{PZ}}^{\text{AlGa}_x\text{N}/\text{AlN}} = (e_{33}\varepsilon_{\perp} + 2e_{31}\varepsilon_{\parallel} + e_{311}\varepsilon_{\parallel}^2 + e_{333}\varepsilon_{\perp}^2 + e_{133}\varepsilon_{\perp}\varepsilon_{\parallel}) \text{ C/m}^2 \quad (1.13)$$

und nach den älteren Berechnungen von Ambacher *et al.* [41]

$$P_{\text{SP}}^{\text{AlGa}_x\text{N}} = (-0,09 \cdot x - 0,034 \cdot (1 - x) + 0,021 \cdot x \cdot (1 - x)) \text{ C/m}^2 \quad (1.14)$$

$$P_{\text{PZ}}^{\text{AlGa}_x\text{N}/\text{AlN}} = (0,026 \cdot (1 - x) + 0,0248 \cdot x \cdot (1 - x)) \text{ C/m}^2 \quad (1.15)$$

in Abbildung 1.3 gezeigt. (Die Parameter  $e_{ij}(x)$  und  $e_{ijk}(x)$  in Gl. (1.13) sind dem Eratum [55] entnommen worden.) Demnach unterscheidet sich die spontane Polarisation (SP) in diesen beiden Arbeiten um eine beinahe konstante Verschiebung entlang der Polarisationsachse. Da die piezoelektrische Polarisation (PZ) im Vergleich dazu relativ



ähnliche Verläufe aufweist, wird die Gesamtpolarisation (total) hauptsächlich durch den Unterschied in der spontanen Polarisation bestimmt. Entscheidend ist nun, dass der Polarisationsprung ( $\Delta P$ ) dagegen für beide Berechnungen nahezu identisch ist und z. B. für den Fall einer  $\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{N}/\text{AlN}$ -Grenzfläche in beiden Fällen eine Flächenladungsdichte  $\sigma/e$  von ca.  $-3 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  voraussagt.

**Dotierung** Da die Bandlückenenergie im  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ -System sehr groß gegen  $k_B T$  ist, resultieren gemäß [56]

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} \cdot \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right) \quad (1.16)$$

$N_C$ ,  $N_V$ : effektive Zustandsdichten im Leitungs- (C) bzw. Valenzband (V),  $E_g$ : Bandlückenenergie,  $k_B$ : Boltzmann-Konstante,  $T$ : Temperatur

bei Raumtemperatur ( $T = 300 \text{ K}$ ) sehr geringe intrinsische freie Ladungsträgerkonzentrationen von ca.  $10^{-10} \text{ cm}^{-3}$  für GaN bzw.  $10^{-33} \text{ cm}^{-3}$  für AlN, so dass diese Materialien praktisch als Isolatoren angesehen werden könnten. Das elektrische Verhalten von  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  wird jedoch durch unbeabsichtigte Kontamination, strukturelle Defekte oder beabsichtigte Dotierung bestimmt. Wird die extrinsische Leitfähigkeit durch freie Elektronen bzw. Löcher verursacht, so ist von n- bzw. p-Leitfähigkeit die Rede. Liegen die Ionisierungsenergien  $E_D$  bzw.  $E_A$  nah zum Leitungs- bzw. Valenzband, dann werden die Dotanden als flache Störstellen bezeichnet, die nahezu vollständig ionisiert sind. Nimmt der Abstand zum jeweiligen Band zu, sinkt die Dichte an ionisierten Störstellen [56]

$$N_D^+ = \frac{N_D}{1 + 2 \cdot \exp\left(\frac{(E_F - (E_C - E_D))/k_B T}{1}\right)} \quad (1.17)$$

$$N_A^+ = \frac{N_A}{1 + 4 \cdot \exp\left(\frac{(E_A - E_F)/k_B T}{1}\right)}, \quad (1.18)$$

$E_F$ : Fermi-Energie,  $E_C$ : Leitungsbandenergie,  $E_D$ ,  $E_A$ : Ionisierungsenergie Donatoren (D) bzw. Akzeptoren (A)

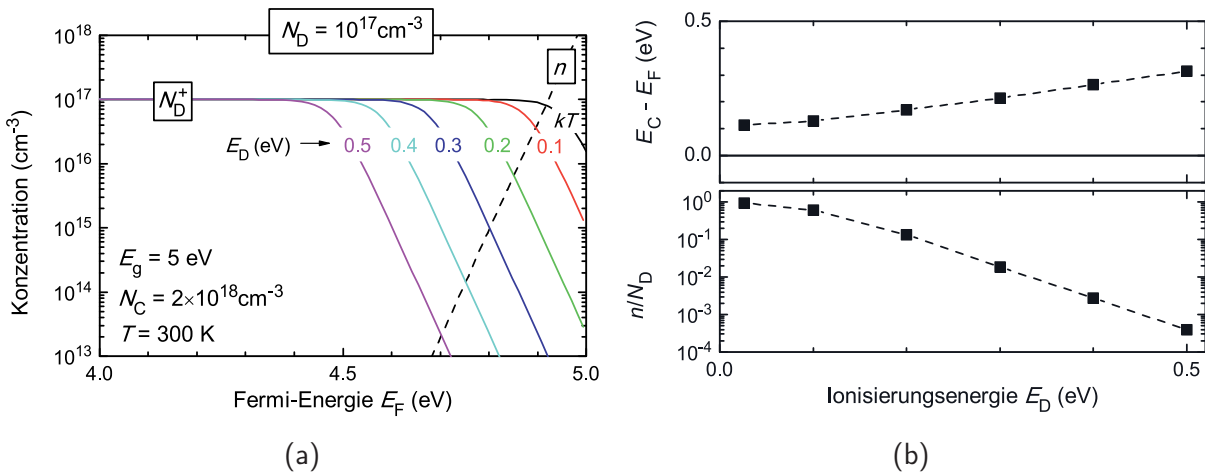
wobei die Faktoren 2 bzw. 4 die Entartung des jeweiligen Grundzustandes beschreiben. Die Konzentration freier Ladungsträger ist durch die Fermi-Energie gegeben und für nicht-entartete Halbleiter ( $N_D \ll N_C$  bzw.  $N_A \ll N_V$ ) ist [56]

$$n = N_C \exp\left(-\frac{(E_C - E_F)/k_B T}{1}\right) \quad (1.19)$$

$$p = N_V \exp\left(-\frac{(E_F - E_V)/k_B T}{1}\right), \quad (1.20)$$

wenn die Fermi-Verteilung durch die Boltzmann-Näherung ersetzt wird.

Grundsätzlich lassen sich die Fermi-Energie und die freie Ladungsträgerkonzentration aus der Forderung nach Ladungsträgerneutralität  $n + N_A^+ = p + N_D^+$  im Halbleiter anhand der Gln. (1.17) bis (1.20) grafisch (bzw. numerisch) ableiten. Dies ist in Abbildung 1.4 für den Fall einer hohen n-Dotierung  $N_D \gg N_A \Rightarrow p = N_A^+ \approx 0$  für einen Halbleiter mit einer



**Abbildung 1.4.:** Zur Erläuterung der Ionisierung von Störstellen. (a) Aus Ladungsträgerneutralität (hier:  $N_D^+ = n$ ) lassen sich die Fermi-Energie  $E_F$  und daraus die freie Ladungsträgerkonzentration  $n$  grafisch für  $N_D = 10^{17}$  cm $^{-3}$  bestimmen. (b) Aus (a) ermittelter Abstand der Fermi-Energie vom Leitungsband (oben) und Ionisierungsgrad (unten) als Funktion der Ionisierungsenergie  $E_D$  der Störstelle.

Bandlücke von 5 eV bei  $T = 300$  K für verschiedene Ionisierungsenergien  $E_D$  gezeigt. Die Schnittpunkte der Kurven  $N_D^+(E_F)$  und  $n(E_F)$  aus Abb. 1.4 a sind in Abb. 1.4 b über der Ionisierungsenergie  $E_D$  bis 0,5 eV aufgetragen. Es zeigt sich, dass für  $N_D = 10^{17}$  cm $^{-3}$  der Abstand des Fermi-Niveaus vom Leitungsband von ca. 0,1 eV auf 0,3 eV steigt und der Ionisierungsgrad  $n/N_D$  stetig sinkt. Liegt das Störstellenniveau also ca. 0,2 eV unterhalb der Leitungsbandkante (tiefe Störstelle) sind in diesem Beispiel gerade einmal 10 % der Störstellen ionisiert.

**Beabsichtigte und unbeabsichtigte n-Dotierung von  $Al_xGa_{1-x}N$**  In  $Al_xGa_{1-x}N$  können gewisse Dotanden beabsichtigt oder unbeabsichtigt ins Kristallgitter eingebaut werden. Im Fall amphoterer Dotanden ist die freie extrinsische Ladungsträgerkonzentration jedoch grundsätzlich durch Kompensationsmechanismen limitiert, da solche Fremdatome, je nach besetzter Kristallgitterstelle, akzeptor- bzw. donatorartigen Charakter aufweisen können [57].

Als effizienter Donator wird am häufigsten Silizium verwendet, das auf einem Ga- oder Al-Gitterplatz ( $Si_{Al}$ ) sein Überschusselektron zur Verfügung stellt [58]. Auch substitutioneller Sauerstoff auf einem N-Gitterplatz ( $O_N$ ) hat donatorartigen Charakter [58]. Für GaN liegen diese beiden Donatoren sehr flach ( $E_D \sim kT$  [59, 60]) unterhalb der Leitungsbandkante. Mit steigendem Al-Gehalt wurde in einer Reihe von Arbeiten jedoch ein starker Anstieg der Ionisierungsenergien von Si und O bis auf mehrere 100 meV nachgewiesen [61, 62]. Außerdem steht ab mittleren Al-Gehalten ( $x > 0,5$ ) für beide jeweils der Übergang vom relativ flachen Donator zum metastabilen DX-Zentrum zur Debatte, was zu Kompensationseffekten und persistenter Photoleitfähigkeit führt [61].

Wird AlGaN nicht beabsichtigt dotiert, liegt es häufig trotzdem mit einer gewissen n-Leitfähigkeit vor. Ursprünglich wurde für dieses Verhalten die Stickstoff-Vakanz  $V_N$  be-



trachtet, um die typischerweise sehr hohe n-Leitfähigkeit von undotiertem GaN von z. B.  $1,8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  in HVPE GaN [18] zu erklären. Nach theoretischen Berechnungen agiert  $V_N$  zwar ebenfalls als flacher Donator in GaN, allerdings ist die Bildungsenergie dieses Defekts sehr hoch, so dass unter normalen Wachstumsbedingungen eher geringere Konzentrationen resultieren [63].

Koleske *et al.* finden in ihrem Wachstumsreaktor (MOVPE) verschiedene Quellen für Silizium [64]. Demnach sind dort die verschiedenen Ausgangsstoffe (MO-Quellen und  $\text{NH}_3$ ), Quartz-Teile im Reaktor (Ga ätzt  $\text{SiO}_2$  und es entsteht  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  mit Si-Ausscheidung), Si-dotiertes Material an Reaktorwänden sowie der mit SiC beschichtete Graphit-Suszeptor (Erosion von SiC unter Saphir in  $\text{H}_2$  oder  $\text{NH}_3$ , so dass Disilan an Wachstumsoberfläche gelangt) als potentielle Quellen für die nachgewiesene Si-Kontamination undotierter GaN-Schichten zu nennen.

Auch Sauerstoff (O) gelangt als Verunreinigung in den MO-Precursorgasen bzw. in Form von CO,  $\text{CO}_2$  bzw.  $\text{H}_2\text{O}$  im  $\text{NH}_3$ -Precursor [65] oder durch das Saphirsubstrat [64] in die AlGaIn-Schichten. Zudem bindet sich O an Al-reichen Oberflächen und ist somit mit steigendem Al-Gehalt zunehmend in AlGaIn-Schichten zu finden [66].

Aus oben Gesagtem ist es nicht verwunderlich, dass auch Kohlenstoff (C) über den MO-Precursor TMAI (Trimethylaluminium,  $\text{Al}(\text{CH}_3)_3$ ) sowie über die Zersetzung des SiC-beschichteten Suszeptors ins AlGaIn gelangt [64]. Nach theoretischen Berechnungen [67] ist C auf einem Kationenplatz ( $C_{\text{Al}}$ ) ein relativ flacher Donator. Im neutralen Zustand kann allerdings auch eine DX-artige metastabile Konfiguration angenommen werden. Auf einem Stickstoffplatz ( $C_{\text{N}}$ ) ist Kohlenstoff hingegen ein flacher Akzeptor, hat eine geringere Bildungsenergie als  $C_{\text{Al}}$  und ist damit die wahrscheinlichere Konfiguration.

### 1.1.3. Optische Eigenschaften

**Optische Konstanten** Die im allgemeinen komplexe dielektrische Funktion

$$\epsilon(\lambda) = \epsilon_1(\lambda) + i\epsilon_2(\lambda) \quad (1.21)$$

dient zur Beschreibung der optischen Eigenschaften eines Materials als Funktion der Wellenlänge  $\lambda$  der elektro-magnetischen Strahlung. Dabei sind Realteil  $\epsilon_1$  und Imaginärteil  $\epsilon_2$  über die Kramers-Kronig-Relation miteinander gekoppelt [68]. Mit Hilfe der dielektrischen Funktion lassen sich sowohl der Brechungsindex  $n_{\text{ref}}$  und der Extinktionskoeffizient  $\kappa$ , als auch der optische Absorptionskoeffizient  $\alpha_{\text{opt}}$  eines Halbleiters ausdrücken

$$\sqrt{\epsilon} = n_{\text{ref}} - i\kappa \quad (1.22)$$

$$\alpha_{\text{opt}} = \frac{2\pi}{\lambda n_{\text{ref}}} \cdot \epsilon_k = \frac{4\pi}{\lambda} \cdot \kappa. \quad (1.23)$$

Für  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  wurde die dielektrische Funktion inzwischen schon im gesamten Kompositionsbereich mittels ellipsometrischer Spektroskopiemethoden bestimmt [69, 70, 71].

**Transmission, Reflektion und Absorption** Trifft eine ebene elektro-magnetischen Welle aus einem Medium 1 – z. B. Vakuum mit  $n_1 = 1$  und  $\kappa_1 = 0$  – senkrecht auf die