Einleitung & Motivation

Laser haben seit der ersten Demonstration im Jahr 1960 ihren Weg in vielfältige Anwendungen gefunden und sind in fast allen Wellenlängenbereichen kommerziell verfügbar. Das tiefe UV mit Wellenlängen <280 nm gehört zu den wenigen Bereichen, für die Laserlichtquellen bisher nur sehr begrenzt zur Verfügung stehen. Gleichzeitig gibt es eine Vielzahl potentieller Anwendungen, z.B. in der Medizin (Fluoreszenzmikroskopie, Atemgasanalyse), in der Datenspeicherung (CD, DVD, Blu-Ray, ...), in der Materialanalyse und Gefahrstoffidentifikation (Ramanspektroskopie) oder auch in der Wasser- und Oberflächendesinfektion. Bei den vorhandenen UV-Strahlquellen handelt es sich in der Regel um Excimerlaser oder frequenzvervielfachte Laser, die nativ wesentlich langwelliger emittieren. Sie alle zeichnen sich durch einen komplexen Aufbau, hohe Anschaffungs- und Wartungskosten, geringe Effizienz, fixe Wellenlängen oder eine beliebige Kombination dieser Eigenschaften aus. Halbleiterlaser hingegen haben aufgrund der frei wählbaren Wellenlänge, der geringen Stückkosten, langen Lebensdauern und der extrem hohen erreichbaren Effizienzen von bis zu 70 % [1] im blauen bis infraroten Spektralbereich ihre Überlegenheit über viele andere Lasersysteme gezeigt. Die Entwicklung blauer Laserdioden auf Basis von Galliumnitrid (GaN) wurde erst Anfang der 1990er durch die Arbeiten von Nakamura, Amano und Akasaki möglich, die erstmals erfolgreich die p-Leitfähigkeit mit Magnesium realisierten [2–5]. Dies eröffnete auch die Möglichkeit zur Realisierung direkt ultraviolett emittierender Laserdioden, da die Bandlücke von Aluminiumgalliumnitrid (AlGaN) den gesamten UV-Bereich von 200–364 nm abdeckt. Unglücklicherweise ist die p-Dotierung trotz weitreichender wissenschaftlicher Fortschritte immer noch eine Herausforderung. Sie wird mit abnehmender Wellenlänge schwieriger, da die Aktivierungsenergie des Mg-Akzeptors mit dem Aluminiumgehalt kontinuierlich von ca. 150 meV auf ca. 500 meV zunimmt, sodass eine thermische Aktivierung der Löcher bei Raumtemperatur ($E_{\text{therm}} = 26 \text{ meV}$) kaum möglich ist.

Hinzu kommt für Wellenlängen unterhalb von ca. 330 nm der Mangel an passenden Substraten. Ungefähr bis zu dieser Wellenlänge kann auf GaN-Substraten gewachsen werden, für höhere Aluminiumgehalte wird der Unterschied in den Gitterkonstanten und damit die Verspannung in den Heterostrukturen aber zu groß, sodass es zur Bildung von Defekten und Rissen kommt. Für den UVC-Bereich wären AlN-Substrate gut geeignet, deren Verfügbarkeit ist allerdings bisher stark limitiert und mit hohen Kosten verbunden, da die Kristalle nicht wie z.B. Silizium aus der Schmelze gezogen werden können, sondern auf wesentlich aufwendigere Wachstumsverfahren (z.B. Physical Vapor Transport) angewiesen sind. Das Wachstum auf Fremdsubstraten wie Siliziumkarbid oder Saphir stellt eine häufig genutzte Alternative dar, führt aber zu hohen Versetzungsdichten im Bereich von 10^9 cm^{-2} oder mehr, die die Effizienz optoelektronischer Bauelemente reduzieren. Die kürzeste Emissionswellenlänge, die mit einer AlGaN-Laserdiode bei Raumtemperatur bisher erreicht wurde, liegt bei 336 nm und wurde im Jahr 2008 von Yoshida et al. demonstriert [6]. Seitdem sind zwar LEDs im gesamten Wellenlängenbereich bis 230 nm realisiert worden, die für Lasing notwendigen Stromdichten und Effizienzen wurden aber nicht erreicht. Dies wirft die Frage auf, ob konventionelle Laserdioden auf AlGaN-Basis im UVC-Bereich überhaupt realisierbar sind. In der Forschung werden vermehrt alternative Ansätze untersucht, die vom Ersetzen klassischer Metallkontakte durch Graphen [7] über die Lochinjektion mittels Tunneldioden [8] und die Frequenzverdopplung blauer Laser [9] bis hin zur Ladungsträgerinjektion mittels Elektronenstrahlpumpen [10] reichen.

Lasing basiert auf stimulierter Emission monochromatischer Strahlung und findet bei deutlich höheren Ladungsträgerdichten statt als der Betrieb einer LED oder auch viele Analysemethoden wie zum Beispiel Photolumineszenzmessungen. Daraus folgt, dass die Optimierung einer Laserstruktur anhand ihrer spontanen Emission häufig nicht zielführend ist. Es ist deutlich einfacher, eine funktionierende Laserstruktur zu optimieren, als einen Laser überhaupt zu realisieren. Dieser Angriffspunkt wird in der vorliegenden Arbeit genutzt, denn unter optischer Anregung ist im UVC-Bereich bereits mehrfach Lasing von AlGaN-Strukturen gezeigt worden [11–13]. Umfangreichere Analysen der Eigenschaften dieser optisch gepumpten Laser wurden allerdings noch nicht veröffentlicht. Hier bietet sich jedoch die Gelegenheit, die limitierenden physikalischen Effekte in diesen Lasern zu identifizieren, sie zu verbessern und so die Laserschwellen zu senken, sodass eventuell auch elektrisch gepumptes Lasing einfacher realisierbar wird.

Im Rahmen dieser Arbeit wird daher untersucht, wie sich verschiedene Parameter auf die Eigenschaften von AlGaN-Lasern mit Emissionswellenlängen im Bereich von 240–250 nm auswirken. Die Untersuchungen beschränken sich auf Kantenemitter-Laser mit Quantenfilmen als aktiver Zone, da diese vergleichsweise einfach zu realisieren sind.

In den ersten beiden Kapiteln wird zunächst eine kurze Einführung in die theoretischen Grundlagen sowie die experimentellen Methoden zur Herstellung und Charakterisierung der Proben gegeben. Kapitel 3 untersucht den Einfluss von Temperatur, Druck und V/III-Verhältnis während des MOVPE-Wachstums von AlGaN-Schichten auf den Wachstumsprozess selbst, die Fremdatomkonzentrationen und die Photolumineszenzeigenschaften der Schichten. Ziel ist es, das Verständnis davon, inwiefern die Wachstumsbedingungen die Materialeigenschaften beeinflussen, zu erhöhen. Es wird gezeigt, dass Silizium, dessen unbeabsichtigter Einbau in den Kristall stark von den Wachstumsbedingungen abhängt, die Lumineszenzintensität der Schichten beeinflusst. In Kapitel 4 werden undotierte Laserstrukturen untersucht. Unter Zuhilfenahme verschiedenster Charakterisierungsmethoden wird der Einfluss der AlN/Saphir-Templates und des Heterostrukturdesigns auf die Lasereigenschaften analysiert. Kapitel 5 schließlich greift das Thema der Siliziumdotierung aus Kapitel 3 wieder auf und vereint es mit den Laserergebnissen aus dem vorherigen Kapitel. Durch Dotierung verschiedener Schichten in der Laserstruktur mit unterschiedlich hohen Siliziumkonzentrationen ist hier eine detaillierte Analyse des Siliziumeinflusses möglich und die für die optischen Eigenschaften und die Laserschwelle relevanten physikalischen Effekte können identifiziert werden.

Am Ende der Arbeit steht eine Zusammenfassung, in der auch die Übertragbarkeit der Ergebnisse auf andere Halbleiterbauelemente diskutiert wird.

Kapitel 1. Theoretische Grundlagen

Im folgenden Kapitel wird auf grundlegende physikalischen Eigenschaften von Aluminiumgalliumnitrid (AlGaN) und Halbleiterlasern eingegangen. Da zu diesen Themen bereits unzählige Bücher existieren, sollen nur die für diese Arbeit relevantesten Eigenschaften und Effekte wiedergegeben werden. Für das AlGaN-Materialsystem zählen dazu die für das epitaktische Wachstum und das Heterostrukturdesign entscheidende Kristall- und Bandstruktur inklusive der elektrischen Polarisationsfelder, welche einen signifikanten Einfluss auf die Ladungsträgerrekombination in Quantenfilmen hat. Für Laser sind die Ladungsträgergenerations- und -rekombinationsprozesse, die Ausbildung optischer Moden im Resonator und die sich aus dem Zusammenspiel dieser Effekte ergebenden Bedingungen für Lasing von besonderem Interesse.

1.1. AIGaN-Halbleiter

1.1.1. Kristall- und Bandstruktur

Die thermodynamisch stabile Kristallstruktur von AlGaN ist die Wurtzitstruktur. Unter entsprechenden Bedingungen ist auch Wachstum in Zinkblendestruktur möglich [14–17], während Kristallisation in der Steinsalzstruktur nur bei sehr hohen Drücke >500 GPa stattfindet [18]. Alle weiteren Beschreibungen beziehen sich daher auf die Wurtzitstruktur, die in Abbildung 1.1(a) dargestellt ist. Sie besteht aus zwei hexagonalen Gittern, die gegeneinander verschoben sind. Dabei sitzt ebenso jedes Gruppe-III-Atom im Zentrum einer Tetraederbindung mit vier Stickstoffatomen wie jedes Stickstoffatom mit vier Gruppe-III-Atomen verbunden ist.

Die Gitterkonstanten a und c sowie die Bandlücken E_g für AlN und GaN sind in Tabelle 1.1 aufgeführt. Für unverspannte Mischkristalle $Al_xGa_{(1-x)}N$ mit dem Al-Gehalt x und dem Ga-Gehalt (1-x) können die Gitterkonstanten über die Vegard'sche Formel interpoliert werden [19]:

$$a(\operatorname{Al}_{x}\operatorname{Ga}_{(1-x)}\operatorname{N}) = x \times a(\operatorname{AlN}) + (1-x) \times a(\operatorname{GaN})$$
(1.1)

$$c(\operatorname{Al}_{x}\operatorname{Ga}_{(1-x)}\operatorname{N}) = x \times c(\operatorname{AlN}) + (1-x) \times c(\operatorname{GaN})$$
(1.2)

Diese Formeln gelten allerdings nur bei Mittelung über viele Einheitszellen, da die Abstände der einzelnen atomaren Bindungen sich mit der Zusammensetzung nur wenig ändern [20]. Die Bandlücke von ternärem $Al_xGa_{(1-x)}N$ kann ebenso über Interpolation berechnet werden.



Abbildung 1.1.: (a) Schematische Darstellung der Einheitszelle von AlGaN in der Wurtzitstruktur. Durchgezogene Linien repräsentieren chemische Bindungen, gestrichelte Linien dienen zur Veranschaulichung der hexagonalen Einheitszelle. **(b)** Bandlücke E_g von Al_xGa_(1-x)N aufgetragen über der a-Gitterkonstante. Die rechte y-Achse zeigt entsprechende Wellenlänge und die obere x-Achse den Aluminiumgehalt x.

Experimentell zeigt sich allerdings ein nichtlinearer Zusammenhang, sodass ein zusätzlicher Bowingparamter b = 0.7 [21] eingeführt werden muss (Abb. 1.1(b)):

$$E_g(\operatorname{Al}_x\operatorname{Ga}_{(1-x)}\operatorname{N}) = x \times E_g(\operatorname{AlN}) + (1-x) \times E_g(\operatorname{GaN}) - x \times (1-x) \times b \tag{1.3}$$

Material	a (Å)	c (Å)	$E_{\rm g}~({\rm eV})$	$E_g (nm)$
AlN GaN	$3.112 \\ 3.189$	$4.982 \\ 5.186$	$6.00 \\ 3.43$	$207 \\ 362$

Tabelle 1.1.: Gitterkonstanten *a* und *c* sowie Bandlücken E_{α} von AIN und GaN (aus [22]).

Die Bandlücke wird durch den Abstand des Leitungsband (LB) vom obersten Valenzband (VB) am Γ -Punkt definiert. Das Leitungsband wird dabei aus s-Orbitalen gebildet, während das Valenzband von p_x -, p_y - und p_z -Orbitalen gebildet wird [23]. Aus dieser Überlagerung ergibt sich eine dreifache Entartung, die in der Wurtzitstruktur durch das Kristallfeld und durch die Spin-Bahn-Kopplung aufgehoben wird, sodass sich das Valenzband in Leichtloch-(light hole, lh), Schwerloch- (heavy hole, hh) und Split-Off-Band (so) aufspaltet. Die Benennung von lh- und hh-Band erfolgt nach den effektiven Massen der Löcher, die über die 2. Ableitung der Energie-Impuls-Beziehung definiert werden:

$$E = \frac{\vec{p}}{2m_{\rm eff}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_{ij}^*}$$
(1.4)

$$m_{ij}^* = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}\right)^{-1} \tag{1.5}$$

4



Abbildung 1.2.: (a), (b) Bandstruktur von GaN und AIN in der Nähe des Γ-Punkts, (c), (d) vergrößerter Ausschnitt, der die unterschiedliche Aufspaltung von Ih, hh- und so-Valenzband in GaN und AIN zeigt [24].

Wie in Abb. 1.2 zu sehen, ist die Krümmung des hh-Bands am Γ -Punkt kleiner als die des lh-Bands, d.h. die effektive Masse im hh-Band ist größer. Während bei GaN das hh-Band oben liegt, ist es bei AlN das so-Band. Dieses ist mit einem p_z-Orbital assoziiert, d.h. bei strahlenden Übergängen unter Beteiligung dieses Bandes schwingt das Dipolmoment entlang der c-Achse des Kristalls und die elektromagnetische Welle breitet sich demzufolge senkrecht dazu aus. Das Licht ist transversal magnetisch (TM) polarisiert und es erfolgt keine Abstrahlung in c-Richtung. Während dies für Kantenemitter-Laser kein fundamentales Problem ist, ergeben sich bei Licht emittierenden Dioden (LEDs), aber auch bei Photolumineszenz (PL)-Messungen Schwierigkeiten, wenn die Emission aus der Probenoberfläche detektiert werden soll. Der Aluminiumgehalt, bei dem das so-Band die oberste Position einnimmt, hängt stark von der Verspannung der Schicht ab. In auf AlN gewachsenen, kompressiv verspannten AlGaN-Quantenfilmen (Quantum Wells, QWs) ergibt sich typischerweise für Emissionswellenlängen unterhalb von 240–250 nm dominante TM-Polarisation [25], während dies bei unverspanntem AlGaN bereits unterhalb von ca. 300 nm der Fall ist [26, 27].

1.1.2. Polarisation

In einem idealen Wurtzitkristall sind die Bindungslängen aller Tetraederbindungen identisch. Aufgrund der großen Unterschiede in der Größe der Gruppe-III-Atome (Al, Ga) und des Stickstoffs ist dies in AlGaN jedoch nicht der Fall und das Gitterkonstanten-Verhältnis c/a ist deutlich niedriger als der Idealwert $\sqrt{8/3} \approx 1.633$, wobei der Unterschied mit zunehmendem Al-Gehalt zunimmt (c/a(GaN) = 1.626, c/a(AlN) = 1.601) [28]. Verbunden damit ist der interne Zellparameter u (Quotient aus Anion-Kation-Abstand und c-Gitterkonstante) größer als der Idealwert von 3/8 [28]. Hinzu kommt, dass die unterschiedlichen Elektronegativitäten von (Al, Ga) und N zu einer Verschiebung der Bindungselektronen zum Stickstoff führen. Diese Effekte haben die Ausbildung eines Dipolmoments zur Folge, welches als spontane Polarisation $P_{\rm SP}$ bezeichnet wird. $P_{\rm SP}$ ist in AlGaN im gesamten Kompositionsbereich negativ und nimmt mit zunehmendem Aluminiumgehalt zu [29]. Wird das Kristallgitter durch äußere Einflüsse, wie z.B. Verspannung in Heterostrukturen, weiter verzerrt, entsteht ein zusätzliches Dipolmoment, die piezoelektrische Polarisation $P_{\rm PZ}$. Im für diese Arbeit relevanten Fall von kompressiv auf metallpolarem AlN gewachsenen AlGaN ist $P_{\rm PZ}$ positiv und damit $P_{\rm SP}$ entgegen gerichtet [30]. Die Gesamtpolarisation $P_{\rm tot}=P_{\rm SP}+P_{\rm PZ}$ wird also durch die kompressive Verspannung reduziert. Maßgebliche theoretische Arbeiten zur Polarisation in Nitriden wurden von Bernardini und Fiorentini geleistet [29, 31–35]. Neuere Arbeiten deuten jedoch darauf, dass die berechneten Werte zumindest die spontane Polarisation überschätzen [36–40]. Mögliche Ursachen hierfür sind Grenzflächenzustände und höhere Ordnungen des piezoelektrischen Effekts, die ein entgegengesetztes Vorzeichen aufweisen können.

Die Differenz in der Polarisation zweier Schichten $i,\,j$ führt zur Ausbildung einer Grenzflächenladung

$$\sigma_{i \to j} = -\Delta P_{\text{tot}} = -(P_{\text{tot},i} - P_{\text{tot},j}), \qquad (1.6)$$

die z.B. an der Grenzfläche von unverspanntem AlN zu verspanntem AlGaN negativ ist. Die durch die Grenzflächenladungen erzeugten elektrischen Felder weisen Feldstärken im Bereich von einigen MV/cm auf und verursachen daher starke Bandverbiegungen. In Quantenfilmen führt dies zum Quantum Confined Stark Effect (QCSE). Die Verkippung der Bänder trennt die Elektronen- und Lochwellenfunktion und verringert gleichzeitig den Abstand der gebundenen Zustände, sodass es zu einer Rotverschiebung der Emissionswellenlänge kommt (Abb. 1.3)¹.



Abbildung 1.3.: (a) Bandstruktur sowie Elektronen- und Lochwellenfunktion in einem GaN/AlGaN-Quantenfilm einmal mit und einmal ohne QCSE, (b) Experimentell bestimmte Abhängigkeit der Wellenlänge eines AlGaN-Lasers von der Pumpleistung unter optischer Anregung. Die Laserschwelle P_{thr} liegt bei 1800 kW/cm².

Der verringerte Überlapp der Wellenfunktionen reduziert die Wahrscheinlichkeit für strahlende Rekombination. Der Effekt nimmt mit der Quantenfilmdicke zu [41], sodass insbesondere für LEDs dünne Quantenfilme vorteilhaft sind [42, 43]. In die Heterostruktur

¹QCSE bezeichnet im engeren Sinne nur die Rotverschiebung der Emissionswellenlänge. In dieser Arbeit wird der Begriff weiter gefasst und auch für die Beeinflussung der Bandkanten durch die Polarisationsfelder verwendet.

injizierte Ladungsträger schirmen die internen Felder allerdings ab, sodass der Einfluss des QCSE auf Laser geringer ausfällt, da diese bei wesentlich höheren Anregungsleistungsdichten betrieben werden [44, 45]. Dies ist wie in Abb. 1.3(b) dargestellt auch an einer deutlichen Verschiebung der Emission mit zunehmender Pumpleistung hin zu kürzeren Wellenlängen erkennbar [46]. Die Wellenlängenverschiebung wird allerdings bei hohen Ladungsträgerdichten eventuell durch Band Filling (Burstein-Moss-Effekt) verstärkt [47–49], während Bandlückenrenormalisation durch die Wechselwirkung von Elektronen untereinander und mit Punktdefektionen zu einer kompensierenden Rotverschiebung führt [49, 50]. Für die Rotverschiebung ab 2 MW/cm² ist hauptsächlich Erwärmung verantwortlich, da die Ladungsträgerdichte in der aktiven Zone und damit auch der Einfluss ladungsträgerdichteabhängiger Effekte oberhalb der Schwelle konstant sind.

1.2. Laser

Laser (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation) erzeugen monochromatisches, kohärentes, gerichtetes Licht. Sie bestehen aus einem Resonator, in dem sich stehende Wellen des elektromagnetischen Feldes, sogenannte Moden ausbilden. Im Resonator befindet sich das Gewinnmedium, in dem die Photonen durch stimulierte Emission erzeugt werden.

Halbleiterlaser lassen sich auf vielfältige Weise realisieren. Dabei kann z.B. nach dem aktiven Medium (Quantenfilmlaser, Quantenpunktlaser, Quantenkaskadenlaser, etc.) oder nach der Bauform (Kantenemitter, Vertical Cavity Surface Emitting Laser (VCSEL), Scheibenlaser, etc.) unterschieden werden. Alle weiteren Erläuterungen beziehen sich auf die in dieser Arbeit relevanten Kantenemitter mit Quantenfilmen als aktivem Medium. Im Folgenden wird zunächst die Ladungsträgerdynamik als Grundlage für die Photonenemission erläutert, bevor anschließend näher auf die Eigenschaften des optischen Resonators eingegangen wird.

1.2.1. Ladungsträgerdynamik

In Halbleitern findet kontinuierlich die Generation und Rekombination von Ladungsträgern statt. Im stationären Fall, d.h. im thermodynamischen Gleichgewicht ohne äußere Störung ebenso wie unter kontinuierlicher Anregung beispielsweise mit Laserlicht, ist die Generationsrate G stets genauso groß wie ihre Rekombinationsrate R:

$$G - R = 0$$
 (1.7)

Bei gepulster Anregung führt die erhöhte Ladungsträgerdichte zeitweilig zu einer verstärkten Rekombinationsrate, die anschließend kontinuierlich auf den Gleichgewichtswert zurück geht.

Generation Die Generation der Ladungsträger kann durch Strominjektion (Diodenlaser), durch optische Anregung [51–53] oder auch durch einen Elektronenstrahl erfolgen [10, 54, 55]. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die optische Anregung gewählt (Abb. 1.4(a)).

Damit Elektron-Loch-Paare erzeugt werden können, muss die Photonenenergie der Anregungsquelle mindestens so groß wie die Bandlücke des Halbleiters sein. Ist dies der Fall, so nimmt die Anregungsintensität I_0 beim Durchlaufen des Halbleitermaterials exponentiell ab [56, 57] und die in einer Schicht der Dicke *d* absorbierte Intensität I_{abs} kann über

$$I_{\rm abs} = I_0 \left(1 - e^{-\alpha d} \right) \tag{1.8}$$

berechnet werden. Der Absorptionskoeffizient α hängt dabei unter anderem vom Übergangsmatrixelement der beteiligten Zustände sowie den Zustandsdichten (Density of States, DOS) und Besetzungswahrscheinlichkeiten ab. Da ein Quantenfilmlaser aus mehreren Halbleiterschichten mit unterschiedlicher Zusammensetzung und damit unterschiedlicher Bandlücke besteht, werden abhängig von der Anregungswellenlänge Ladungsträger entweder nur in den Quantenfilmen oder auch in den umliegenden Wellenleiter- und ggf. den Mantelschichten generiert. Die QWs weisen die niederenergetischsten Elektronenund Lochniveaus aller Schichten auf, sodass sich die Ladungsträger in ihnen sammeln. Da bei der optischen Anregung im Gegensatz zur Strominjektion kein elektrisches Feld die Drift der Ladungsträger in die QWs verursacht, steigt die Wahrscheinlichkeit, dass Ladungsträger rekombinieren, bevor sie durch statistische Diffusion die Quantenfilme erreichen. Der Effekt ist aufgrund der exponentiellen Abnahme der Generationsrate mit der Eindringtiefe besonders groß, wenn das Pumplicht bereits in einer dicken oberen Mantelschicht absorbiert wird. Der Einfluss dieses Effekts lässt sich reduzieren, indem die Ladungsträgergeneration möglichst nah bei den Quantenfilmen erfolgt, z.B. indem die Anregungswellenlänge so gewählt wird, dass nur in den QWs und den Wellenleitern Elektron-Loch-Paare erzeugt werden. Abgesehen von praktischen Erwägungen (es muss eine Anregungsquelle mit passender Wellenlänge vorhanden sein), reduziert dies jedoch die Effektivität des Pumpprozesses und damit die Gesamtmenge der erzeugten Ladungsträger, da aufgrund der geringen Dicke der Wellenleiterschichten nur ein Teil des Pumplichts absorbiert wird. Ein alternativer Ansatz ist die Wahl einer dünnen oberen Mantelschicht, sodass auch bei Absorption des Pumplasers in allen Schichten möglichst viele Ladungsträger im Bereich der Diffusionslänge um die Quantenfilme generiert werden. Nachteilig bei Anregung der gesamten Heterostruktur ist der größere Wärmeeintrag, da die Differenz zwischen der Photonenenergie der Pumpquelle und der Bandlücke der QWs in Wärme umgewandelt wird, wenn die Ladungsträger an die Bandkanten bzw. in die Quantenfilme relaxieren [58, S. 281].

Strahlende Rekombination Die strahlende Rekombination bezeichnet hier die Rekombination von Leitungsband-Elektron und Valenzband-Loch unter Emission eines Photons. Es muss zwischen der spontanen und der stimulierten Emission unterschieden werden. Die stimulierte Emission wird durch ein bereits vorhandenes Photon ausgelöst, wobei das emittierte Photon identische Eigenschaften (Wellenlänge, Polarisation, Ausbreitungsrichtung) hat (Abb. 1.4(c)). Die Rate der stimulierten Emission $R_{\rm stim}$ für einen Übergang von einem Niveau E_2 im Leitungsband zu einem Niveau E_1 im Valenzband unter Aussendung eines Photons mit der Energie $E_{21} = h\nu$ hängt über

$$R_{\rm stim}(E_{21}) = B_{21} \times n_{\rm ph}(h\nu) \times D_{\rm LB}(E_2 - E_{\rm LB}) \times D_{\rm VB}(E_{\rm VB} - E_1) \times (f_2 - f_1)$$
(1.9)

8

vom Einsteinkoeffizienten der stimulierten Emission B_{21} , der Photonendichte $n_{\rm ph}$ sowie den Zustandsdichten $D_{\rm LB}$, $D_{\rm VB}$ und Besetzungswahrscheinlichkeiten f_1 , f_2 der Niveaus im VB und LB ab [59, S. 50]. $E_{\rm VB}$ und $E_{\rm LB}$ sind die Valenz- und Leitungsbandkantenenergien. Der Einsteinkoeffizient wiederum beinhaltet das optische Übergangsmatrixelement. Die Formel für die Rate der spontanen Emission (Abb. 1.4(b)) hängt vom Einsteinkoeffizienten der spontanen Emission A_{21} ab und ist unabhängig von der Photonendichte $n_{\rm ph}$:

$$R_{\rm sp}(E_{21}) = A_{21} \times D_{\rm LB}(E_2 - E_{\rm LB}) \times f_2 \times D_{\rm VB}(E_{\rm VB} - E_1) \times (1 - f_1)$$
(1.10)

Im realen Halbleiter sind die Zustände kontinuierlich verteilt, sodass über alle Übergänge, die $h\nu$ bzw. E_{21} entsprechen, integriert werden muss [60, S. 197]. Unter Annahme parabolischer Bänder und bei Verwendung der Boltzmann-Näherung für die Verteilungsfunktion im nicht entarteten Halbleiter führt dies für die stimulierte Emission zu

$$R_{\rm stim} = npB_{21}n_{\rm ph} \tag{1.11}$$

und für die spontane Emission zu

$$R_{\rm sp} = npA_{21} \tag{1.12}$$

Quantenfilme sind für die strahlende Rekombination in dreifacher Hinsicht vorteilhaft. Erstens sammeln Elektronen und Löcher sich in einem kleinen Bereich, sodass in diesem die Ladungsträgerdichte und damit die Besetzungswahrscheinlichkeit der Niveaus ansteigt, wodurch sich die Wahrscheinlichkeit für strahlende Rekombination erhöht. Zweitens verändert die eindimensionale Diskretisierung der Energieniveaus die DOS in den Quantenfilmen zu einer Rechteckfunktion, sodass bereits bei der minimalen Übergangsenergie eine höhere Zustandsdichte verfügbar ist [61]. Drittens erhöht die räumliche Konzentration der Ladungsträger den Überlapp ihrer Wellenfunktionen $\Psi_{\rm e}(x)$, $\Psi_{\rm h}(x)$ und damit auch die strahlende Rekombinationsrate, da die Einsteinkoeffizienten im Quantenfilm $B_{\rm QW}$, $A_{\rm QW}$ über den Wellenfunktionsüberlapp $F_{\rm LV} = \int_0^\infty \Psi_{\rm h}^*(x)\Psi_{\rm e}(x) dx$ mit den Einsteinkoeffizienten im Volumenhalbleiter $B_{\rm bulk}$, $A_{\rm bulk}$ verknüpft sind [62–64]:

$$B_{\rm QW} = |F_{\rm LV}|^2 B_{\rm bulk}$$
 (1.13)

$$A_{\rm QW} = |F_{\rm LV}|^2 A_{\rm bulk} \tag{1.14}$$

Dieser Vorteil wiederum wird durch den QCSE verringert, da die Verkippung der Bänder zu einer räumlichen Trennung der Wellenfunktionen führt.

Nichtstrahlende Defektrekombination Defekte (Fremdatome, Versetzungen) – auch Traps genannt – bilden lokalisierte Energiezustände nahe der Mitte der Bandlücke aus. Werden ein Elektron aus dem Leitungsband und ein Loch aus dem Valenzband in demselben Defektzustand eingefangen, so können diese anschließend nichtstrahlend rekombinieren (Abb. 1.4(d)). Die Rekombinationsrate lässt sich nach der Shockley-Read-Hall (SRH)-Theorie [65, 66] berechnen über:

$$R_{\rm SRH} = \frac{np - n_{\rm i}^2}{\tau_n \left(p + N_{\rm VB} \exp\left\{\frac{E_{\rm VB} - E_{\rm T}}{k_{\rm B}T}\right\} \right) + \tau_p \left(n + N_{\rm LB} \exp\left\{\frac{E_{\rm T} - E_{\rm LB}}{k_{\rm B}T}\right\} \right)}$$
(1.15)



Abbildung 1.4.: (a) Generation eines Elektron-Loch-Paars durch Absorption eines Photons, (b) Rekombination unter spontaner Emission, (c) Rekombination unter stimulierter Emission, (d) Elektroneneinfang durch einen Defektzustand in der Mitte der Bandlücke unter Multiphonoenemission, gestrichelt sind die Vibrationsniveaus dargestellt, (e) Augerrekombination unter Anhebung eines Elektrons im Ih-VB, (f) Augerrekombination unter Anhebung eines Elektrons im LB. Gefüllte Kreise stellen besetzte Zustände/Elektronen dar, leere Kreise leere Zustände/Löcher.

Dabei sind

10

n, p	Konzentrationen von Elektronen und Löchern,
n _i	intrinsische Ladungsträgerkonzentration,
τ_n, τ_p	SRH-Lebensdauern,
$N_{\rm VB}, N_{\rm LB}$	Zustandsdichten in VB und LB,
$E_{\rm VB}, E_{\rm LB}$	Valenz- und Leitungsbandenergien,
$E_{\rm T}$	Defektenergieniveau und
$k_{\rm B}$	Boltzmann-Konstante,
Т	Temperatur.

Davon ausgehend, dass Elektronen und Löcher in gleichem Maße generiert werden, also $n \approx p$, steht in Formel 1.15 die Ladungsträgerdichte im Zähler im Quadrat (np), im Nenner aber nur in der Summe. Die SRH-Rekombinationsrate ist also annähernd proportional zur Ladungsträgerkonzentration. Daraus folgt, dass die SRH-Rekombination mit steigender Anregungsleistung gegenüber der strahlenden Rekombination an Bedeutung verliert, da letztere quadratisch von der Ladungsträgerdichte abhängt (Formeln 1.11, 1.12).

Der Einfang von Elektron und Loch in den Defektzustand kann entweder durch Auger-Rekombination, durch Emission eines Photons oder über Multiphononenprozesse stattfinden. Störstellen-Augerrekombination ist proportional zur dritten Potenz der Ladungsträgerkonzentration und daher in der Regel vernachlässigbar. Der strahlende Einfang ist sowohl in GaN ("gelbe Lumineszenz") als auch in AlGaN bekannt [67, 68]. Auch wenn die eigentliche Rekombination nichtstrahlend erfolgt, ist dieser Prozess aufgrund der Photonenemission einfach optisch detektierbar.