

Optische Untersuchung von semipolaren
InGaN/GaN-Quantengraben mit der Kristallorientierung $(20\bar{2}\bar{1})$
und $(20\bar{2}\bar{1})$

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

genehmigt durch die Fakultät für Naturwissenschaften der Otto-von-Guericke-Universität
Magdeburg

von Dipl. Physiker Stefan Freytag

geb. am 10.02.1987 in Braunschweig

Gutachter: PD Dr. rer. nat. Martin Feneberg

Prof. Dr. rer. nat. habil. Norbert Esser

eingereicht am: 20.01.2020

verteidigt am: 08.06.2020

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
2	Grundlegende Eigenschaften der Gruppe-III-Nitride	7
2.1	Kristallographische Orientierungen des Substrates	7
2.2	Winkel zwischen zwei Ebenen im hexagonalen Kristallsystem	8
2.3	Verzerrung und Verspannung	12
2.3.1	Verzerrung in beliebigen Koordinaten	14
2.4	Polarisation	18
2.4.1	Spontane Polarisation	19
2.4.2	Piezoelektrische Polarisation	21
2.5	Stark-Effekt in Quantenstrukturen	22
3	Dioden	25
3.1	Elektrisches Feld in der aktiven Zone	25
3.2	Probenaufbau	26
4	Elektroreflexion und Photoreflexion	29
4.1	Messplatz	30
4.2	Bestimmung der optimalen Modulationsfrequenz	32
4.3	Auswertung der vom Lock-in-Verstärker ausgegebenen Messwerte	34
4.3.1	Mittelwertbildung der Messwerte	34
4.3.2	Anpassung mit exponentiellem Fit	35
4.3.3	Gaußfit der Verteilung der Messwerte um das Messsignal	35
4.3.4	Frequenzfilterung des Messsignals	36
4.3.5	Vergleich der verschiedenen Auswerteverfahren	36
4.4	Beschreibung der Linienform der Elektroreflexion	38
4.4.1	Die dielektrische Funktion	38
4.4.2	Franz-Keldysh-Effekt	39
4.4.3	Grundzustand des Quantengrabens	43
4.4.4	Berücksichtigung der Schichtstruktur für die Linienformanpassung	45
4.5	Auswertung der ER-Spektren	51
4.5.1	Semipolare Probe A	51
4.5.2	Elektrisches Feld der GaN-Barrieren	60
4.5.3	Semipolare Probe B	63
5	Photostrom	67
5.1	Aufbau des Photostrom-Messplatzes	67
5.2	Polarisationsabhängige Charakterisierung des Photostrom-Messplatzes	68

5.3	Photostrommessungen	71
5.3.1	Signal des GaN	73
5.3.2	Signal des Quantengrabens	75
6	Photolumineszenz und Elektrolumineszenz	81
6.1	Photolumineszenz	81
6.1.1	Setup und Funktionsweise	81
6.1.2	Unkontaktierte Photolumineszenz-Messungen	82
6.1.3	Kontaktierte Photolumineszenz-Messungen	84
6.2	Elektrolumineszenz	85
6.2.1	Spannungsabhängige Elektrolumineszenz	89
7	Zusammenfassung	93
8	Anhang	97
8.1	Piezoelektrische Tensorelemente	97
8.2	Charakterisierung durch Photolumineszenz nahe der Bandkante	97
9	Literatur	101

1 Einleitung

Die Gruppe-III-Nitride mit ihren Vertretern GaN, InN und AlN bilden zusammen mit ihren ternären Verbindungshalbleitern ein Materialsystem mit außergewöhnlichen Eigenschaften. Bei diesen handelt es sich z.B. um eine sehr unterschiedliche Bandlücke, die je nach Kombination der verschiedenen Gruppe-III-Elemente den ganzen optischen Bereich vom nahen Infrarot bis zum tiefen Ultraviolett abdecken kann. Im Gegensatz zu Materialien wie Si besitzen die Gruppe-III-Nitride eine direkte Bandlücke. Diese und weitere Vorteile wie z.B. eine hohe thermische Leitfähigkeit, einen sehr guten thermischen bzw. chemischen Widerstand aber auch hohe Durchbruchsspannungen prädestinieren sie sowohl für mikroelektronische als auch für optoelektronische Anwendungen [1, 2]. Die Gruppe-III-Nitride werden unter anderem in Leuchtdioden (engl. light emitting diode, LED)[3], Laserdioden (engl. laser diode, LD) [4], Solarzellen [5], Transistoren mit hoher Elektronen-Beweglichkeit (engl. high electron mobility transistor, HEMT) [6] und Flüssigkristallbildschirmen (engl. liquid crystal display, LCD) [7] eingesetzt.

Die große Bedeutung von LED-Strukturen auf Basis der Gruppe-III-Nitride findet ihren Ausdruck in der Verleihung des Nobelpreises für Physik im Jahr 2014 an S. Nakamura, H. Amano und I. Akasaki für ihre Arbeit an der Realisierung der ersten GaN-LED-Strukturen. In den letzten beiden Jahrzehnten wurden LEDs auf Basis der Gruppe-III-Nitride stetig in ihrer Effizienz verbessert und ersetzen im immer größeren Maße herkömmliche Leuchtmittel. Die kommerziell genutzten Bauelemente werden auf einem Fremdsubstrat wie z.B. Saphir bzw. Siliziumcarbid gewachsen und das darauf aufgewachsene GaN besitzt typischerweise eine hexagonale Wurtzitstruktur mit einer (0001) Orientierung. Diese Orientierung wird als polar bzw. c-orientiert bezeichnet. Um den stetigen Prozess der Verbesserung von LEDs fortzuführen und das Potential dieses Materialsystems vollständig auszuschöpfen, werden seit über einem Jahrzehnt Untersuchungen an unterschiedlichen vielversprechenden Kristallebenen durchgeführt.

Einen wichtigen Untersuchungspunkt auf den unterschiedlichen Kristallebenen stellt das intrinsische elektrische Feld in der aktiven Schicht der LED dar. Dieses führt zu einer Trennung der Elektronen- und Löcherwellenfunktion im Leitungs- bzw. Valenzband der aktiven Schicht, was im Allgemeinen als hinderlich für eine LED angesehen wird. Der negative Einfluss dieses Effektes liegt z.B. daran, dass mit dem geringeren Überlapp der Wellenfunktionen der Ladungsträger eine geringere strahlende Rekombination verbunden ist, aber auch dass sich die Emissionswellenlänge der LED bei unterschiedlichen Betriebsspannungen deutlich verändert. Bei der Verwendung von nonpolarefn bzw. semipolaren Orientierungen sind diese Felder null bzw. deutlich reduziert und stellen damit ein wichtiges Forschungsgebiet dar. Diese Arbeit wird sich detailliert mit Proben in semipolarer

Orientierung beschäftigen.

Bei vielen Untersuchungen an den unterschiedlichen Orientierungen stützen sich die meisten Ergebnisse auf die Messmethoden Elektrolumineszenz bzw. Photolumineszenz. Betrachtet man die Elektrolumineszenz, so ist diese nur im Spannungsbereich oberhalb der Durchlassspannung zu messen. Dies beschränkt den Untersuchungsbereich stark und liefert damit nur eingeschränkte Informationen über die Proben. Bei der Photolumineszenz sinkt die messbare Intensität deutlich mit steigender elektrischer Feldstärke der aktiven Zone der LED, wodurch ebenfalls eine Begrenzung des Messbereichs zu verzeichnen ist. Dies ist bei kleinen Intensitäten wie sie bei bestimmten polarisationsabhängigen Messungen auftreten ein Nachteil. Trotz ebenfalls vorhandener Beschränkungen bei der Methode der Elektroreflexion (ER), wie z.B. die Messung unterhalb der Durchlassspannung einer Diode, besitzt die ER einige Vorteile. Im Gegensatz zu den genannten Emissionsmessungen nutzt die Messmethode der ER eine Veränderung der optischen Eigenschaften aus. Hierbei wird das elektrische Feld der Probe variiert und liefert ein Messsignal, welches proportional zur Ableitung der Zustandsdichte ist. Damit ist die ER in der Lage die energetischen Zustände sehr genau zu detektieren. Die Messung kann im Vergleich zur Photolumineszenz auch bei ansteigendem elektrischen Feld durchgeführt werden und wird als hauptsächliche Untersuchungsmethode in dieser Arbeit bevorzugt.

Das Hauptziel dieser Arbeit ist die experimentelle Ermittlung des Polarisationsfeldes von semipolaren Proben. Dieses ist nur vereinzelt und für ausgewählte semipolare Orientierungen gemessen worden und stellt einen wichtigen Parameter bei dem Design von LED-Strukturen dar. Ein Grund für das Fehlen von experimentell ermittelten Polarisationsfeldern ist z.B. die besonders geringe Größe des Polarisationsfeldes von semipolaren Proben. In dieser Arbeit wird dementsprechend mit der ER eine experimentelle Methode verwendet, welche für die Untersuchung von Probenstrukturen mit geringen elektrischen Feldstärken geeignet ist.

Nach einer kurzen Einführung in das Thema werden zunächst die grundlegenden Eigenschaften der Gruppe-III-Nitride vorgestellt. Hierbei wird vor allem auf die Verzerrung und Verspannung der aktiven Schicht einer LED eingegangen, die beim Wachstum auf einer unverzerrten GaN-Schicht entsteht. Die Berechnung erfolgt nach dem Formalismus von Romanov *et al.* [8] und ist abhängig von der betrachteten Substratorientierung. Im dritten Kapitel werden einige Eigenschaften der pin-Dioden vorgestellt. Dabei wird sich auf die elektrische Feldstärke im intrinsischen Gebiet der Diode konzentriert. Den Abschluss dieses Kapitels stellen die untersuchten Probenstrukturen dar. Hierbei handelt es sich um zwei Proben, die eine Substratorientierung von $(20\bar{2}1)$ bzw. $(20\bar{2}1)$ aufweisen. Im Kapitel vier wird insbesondere die ER behandelt. Den Beginn bildet die Optimierung des zugehörigen Setups und des Messsignals. Daraufhin werden die für die Auswertung nötigen

grundlegenden Eigenschaften der dielektrischen Funktion dargelegt. Diese werden genutzt, um die Änderung der Reflexion zwischen unterschiedlichen Feldstärken zu ermitteln. Um die Schichtstruktur der Proben zu berücksichtigen wurde ein Schichtmodell [9, 10] benutzt und für die Beschreibung des Messsignals der ER verwendet. Die Kombination aus angenommener dielektrischer Funktion und dem angesprochenen Schichtmodell ermöglicht eine sehr genaue Beschreibung des ER-Signals des Grundzustandes einer Vielschichtquantenstruktur (engl. multi-quantum-well (MQW)) und ist für die Auswertung von semipolaren Proben bisher einzigartig. Die Elemente des piezoelektrischen Tensors werden in der Literatur vielfältig bestimmt und sind z.B. für die Berechnung des elektrischen Feldes innerhalb eines Quantengrabens von entscheidender Bedeutung. Es zeigt sich jedoch, dass es für jedes Element des piezoelektrischen Tensors starke Unterschiede in der vorhandenen Literatur gibt. Die Auswirkung dieser Unterschiede auf ein daraus berechnetes elektrisches Feld wird analysiert und der Einfluss der verschiedenen piezoelektrischen Tensorelemente separat berechnet. Im nächsten Kapitel wird eine weitere Absorptionsmethode eingeführt, der Photostrom (PS). Dieser dient als zusätzliche Ergänzung zu den Absorptionsmessungen aus der ER. Im darauffolgenden Kapitel werden die Photolumineszenz- und die Elektrolumineszenzmessungen vorgestellt. Beginn dieses Kapitels bilden die Photolumineszenzmessungen mit zugehörigem Setup. Hierauf werden die polarisations- und spannungsabhängigen Elektrolumineszenzmessungen vorgestellt. Das Verhalten der beiden unterschiedlichen Proben wird verglichen und sowohl mit der Valenzbandstruktur als auch mit der Richtung der elektrischen Felder in Verbindung gebracht. Den Abschluss dieser Dissertation bildet eine Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse.

2 Grundlegende Eigenschaften der Gruppe-III-Nitride

Bei den Gruppe-III-Nitriden (GaN, InN und AlN) handelt es sich um direkte Halbleiter. Darunter versteht man, dass sich sowohl das Valenzbandmaximum als auch das Leitungsbandminimum am Γ Punkt, dem Zentrum der Brillouinzone, befinden. Die dort stattfindenden Übergänge sind sehr wahrscheinlich, da die zur Anregung notwendige Energie minimal ist und kein zusätzliches Teilchen (Phonon) für die Anregung benötigt wird. Direkte Halbleiter eignen sich dementsprechend besonders gut für die Herstellung von elektronischen Bauelementen. Die Gruppe-III-Nitride können in der Wurtzit- (α -Phase), Zinkblende- (β -Phase) und Natriumchlorid-Struktur kristallisieren. In dieser Arbeit wird sich auf Proben beschränkt, die eine Wurtzitstruktur besitzen. Bei dieser handelt es sich um die thermodynamisch stabile Phase.

2.1 Kristallographische Orientierungen des Substrates

Für die optischen Eigenschaften von LED-Strukturen spielt die Orientierung des Substrates eine entscheidende Rolle. Abseits von den klassischen Bauelementen, bei denen es sich nahezu ausschließlich um c-orientierte Proben handelt, wurden in den letzten zwei Jahrzehnten vermehrt Untersuchungen an semipolaren bzw. nonpolaren Orientierungen vorgenommen. Triebfeder dieser Untersuchungen sind z.B. die verzerrungsabhängigen starken Polarisationsfelder in der aktiven Schicht von c-orientierten (polaren) Proben. Sollen LEDs ausgehend von dem effizienten blauen Spektralbereich auf den grünen Spektralbereich erweitert werden, ist bei Verwendung von Quantengräben (engl. quantum well, QW) aus InGaN und GaN, ein immer höherer Indium-Gehalt bzw. eine größere Breite des Quantengrabens in diesen Strukturen erforderlich. Dieser führt aufgrund der unterschiedlichen Gitterparameter von InGaN und GaN zu immer stärkeren Polarisationsfeldern und damit zu vielfältigen Problemen. Hierbei handelt es sich z.B. um einen verringerten Überlapp der Wellenfunktionen und damit verbunden um eine niedrigere Quanteneffizienz. Außerdem kommt es bei steigender Stromstärke in LED-Strukturen zu einer Effizienzverringering (engl. efficiency droop). Auch wenn die Ursache dieses Effektes noch nicht abschließend geklärt ist, wird vermutet, dass dies mit dem Quanten-Stark-Effekt (engl. quantum confined stark effect, QCSE) zusammenhängt, dessen Auswirkungen ebenfalls mit steigendem elektrischen Feld zunehmen [11, 12]. Im Vergleich zu c-orientierten Proben sind die Polarisationsfelder in Strukturen auf Substraten mit nonpolarer bzw. semipolarer Orientierung nicht mehr vorhanden bzw. deutlich reduziert.

In Zuge der Untersuchungen von nonpolaren und semipolaren Proben haben sich LEDs auf einigen Orientierungen durch ihre besonders positiven Eigenschaften von weniger vorteilhaften Orientierungen abgehoben. Zur Beschreibung der verschiedenen Orientierungen wird sich auf den Winkel zwischen dem normalen Vektor der (0001) Ebene und der zu beschreibenden Orientierung bezogen. Beispiele für Orientierungen auf denen InGaN/GaN-QWs

abgeschieden werden konnten, sind die (0001) $\theta = 0^\circ$ (c-plane), $(10\bar{1}0)$ $\theta = 90^\circ$ (m-plane) und $(11\bar{2}0)$ $\theta = 90^\circ$ (a-plane), aber auch Proben mit semipolare Orientierungen wie $(1\bar{1}01)$ $\theta = 62^\circ$, $(20\bar{2}1)$ $\theta = 75.09^\circ$, $(20\bar{2}\bar{1})$ $\theta = 104.91^\circ$, $(11\bar{2}2)$ $\theta = 58^\circ$, $(20\bar{2}\bar{1})$ $\theta = 104.91^\circ$ und $(10\bar{1}\bar{1})$ $\theta = 118.04^\circ$. Einige dieser Orientierungen sind in Abbildung 2.1 dargestellt.

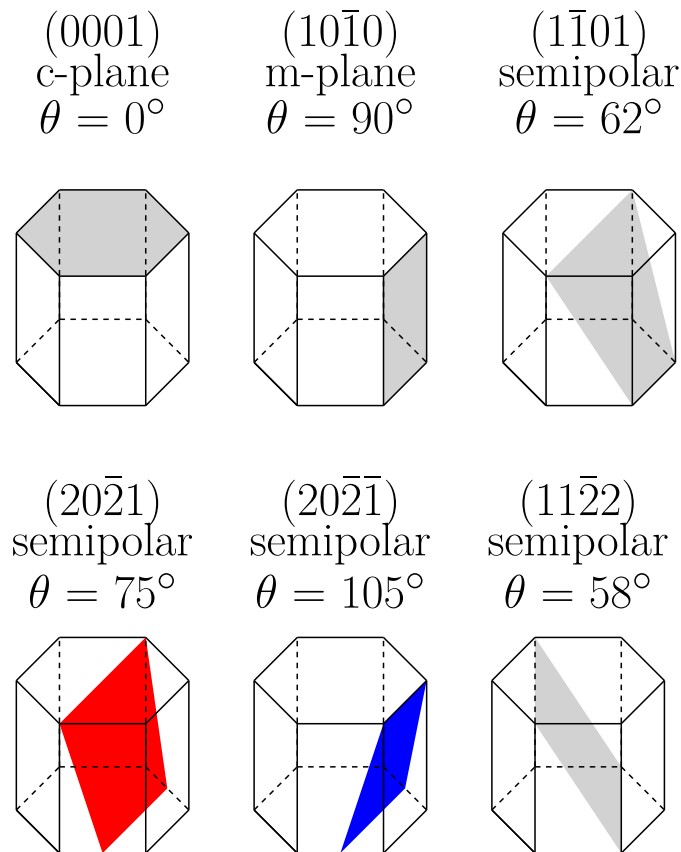


Abb. 2.1: Schematische Darstellung verschiedener kristallographischer Orientierungen.

2.2 Winkel zwischen zwei Ebenen im hexagonalen Kristallsystem

Die in dieser Arbeit untersuchten Proben mit den Orientierungen $(20\bar{2}\bar{1})$ und $(20\bar{2}1)$ sind in Abbildung 2.1 farblich hervorgehoben. Im Folgenden werden die Eigenschaften der $(20\bar{2}\bar{1})$ und $(20\bar{2}1)$ orientierten LED-Strukturen näher betrachtet. Die $(20\bar{2}\bar{1})$ Richtung zeichnet sich dadurch aus, dass die elektrischen Felder in der aktiven Schicht deutlich reduziert sind. Dies gilt natürlich für alle semipolaren Orientierungen, ist aber aufgrund der konträren Richtung vom intrinsischen Feld der Diode und den Polarisationsfeldern besonders ausgeprägt. Damit verbunden ergibt sich im Vergleich zu c-orientierten Proben ein sehr hoher Überlapp der Elektronen- und Loch-Wellenfunktionen. Dieser wurde von Feezell *et al.* z.B. mittels theoretischer Berechnungen für eine 3 nm $\text{In}_{0.23}\text{Ga}_{0.77}\text{N}$ zu ≈ 0.9 ermittelt und ist damit zu Proben auf der m-Ebene vergleichbar, bei denen kein intrinsisches elektri-

ches Feld im QW vorhanden ist [13]. Die Effizienz einer LED ist im besonderen Maße vom Transport der Löcher in die aktive Zone abhängig. Die Richtung des Polarisationsfeldes von Proben mit $(20\bar{2}1)$ Orientierung verringert die Potentialbarriere für Löcher und sorgt damit für einen besseren Transport der Löcher in der aktiven Zone [14]. Ein wichtiger weiterer Aspekt ist der effektive Einbau von Indium in die aktive Zone der LED, um eine größere Emissionswellenlänge zu realisieren. Je nach verwendeter Orientierung und Wachstumstemperatur unterscheidet sich der eingebaute Indiumanteil. Nach Untersuchungen von Zhao *et al.* sinkt mit steigender Wachstumstemperatur der eingebaute Indium-Gehalt linear [15]. Allerdings führt eine erhöhte Wachstumstemperatur häufig zu einer verbesserten Oberflächen-Morphologie. Bei der Wahl der verwendeten Kristallorientierung für eine effiziente grüne LED, wäre somit eine hohe Wachstumstemperatur mit einem möglichst hohen Indium-Einbau von Vorteil. Die beiden semipolare Orientierungen $(20\bar{2}1)$ und $(20\bar{2}\bar{1})$ weisen im Vergleich zu anderen Kristallorientierungen einen erhöhten Indium-Einbau bei gleichen Wachstumstemperaturen auf. Dieser ist bei der $(20\bar{2}\bar{1})$ Orientierung um $\approx 25\%$ bzw. $\approx 40\%$ größer als bei Proben mit $(20\bar{2}1)$ bzw. $(10\bar{1}0)$ Orientierung [15]. Dies prädestiniert die $(20\bar{2}\bar{1})$ und die $(20\bar{2}1)$ Orientierung für LEDs im grünen Spektralbereich. Eine weitere positive Eigenschaft von LEDs auf der $(20\bar{2}\bar{1})$ und $(20\bar{2}1)$ Orientierung ist die sehr gute thermische Stabilität [13, 16]. Außerdem zeigen LEDs auf dieser Orientierung, im Vergleich zu c-orientierten Proben, eine hohe Effizienz bei steigenden Stromdichten und bieten sich damit für Anwendungen an, bei denen hohe Leistungen benötigt werden [17].

Betrachtet man eine hexagonale Einheitszelle, so lässt sich diese mit den in Abbildung 2.2 bezeichneten Basisvektoren eindeutig darstellen. Um die verschiedenen parallelen Kristallflächen in der Einheitszelle zu beschreiben, werden die sogenannten Millerschen Indizes (hkil) verwendet. Diese können wie folgt gebildet werden. Als Erstes wird der Schnittpunkt der Ebene mit den durch die Vektoren \vec{a}_1 , \vec{a}_2 und \vec{c} definierten Koordinatenachsen ermittelt. Hierauf werden die sich ergebenden drei Werte durch den größtmöglichen gemeinsamen Teiler dividiert. Anschließend wird von allen Werten der Kehrwert gebildet. Daraufhin wird mit dem kleinsten gemeinsamen Vielfachen des Nenners multipliziert. Die sich ergebenden Zahlen sind die Millerschen Indizes (hkl). Da der Basisvektor \vec{a}_3 in der Basalebene nicht unabhängig von \vec{a} und \vec{b} ist, lässt sich auch der zugehörige Millersche Indizes i durch h und k zu

$$i = -(h + k) \tag{2.1}$$

ausdrücken.

Die ermittelten Millerschen Indizes sind repräsentativ für die verwendete Ebene. Ein Vorteil dieser Schreibweise ist, dass symmetrieäquivalente Flächen durch Permutation von hkil erkannt bzw. gebildet werden können. Wird z.B. die Fläche $(10\bar{1}0)$ betrachtet, so bezeichnen

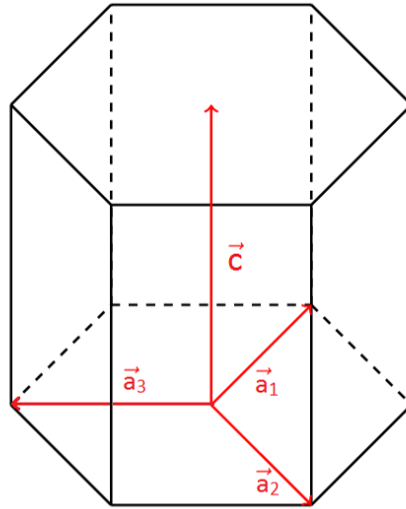


Abb. 2.2: Hexagonale Kristallstruktur mit zugehörigen Basisvektoren \vec{a}_1 , \vec{a}_2 , \vec{a}_3 und \vec{c} .

(01 $\bar{1}$ 0) und (1 $\bar{1}$ 00) ebenfalls Seitenflächen des hexagonalen Kristalls. Der typischerweise für die Beschreibung einer Fläche verwendete vierte Basisvektor \vec{a}_3 (aus der Basalebene) wird für die Ermittlung des Winkels zwischen zwei Ebenen nicht benötigt und dementsprechend bei der nun folgenden Betrachtung nicht verwendet.

Die nun folgende Ermittlung des Winkels zwischen beliebigen Ebenen im hexagonalen Kristallsystem wird bereits in der Arbeit von Han, Kang und Suh [18] beschrieben und wird auszugsweise im weiteren Verlauf vorgestellt. Um den Winkel zwischen zwei beliebigen Ebenen im hexagonalen Kristallsystem zu bestimmen, ist es nötig einen parallelen oder senkrechten Vektor bzgl. der beiden betreffenden Ebenen zu ermitteln. Ein senkrechter Vektor zur jeweiligen Ebene lässt sich mit Hilfe des reziproken Gittervektors formulieren. Dieser ist durch

$$\vec{d}_i(hkl) = h_i \vec{a}_1^* + k_i \vec{a}_2^* + l_i \vec{c}^* \quad (2.2)$$

mit $i = 1, 2$ und den Basisvektoren im rezipoken Gitter (\vec{a}^* , \vec{b}^* und \vec{c}^*) bestimmt. Im Folgenden wird auf das Sternchen verzichtet und die Vektoren werden ausschließlich im rezipoken Gitter formuliert und verwendet. Aus dem Skalarprodukt der durch Gleichung 2.2 definierten Vektoren lässt sich der Winkel zwischen diesen nach

$$\cos(\theta) = \frac{\vec{d}_1 \circ \vec{d}_2}{|\vec{d}_1| |\vec{d}_2|} \quad (2.3)$$

ermitteln. Der Wert von $\vec{d}_1 \circ \vec{d}_2$ und $|\vec{d}_1|$ sowie $|\vec{d}_2|$ wird im Folgenden bestimmt. Hierbei ergibt sich $\vec{d}_1 \circ \vec{d}_2$ zu

$$\begin{aligned}\vec{d}_1 \circ \vec{d}_2 &= (h_1\vec{a}_1 + k_1\vec{a}_2 + l_1\vec{c}) \circ (h_2\vec{a}_1 + k_2\vec{a}_2 + l_2\vec{c}) \\ &= h_1h_2a_1^2 + k_1k_2a_2^2 + l_1l_2c^2 + (h_1k_2 + h_2k_1)\vec{a}_1 \circ \vec{a}_2 \\ &\quad + (h_1l_2 + h_2l_1)\vec{a}_1 \circ \vec{c} + (k_1l_2 + k_2l_1)\vec{a}_2 \circ \vec{c}.\end{aligned}\tag{2.4}$$

Nun werden die Gittervektoren als Kreuzprodukt aus den beiden verbleibenden Gittervektoren dargestellt ($\vec{a}_1 = \frac{\vec{a}_2 \times \vec{c}}{V}$, $\vec{a}_2 = \frac{\vec{c} \times \vec{a}_1}{V}$ und $\vec{c} = \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{V}$). Die Größe V bezeichnet das Volumen der Einheitszelle. Die Gittervektoren werden in ihrer neuen Formulierung in Gleichung 2.4 eingesetzt und es ergibt sich

$$\begin{aligned}\vec{d}_1 \circ \vec{d}_2 &= \frac{1}{V^2} \left(h_1h_2(\vec{a}_2 \times \vec{c})^2 + k_1k_2(\vec{c} \times \vec{a}_1)^2 + l_1l_2(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)^2 \right. \\ &\quad + (h_1k_2 + h_2k_1)(\vec{a}_2 \times \vec{c}) \circ (\vec{c} \times \vec{a}_1) \\ &\quad + (h_1l_2 + h_2l_1)(\vec{a}_2 \times \vec{c}) \circ (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) \\ &\quad \left. + (k_1l_2 + k_2l_1)(\vec{c} \times \vec{a}_1) \circ (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) \right).\end{aligned}\tag{2.5}$$

Unter Verwendung der Lagrange-Identität (Gleichung 2.6) kann das Skalarprodukt zwischen zwei Kreuzprodukten auf eine Berechnung von Skalarprodukten reduziert werden.

$$(\vec{A} \times \vec{B}) \circ (\vec{C} \times \vec{D}) = (\vec{A} \circ \vec{C})(\vec{B} \circ \vec{D}) - (\vec{A} \circ \vec{D})(\vec{B} \circ \vec{C})\tag{2.6}$$

Somit ergibt sich nach Einsetzen von Gleichung 2.6 in Gleichung 2.5 und Ausführen der Skalarprodukte

$$\begin{aligned}\vec{d}_1 \circ \vec{d}_2 &= \frac{1}{V^2} \left[h_1h_2a_2^2c^2 \sin^2 \alpha + k_1k_2c^2a_1^2 \sin^2 \beta + l_1l_2a_1^2a_2^2 \sin^2 \gamma \right. \\ &\quad + (h_1k_2 + h_2k_1)[(a_2c \cos \alpha)(ca_1 \cos \beta) - c^2(a_2a_1 \cos \gamma)] \\ &\quad + (h_1l_2 + h_2l_1)[(a_2a_1 \cos \gamma)(ca_2 \cos \alpha) - a_2^2(ca_1 \cos \beta)] \\ &\quad \left. + (k_1l_2 + k_2l_1)[(ca_1 \cos \beta)(a_1a_2 \cos \gamma) - a_1^2(ca_2 \cos \alpha)] \right].\end{aligned}\tag{2.7}$$

Hierbei sind die genannten Winkel zu $\angle(\vec{a}_1, \vec{c}) = \alpha$, $\angle(\vec{a}_2, \vec{c}) = \beta$ und $\angle(\vec{a}_1, \vec{a}_2) = \gamma$ definiert. Ähnliche Überlegungen führen zu

$$\begin{aligned}
\vec{d}_i = \frac{1}{V} & \left[h_i^2 a_1^2 c^2 \sin^2 \alpha + k_i^2 a_1^2 c^2 \sin^2 \beta + l_i^2 a_2^2 a_2^2 \sin^2 \gamma \right. \\
& + 2h_i k_i a_1 a_2 c^2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) \\
& + 2h_i l_i a_1 a_2^2 c (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta) \\
& \left. + 2k_i l_i a_1^2 a_2 c (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) \right].
\end{aligned} \tag{2.8}$$

Werden die Ausdrücke für $\vec{d}_1 \circ \vec{d}_2$ und $|\vec{d}_i|$ in Gleichung 2.3 eingesetzt, erhält man einen Ausdruck für den Winkel zwischen zwei beliebigen Ebenen in einem beliebigen durch \vec{a} , \vec{b} und \vec{c} aufgespannten Kristallsystem. Die in dieser Arbeit untersuchten Proben haben eine hexagonale Wurtzitstruktur. Für diese Struktur sind die Winkel zwischen den Basisvektoren durch $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 90^\circ$ und $\gamma = 120^\circ$ gegeben. Bei der Annahme einer hexagonalen Wurtzitstruktur, lässt sich der Winkel zwischen zwei Ebenen unter Verwendung von $a_1 = a_2 = a$ nach Gleichung 2.9 berechnen.

$$\begin{aligned}
\theta = \arccos & \left[\left(h_1 h_2 a^2 c^2 + k_1 k_2 c^2 a^2 + \frac{3}{4} l_1 l_2 a^4 + \frac{1}{2} a^2 c^2 (h_1 k_2 + h_2 k_1) \right) \right. \\
& \cdot \left(h_1^2 a^2 c^2 + k_1^2 c^2 a^2 + \frac{3}{4} l_1^2 a^4 + h_1 k_1 a^2 c^2 \right)^{-\frac{1}{2}} \\
& \left. \cdot \left(h_2^2 a^2 c^2 + k_2^2 c^2 a^2 + \frac{3}{4} l_2^2 a^4 + h_2 k_2 a^2 c^2 \right)^{-\frac{1}{2}} \right]
\end{aligned} \tag{2.9}$$

2.3 Verzerrung und Verspannung

Der Verzerrungszustand eines Kristalls bestimmt wesentlich die optischen und elektrischen Eigenschaften von Vielschichtstrukturen und beschreibt eine Veränderung der Gitterposition der Atome, bezogen auf ihren natürlichen Zustand. Ursachen für Verzerrungen können z.B. in durch Phononen-induzierten Gitterschwingungen, Gitteranpassung beim Wachstum von Materialien mit unterschiedlichen Gitterkonstanten oder in von außen angelegten Kräften liegen. Der Verzerrungszustand hat direkten Einfluss auf die piezoelektrische Polarisation und damit auf die Größe der elektrischen Felder. In diesem Abschnitt wird sich im Folgenden auf den Einfluss der Veränderung des Verzerrungszustandes als Folge des Wachstumsprozesses konzentriert.

Ist die auf einem Substrat aufgewachsene Schicht dünn genug um nicht zu relaxieren, kann für diese Schicht eine pseudomorphe Verzerrung angenommen werden. Bei dieser übernimmt die aufgewachsene Schicht sowohl die Orientierung als auch die Gitterkonstante des Substrates [19, 20]. Die Verzerrung für eine pseudomorph aufgewachsene Schicht in

der Wachstumsebene lässt sich verhältnismäßig einfach bestimmen und ist zu

$$\epsilon_a = \frac{a_{Substrat} - a_{Schicht}}{a_{Schicht}} \quad (2.10)$$

definiert. Hierbei bezeichnen $a_{Substrat}$ und $a_{Schicht}$ die Gitterkonstanten des Substrates bzw. der darauf aufgewachsenen Schicht. Je nach Vorzeichen der Verzerrung ϵ_a spricht man bei $\epsilon_a > 0$ von tensiler und bei $\epsilon_a < 0$ von kompressiver Verzerrung.

Allgemein ist die Verzerrung eine tensorielle Größe und kann mit Hilfe des linearen Verzerrungstensors 2-ter Stufe nach Gleichung 2.11 beschrieben werden.

$$\epsilon_{ij} = \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & \epsilon_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.11)$$

In Wachstumsrichtung kann sich der Kristall ungehindert deformieren, wodurch keine Verspannung in dieser Richtung entsteht. Der Zusammenhang zwischen der Verzerrung ϵ und der Verspannung σ kann durch das Hookesche Gesetz beschrieben werden. Dieses lautet

$$\sigma = \mathbf{C}\epsilon. \quad (2.12)$$

Hierbei ist \mathbf{C} der Elastizitätstensor. Der Verspannungstensor σ kann allgemein als

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.13)$$

beschrieben werden. Auf die hexagonale Wurtzitstruktur übertragen, ergibt sich aus dem Hookeschen Gesetz

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ 2\epsilon_{yz} \\ 2\epsilon_{xz} \\ 2\epsilon_{xy} \end{bmatrix}. \quad (2.14)$$

Hierbei wurden der Verspannungs- und der Verzerrungstensor in der Voigtschen Notation geschrieben. Die Voigtsche Notation ist eine vereinfachte Schreibweise für symmetrische Matrizen. Diese Vereinfachung ist bei den beiden Tensoren möglich, da es sich bei der Betrachtung der Verspannung und Verzerrung um ein statisches System handelt und somit Rotationsbewegungen zur Beschreibung nicht nötig sind. Die Folge ist, dass spiegelsymmetrische Elemente an der Hauptdiagonalen der beiden Tensoren jeweils gleich groß sind und beides symmetrische Matrizen werden ($\epsilon_{ij} = \epsilon_{ji}$, $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$). Die in Gleichung 2.14 auftretenden Multiplikationsfaktoren vor den Scherverzerrungen entstehen aufgrund von Symmetrieanahmen für den Elastizitätstensor \mathbf{C} . Die Elastizitätsmoduln C_{ij} sind die Elemente des Elastizitätstensors. Bei ihnen handelt es sich um Materialparameter, welche in der Literatur mit verschiedenen Methoden bestimmt wurden. Eine Übersicht über die verschiedenen Parametersätze und ihre Bestimmungsmethode ist in Tabelle 1 für das Materialsystem GaN gegeben.

#	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{33}	C_{44}	Bestimmungsmethode
1	367	135	103	405	95	Dichte-Funktional-Theorie [21]
2	373	141	80	387	94	Brillouin-Streuung [22]
3	390	145	106	398	105	Brillouin-Streuung [23]
4	377	160	114	209	81	Resonante Ultraschall-Spektroskopie [24]
5	359	129	92	389	98	Resonante Ultraschall-Spektroskopie [25]
6	374	106	70	379	101	Brillouin-Streuung [26]

Tab. 1: Verschiedene Parametersätze für die elastischen Konstanten von GaN (in GPa) und die jeweils verwendete Bestimmungsmethode aus der Literatur.

2.3.1 Verzerrung in beliebigen Koordinaten

Um die Verzerrung bzw. Verspannung einer pseudomorph gewachsenen Schicht im hexagonalen Kristallsystem zu bestimmen, kann die im vorherigen Abschnitt aufgestellte Gleichung 2.14 verwendet werden. Für eine in c-Richtung gewachsene Probe stellt dies kein

Problem dar, weil die Scherverzerrungen ϵ_{yz} , ϵ_{xz} und ϵ_{xy} null sind und keine Kräfte entlang der Wachstumsrichtung wirken ($\sigma_{zz} = \sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 0$). Somit ist das sich ergebende Gleichungssystem lösbar. Für die in dieser Arbeit betrachteten semipolaren Proben ist die Berechnung der Verzerrung komplizierter. Im Folgenden wird nach der von Romanov *et al.* [8] beschriebenen Vorgehensweise verfahren. Diese nutzt geometrische Überlegungen und eine Koordinatentransformation, um die Verzerrung bzw. Verspannung von semipolaren bzw. nonpolaren Proben zu ermitteln. Die Erläuterungen erfolgen anhand der Abbildung 2.3.

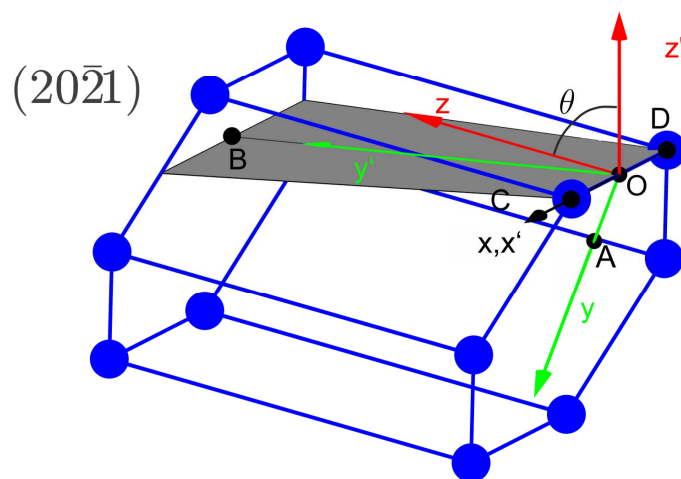


Abb. 2.3: Schema für die Ermittlung der Gitterfehlanpassung von einer semipolar orientierten Schicht auf einer Unterlage mit anderer Gitterkonstante. Die gestrichelten Koordinatenachsen entsprechen den sogenannten Oberflächenkoordinaten. Die nicht gestrichelten Koordinatenachsen bezeichnen die Kristallkoordinaten. Zwischen beiden Koordinatensystemen erfolgt eine einzelne Drehung um den semipolaren Winkel θ um die x -Achse.

Koordinaten im gestrichelten Koordinatensystem werden als Oberflächenkoordinaten und im ungestrichelten Koordinatensystem als Kristallkoordinaten bezeichnet. Aus Abbildung 2.3 können durch Verwendung des Satzes des Pythagoras folgende Beziehungen aufgestellt werden:

$$\begin{aligned}
CD_L &= a_L \\
CD_T &= a_T \\
OA_L &= \sqrt{3}a_L \\
AB_L &= \sqrt{3}\frac{c_L}{c_T}a_T \tan(\theta) \\
OB_L &= \sqrt{OA_L^2 + AB_L^2} \\
OB_T &= \frac{\sqrt{3}}{\cos\theta}a_T
\end{aligned} \tag{2.15}$$

Die Indizes T bzw. L stehen hierbei für die unverzerrte (engl. template= Vorlage, T) und für die darauf befindliche verzerrte Schicht (engl. layer= Schicht, L). Mit Hilfe der Gleichungen in (2.16) lassen sich die Verzerrungen im gestrichenen Koordinatensystem nach

$$\begin{aligned}
\epsilon_{x'x'} &= \frac{CD_T - CD_L}{CD_L} = \frac{a_T - a_L}{a_L} \\
\epsilon_{y'y'} &= \frac{OB_T - OB_L}{OB_L} = \frac{a_T c_T - \sqrt{(a_L c_T)^2 \cos^2 \theta + (a_T c_L)^2 \sin^2 \theta}}{\sqrt{(a_L c_T)^2 \cos^2 \theta + (a_T c_L)^2 \sin^2 \theta}}
\end{aligned} \tag{2.16}$$

berechnen. Um die nichttrivialen Verzerrungselemente zu berechnen, wird das Hookesche Gesetz im gestrichenen Koordinatensystem angewendet (siehe Gleichung 2.14). Die Tensoren können durch einfache Matrixmultiplikation mit der Drehmatrix $A(\theta)$ (siehe Gleichung 2.17) in das neue Koordinatensystem (K') überführt werden. Besonders einfach kann die Multiplikation mit Hilfe der Einsteinschen Summenkonvention nach Gleichung 2.18 geschrieben werden.

$$A(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \tag{2.17}$$

$$\begin{aligned}
\epsilon'_{ij} &= A_{i\alpha} A_{j\beta} \epsilon_{\alpha\beta} \\
C'_{ijkl} &= A_{ij} A_{j\beta} A_{k\gamma} A_{l\delta} C_{\alpha\beta\gamma\delta}
\end{aligned} \tag{2.18}$$

Die Berechnung der Tensoren im neuen Koordinatensystem K' wurde bereits in der Bachelorarbeit von M. Winkler [27] durchgeführt und wird im Folgenden zusammengefasst. Das Hookesche Gesetz im gestrichenen Koordinatensystem ist gegeben durch

$$\begin{bmatrix} \sigma'_{xx} \\ \sigma'_{yy} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \sigma'_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C'_{11} & C'_{12} & C'_{13} & C'_{14} & 0 & 0 \\ C'_{12} & C'_{11} & C'_{13} & C'_{24} & 0 & 0 \\ C'_{13} & C'_{23} & C'_{33} & C'_{34} & 0 & 0 \\ C'_{14} & C'_{24} & C'_{34} & C'_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C'_{55} & C'_{56} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C'_{56} & C'_{66} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \epsilon'_{xx} \\ \epsilon'_{yy} \\ \epsilon'_{zz} \\ 2\epsilon'_{yz} \\ 2\epsilon'_{xz} \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (2.19)$$

Hierbei wurden die gleichen zuvor erwähnten Randbedingungen für die Verspannung verwendet. Es ergeben sich die folgenden Gleichungen

$$\begin{aligned} 0 &= B_{31}\epsilon'_{xx} + B_{32}\epsilon'_{yy} + A_{31}\epsilon'_{zz} + A_{32}\epsilon'_{yz} \\ 0 &= B_{41}\epsilon'_{xx} + B_{42}\epsilon'_{yy} + A_{41}\epsilon'_{zz} + A_{42}\epsilon'_{yz} \\ 0 &= 2C'_{55}\epsilon'_{xz} \end{aligned} \quad (2.20)$$

$$\begin{aligned} B_{31} &= C'_{13} = C_{12} \sin^2 \theta + C_{13} \cos^2 \theta \\ B_{32} &= C'_{24} = C_{13}(\sin^4 \theta + \cos^4 \theta) + \left(\frac{C_{11} + C_{13}}{4} - C_{44} \right) \sin^2 2\theta \\ B_{41} &= C'_{14} = \frac{C_{12} - C_{13}}{2} \sin 2\theta \\ B_{42} &= C'_{24} = \frac{1}{2} \left[C_{11} \cos^2 \theta - (C_{13} + 2C_{44}) \cos 2\theta - C_{33} \sin^2 \theta \right] \sin 2\theta \\ A_{31} &= C'_{33} = C_{11} \sin^4 \theta + \left(\frac{1}{2} C_{13} + C_{44} \right) \sin^2 2\theta + C_{33} \cos^4 \theta \\ A_{32} &= 2C'_{34} = \left[C_{11} \sin^2 \theta + (C_{13} + C_{44}) \cos 2\theta - C_{33} \cos^2 \theta \right] \sin 2\theta \\ A_{41} &= C'_{34} = \frac{1}{2} A_{32} = \frac{1}{2} \left[C_{11} \sin^2 \theta + (C_{13} + 2C_{44}) \cos 2\theta - C_{33} \cos^2 \theta \right] \sin 2\theta \\ A_{42} &= 2C'_{44} = \left(\frac{C_{11} + C_{33}}{2} - C_{13} \right) \sin^2 2\theta + 2C_{44} \cos^2 2\theta. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Aus der dritten Gleichung von (2.20) folgt direkt, dass $\epsilon'_{xz} = 0$ ist. Die verbleibenden Verzerrungen ϵ'_{zz} und ϵ'_{yz} können mit Hilfe des Gleichungssystems ermittelt werden und ergeben sich zu

$$\begin{aligned} \epsilon'_{zz} &= \frac{(B_{41}\epsilon'_{xx} + B_{42}\epsilon'_{yy})A_{32} - (B_{31}\epsilon'_{xx} + B_{32}\epsilon'_{yy})A_{42}}{A_{31}A_{42} - A_{32}A_{41}} \\ \epsilon'_{yz} &= \frac{(B_{31}\epsilon'_{xx} + B_{32}\epsilon'_{yy})A_{41} - (B_{41}\epsilon'_{xx} + B_{42}\epsilon'_{yy})A_{31}}{A_{31}A_{42} - A_{32}A_{41}}. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Eine Multiplikation des Verzerrungstensors mit der Drehmatrix liefert die Verzerrungen im ungestrichenen Koordinatensystem zu

$$\begin{aligned}
\epsilon_{xx} &= \epsilon'_{xx} \\
\epsilon_{yy} &= \epsilon'_{yy} \cos^2 \theta + \epsilon'_{zz} \sin^2 \theta - \epsilon'_{yz} \sin 2\theta \\
\epsilon_{zz} &= \epsilon'_{yy} \sin^2 \theta + \epsilon'_{zz} \cos^2 \theta + \epsilon'_{yz} \sin 2\theta \\
\epsilon_{yz} &= \frac{\epsilon'_{zz} - \epsilon'_{yy}}{2} \sin 2\theta + \epsilon'_{yz} \cos 2\theta.
\end{aligned} \tag{2.23}$$

Die Komponenten des Verzerrungstensors sind am Beispiel einer $\text{In}_{0.10}\text{Ga}_{0.9}\text{N}$ -Schicht bzw. $\text{In}_{0.20}\text{Ga}_{0.9}\text{N}$ -Schicht auf einer unverzerrten GaN-Schicht in Abbildung 2.4 dargestellt.

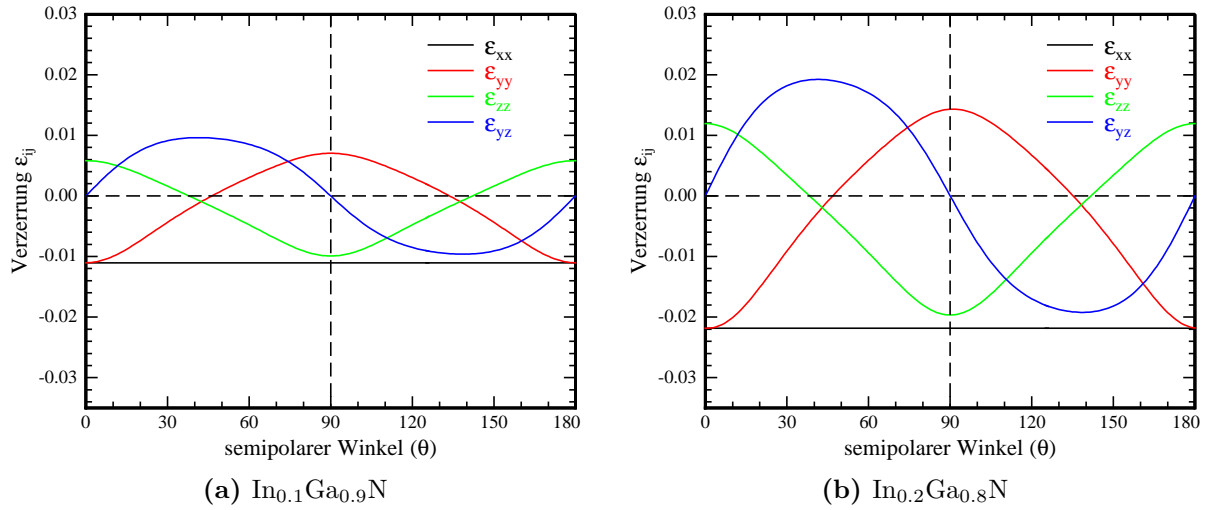


Abb. 2.4: Theoretisch berechnete Komponenten des Verzerrungstensors einer pseudomorph auf einer semipolaren GaN-Schicht aufgewachsenen a) $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}$ -Schicht und b) $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ -Schicht. Die GaN-Schicht wird hierbei als unverzerrt angenommen. Die Komponenten des Verzerrungstensors sind in Abhängigkeit vom semipolaren Winkel θ dargestellt. Bei dem semipolaren Winkel handelt es sich um den Winkel zwischen der c -Achse und der Oberflächennormalen der Probe. Die Nulllinie der Verzerrung und die Symmetrieachse bei $\theta = 90^\circ$ sind gestrichelt eingezeichnet.

2.4 Polarisation

Unter der Polarisation versteht man im Allgemeinen die Stärke des Dipolmoments innerhalb eines Mediums. In den Nitridhalbleitern existieren zwei verschiedene Arten der Polarisation. Hierbei handelt es sich um die spontane (\vec{P}^{SP}) und die piezoelektrische Polarisation (\vec{P}^{PE}). Die Gesamtpolarisation einer Halbleiterschicht ergibt sich aus der vektoriellen Addition beider Polarisationen zu

$$\vec{P} = \vec{P}^{SP} + \vec{P}^{PE} \tag{2.24}$$

Sobald die Größe der Gesamtpolarisation verfügbar ist, kann man das elektrische Feld durch

$$\vec{F}_{int} = \frac{\vec{P}}{\epsilon_0 \epsilon_r} \quad (2.25)$$

berechnen. Hierbei bezeichnen ϵ_0 die elektrische Feldkonstante und ϵ_r die statische Dielektrizitätskonstante.

Im Folgenden wird auf die Ursache der spontanen und piezoelektrischen Polarisation bei der in dieser Arbeit relevanten Wurtzitstruktur näher eingegangen.

2.4.1 Spontane Polarisation

Bei der spontanen Polarisation handelt es sich um eine intrinsische Materialeigenschaft. Diese entsteht dadurch, dass sich die Summen der ausbildenden Dipolmomente zwischen den Metall- und Stickstoffatomen nicht vollständig ausgleichen und daraufhin ein makroskopisches Dipolmoment verbleibt. Dieses ist sowohl auf die fehlende Inversionssymmetrie der hexagonalen Wurtzitstruktur als auch auf die verschiedenen Elektronegativitäten der unterschiedlichen Atomsorten zurückzuführen. Die Elektronegativitäten der Gruppe-III-Nitride können nach Pauling [28, 29] ermittelt werden und wurden durch Allred [30] für die Gruppe-III-Nitride zu Al: 1.61, Ga: 1.81, In: 1.78, N: 3.04 bestimmt. Um die spontane Polarisation zu ermitteln, müssen zusätzlich zu der Elektronegativität der beteiligten Atome noch die Bindungslängen zwischen den Atomen berücksichtigt werden. In Abbildung 2.5 sind die benötigten Größen dargestellt. Zusätzlich zu der bekannten Gitterkonstanten in der Basalebene a und c in c -Richtung aus Kapitel 2.2 wird der sogenannte zellinterne Parameter u verwendet. Dieser bezeichnet das Verhältnis zwischen der Bindungslänge zweier nächster Nachbarn in $[0001]$ bzw. c -Richtung zur Gitterkonstanten c .

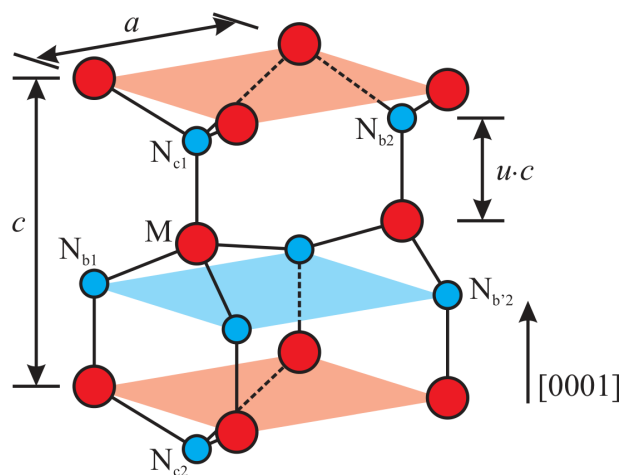


Abb. 2.5: Skizzenhafte Darstellung der Kristallstruktur eines hexagonalen Nitridhalbleiters. Die roten Kreise deuten die Position des zentralen Metallatoms an, wohingegen die blauen Kreise die Stickstoffatome symbolisieren. Die nächsten bzw. übernächsten Nachbarn des zentralen Metallatoms sind markiert und wichtige zur Beschreibung des Gitters verwendete Größen eingetragen [31].

Im Folgenden werden beispielhaft die Abstände zwischen den nächsten und übernächsten Nachbarn betrachtet[31]. Diese ergeben sich zu

$$M - N_{c1} = uc \quad (2.26)$$

für den Abstand des Gruppe-III-Atoms zum nächsten Nachbarn in c-Richtung und

$$M - N_{b1} = \sqrt{\frac{1}{3}a^2 + \left(\frac{1}{2} - u\right)^2 c^2} \quad (2.27)$$

für den Abstand zu den verbleibenden drei nächsten Nachbarn.

Zusätzlich werden die Abstände des Gruppe-III-Atoms zu den übernächsten Nachbarn betrachtet. Für diese ergibt sich

$$M - N_{c2} = (1 - u) \cdot c \quad (2.28)$$

$$M - N_{b2} = \sqrt{a^2 + (u \cdot c)^2} \quad (2.29)$$

$$M - N_{b'2} = \sqrt{\frac{4}{3}a^2 + \left(\frac{1}{2} - u\right)^2 \cdot c^2}. \quad (2.30)$$

Für die in dieser Arbeit untersuchten InGaN/GaN-QWs ist es nötig die spontane Polarisation der InGaN-Schicht zu bestimmen. Eine Übersicht über die spontane Polarisation der Gruppe-III-Nitride ist in Tabelle 2 angegeben.

	GaN	InN	AlN	Bestimmungsmethode
$P^{sp}\left(\frac{C}{m^2}\right)$	-0.029	-0.032	-0.081	Dichte-Funktional-Theorie [32]
$P^{sp}\left(\frac{C}{m^2}\right)$	-0.034	-0.042	-0.090	Ab-initio-Rechnung [33]
$P^{sp}\left(\frac{C}{m^2}\right)$	-0.015	-0.043	-0.076	Modell Rechnung [34]
$P^{sp}\left(\frac{C}{m^2}\right)$	-0.022	-	-	Lumineszenz an Stapelfehlern [35]
$P^{sp}\left(\frac{C}{m^2}\right)$	-0.022	-	-	Thermodynamische Rechnung [35]
$ P^{sp}\left(\frac{C}{m^2}\right) $	0.029	0.077	0.073	Orbital- / Bindungs-Modell [36]
$ P^{sp}\left(\frac{C}{m^2}\right) $	0.037	0.079	0.087	Orbital- / Bindungs-Modell [36]

Tab. 2: Übersicht über die spontane Polarisation der Gruppe-III-Nitride.

Allgemein kann die spontane Polarisation eines ternären Systems ($A_xB_{1-x}N$) durch

$$P_{ABN}^{SP} = P_{AN}^{SP}x + P_{BN}^{SP}(1-x) + bx(1-x) \quad (2.31)$$

berechnet werden. Für InGaN ergibt sich in der speziellen Gleichung (2.32) [37]. Hierbei wurden die etablierten binären spontanen Polarisationen nach Bernardini *et al.* [33] verwendet.

$$P_{InGaN}^{SP}(x) = -0.042\frac{C}{m^2}x + 0.034\frac{C}{m^2}(1-x) + 0.037\frac{C}{m^2}x(1-x) \quad (2.32)$$

Die ersten zwei Terme in Gleichung 2.32 beinhalten eine lineare Variation der spontanen Polarisation zwischen den beiden Komponenten GaN und InN. Der nichtlineare dritte Term ist proportional zur Konstanten b (engl. bowing parameter). Dieser Teil der Gleichung hat seinen Ursprung in der nichtlinearen Veränderung des zellinternen Parameters u , der Veränderung des prozentualen Anteils x sowie der unterschiedlichen Elektronegativitäten der enthaltenen Kationen [37].

2.4.2 Piezoelektrische Polarisation

Die piezoelektrische Polarisation entsteht aufgrund der mechanischen Deformation der Elementarzelle. Hierbei ist, im Vergleich zur spontanen Polarisation, die Richtung nicht von vornherein festgelegt, sondern von der Richtung der mechanischen Deformation abhängig. Diese steht im Zusammenhang mit dem Deformationstensor ϵ und dem piezoelektrischen Tensor e . Alternativ ist auch eine Beschreibung mit der Verspannung σ und dem piezoelektrischen Modul d zu

$$\vec{P}^{PZ} = e\epsilon = d\sigma \quad (2.33)$$

möglich.

In hexagonalen Materialien hat der piezoelektrische Tensor \mathbf{e} die Form [38]

$$\mathbf{e} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.34)$$

Damit ergibt sich für die piezoelektrische Polarisierung in Kristallkoordinaten

$$\vec{P}^{PZ} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ 2\epsilon_{yz} \\ 2\epsilon_{xz} \\ 2\epsilon_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2e_{15}\epsilon_{xz} \\ 2e_{15}\epsilon_{yz} \\ e_{31}\epsilon_{xx} + e_{31}\epsilon_{yy} + e_{33}\epsilon_{zz} \end{bmatrix}. \quad (2.35)$$

Da lediglich die piezoelektrische Polarisierung in Wachstumsrichtung einen Einfluss auf die Prozesse innerhalb eines QWs hat, wird nur diese im Folgenden betrachtet. Sie lässt sich nach

$$\begin{aligned} P_{z'}^{PZ} &= \vec{P}^{PZ} A(\theta) = P_y^{PZ} \sin \theta + P_z^{PZ} \cos \theta \\ &= \left(e_{31} \cos^3 \theta + \frac{e_{33} - 2e_{15}}{2} \sin \theta \sin 2\theta \right) \epsilon_{xx} \\ &+ \left(\frac{e_{31} + 2e_{15}}{2} \sin \theta \sin 2\theta + e_{33} \cos^3 \theta \right) \epsilon_{zz} \\ &+ [(e_{31} - e_{33} \cos \theta \sin 2\theta + 2e_{15} \sin \theta \cos 2\theta) \epsilon_{yz} \end{aligned} \quad (2.36)$$

berechnen. Hierbei wurden die Drehmatrix aus Gleichung 2.17 und die Verzerrungen in Kristallkoordinaten aus Gleichung 2.23 verwendet.

2.5 Stark-Effekt in Quantenstrukturen

Elektrische Felder in Halbleiterstrukturen führen zu einer Verkipfung der Bänder im Ortsraum. Diese können auf unterschiedliche Weise entstehen. Eine Möglichkeit sind die schon angesprochenen Polarisationsunterschiede innerhalb des Halbleiters. Des Weiteren können elektrische Felder auch durch eine von außen angelegte Spannung oder durch eine Dotierung des Materials hervorgerufen werden. Unabhängig von der Ursache ihrer Entstehung,

verändern die elektrischen Felder die Eigenschaften von QWs. Ein Effekt zur Beschreibung des Einflusses des elektrischen Feldes auf einen QW ist der Stark Effekt in Quantenstrukturen. Dieser wurden erstmals von Miller *et al.* [39, 40] in Absorptionsmessungen von GaAs/AlGaAs-QWs beobachtet.

Das elektrische Feld führt, über die Verkipfung des Leitungs- sowie Valenzbandes, zu einer Separation der Elektronen- und Löcherwellenfunktionen zu den gegenüberliegenden Seiten des QWs. Dies bewirkt einerseits eine Verringerung der Übergangsenergie mit steigendem elektrischen Feld aber auch eine Verringerung der Wahrscheinlichkeit des entsprechenden optischen Übergangs. In Abbildung 2.6 ist der QCSE anhand eines QWs, unter dem Einfluss eines elektrischen Feldes (a) und ohne Feldeinfluss (b), dargestellt.

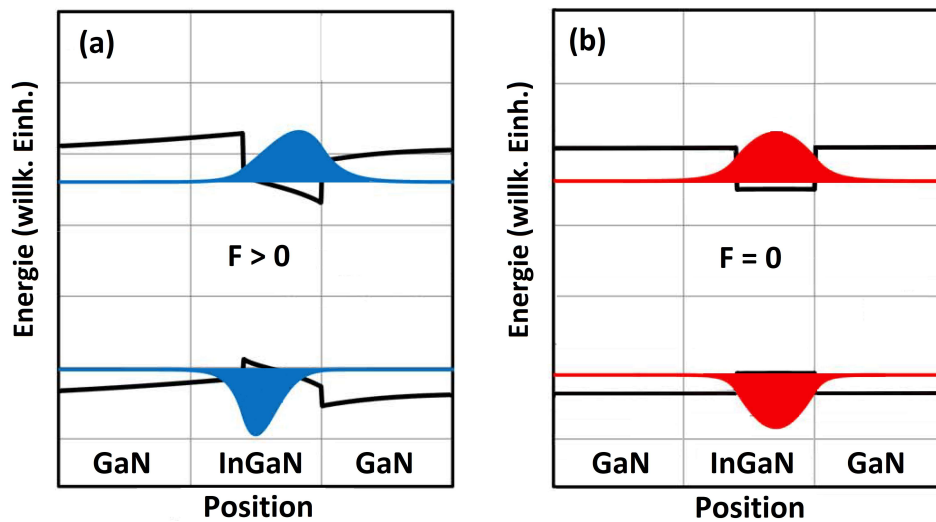


Abb. 2.6: Schema zur Darstellung der Auswirkungen des Quanten-Confined-Stark-Effekts in einem einzelnen InGaN/GaN-QW bei einer c-orientierten (a) und m-orientierten Probe (b) [8].

3 Dioden

Halbleiterdioden sind einfach aufgebaut und bieten unzählige Möglichkeiten ein Eingangssignal nach den Anforderungen einer Schaltung zu modulieren. Die Anwendungen sind so vielfältig, dass an dieser Stelle nur einige wenige genannt werden. Dioden werden z.B. als Lichtquelle, Schalter, Gleichrichter, zum Verschieben eines Spannungssignals um einen gewünschten Wert, zur Umsetzung von logischen Operationen und als Verstärker verwendet. Für die in dieser Arbeit untersuchten Lichtemitterdioden sind die elektrischen Felder innerhalb der pin-Diode von großer Bedeutung. Eine Möglichkeit für deren Berechnung und die Struktur der untersuchten Proben wird im Folgenden vorgestellt.

3.1 Elektrisches Feld in der aktiven Zone

Nachdem im Kapitel 2.3 die theoretischen Berechnungen des elektrischen Feldes im QW aufgrund der entstehenden Polarisationsfelder vorgestellt wurden, werden im Folgenden weitere Probeneigenschaften berücksichtigt. Bei den in dieser Arbeit untersuchten Proben handelt es sich fast ausschließlich um pin-Dioden. Bei diesen bewirkt der durch die Dotierung von p- und n-Gebiet geschaffene Potentialunterschied ein elektrisches Feld und bildet damit einen zusätzlichen Beitrag zum elektrischen Feld im QW. Außerdem kann das elektrische Feld in der Probe und dem QW durch das Anlegen einer externen Spannung an den Kontakten der Probe verändert werden. Hierdurch ändert sich gleichzeitig die Größe der Raumladungszone. Die genannten Faktoren werden für die Berechnung des elektrischen Feldes im QW einer pin-Diode berücksichtigt und können durch Gleichung 3.1 bestimmt werden [41, 42].

$$E = \frac{\phi_0 - V_{ext} - E_{int}NL_{QW}}{d_u + \frac{d_d}{2}} + E_{int} \quad (3.1)$$

Hierbei bezeichnet ϕ_0 die aufgrund der Dotierung eingebaute Spannung (engl. built in voltage), V_{ext} die extern angelegte Spannung, E_{int} das aufgrund von Polarisationsunterschieden entstehende elektrische Feld, N die Anzahl der QW in der pin-Diode, L_{QW} die Breite des QWs, d_u die Breite der gewachsenen intrinsischen Zone und d_d ein Maß für die spannungsabhängige Veränderung der Raumladungszone (RLZ). Der Faktor $1/2$ vor dem d_d ist notwendig, um die Konsistenz mit der Poisson-Gleichung zu gewährleisten [43]. Für die Berechnung von d_d wird Gleichung 3.2 verwendet [41].

$$d_d = -d_u + \sqrt{d_u^2 + 2 \frac{N_D + N_A}{N_A N_D} \frac{(\phi_0 - V_{ext})\epsilon_0\epsilon_r}{e}} \quad (3.2)$$

Bei N_D und N_A handelt es sich um die Donator- bzw. Akzeptorkonzentration im n- bzw. p-Gebiet der Diode. Für die Berechnung der eingebauten Spannung wird Gleichung 3.3 genutzt [44].

$$\phi_0 = \frac{k_b T}{q} \ln \frac{N_D N_A}{n_i^2} \quad (3.3)$$

In dieser entspricht k_B der Boltzmannkonstante, T der Temperatur und n_i der intrinsischen Ladungsträgerkonzentration. Die intrinsische Ladungsträgerkonzentration lässt sich mit

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} \exp \left[-\frac{E_g}{2k_B T} \right] \quad (3.4)$$

berechnen [44]. Die Größen N_C und N_V sind hierbei die effektiven Leitungs- und Valenzbandzustandsdichten.

3.2 Probenaufbau

In dieser Arbeit werden zwei verschiedene semipolare pin-Dioden mit eingebetteten InGaN/GaN-QWs untersucht. Der Aufbau der beiden Proben ist mit Ausnahme des Indiumgehaltes der aktiven Schicht und der Probenorientierung gleich. Der Probenaufbau ist exemplarisch am Beispiel der Probe A in Abbildung 3.1 dargestellt.

p++ GaN	20 nm	
p GaN	200 nm	$8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
GaN	13 nm	
3x InGaN QW	3.2 nm	$x_{\text{In}}=0.182$
3x GaN barrier	13 nm	
GaN barrier	400 nm	$5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
GaN	100 nm	$5 \times 10^{18} - 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
GaN	1000 nm	$5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
GaN substrate		$1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$

Abb. 3.1: Schichtstruktur der Probe A

Bei dem Substrat handelt es sich um freistehendes GaN (gewachsen von Mitsubishi Chemical), welches mit der Hydridgasphasenepitaxie gewachsen wurde. Die zwei unterschiedlichen Orientierungen der Proben sind $(20\bar{2}1)$ (Probe A) und $(20\bar{2}1)$ (Probe B). Die weiteren Schichten wurden mit metallorganischer chemischer Gasphasenabscheidung aufgewachsen. Für beide Proben wurde nach dem Substrat eine GaN-Schicht bestehend aus drei unterschiedlich dotierten Gebieten (GaN:Si) gewachsen. Die Schichtendicken sind $1 \mu\text{m}$, $0.1 \mu\text{m}$ und $0.4 \mu\text{m}$. Bei der Schicht von $1 \mu\text{m}$ wurde eine Dotierung von $5 \times 10^{18} \text{ 1/cm}^3$ verwendet. Bei der $0.1 \mu\text{m}$ dicken Schicht wurde die Dotierung linear zwischen $5 \times 10^{18} \text{ 1/cm}^3$ und $5 \times 10^{17} \text{ 1/cm}^3$ variiert und die dritte Schicht mit $0.4 \mu\text{m}$ wurde mit $5 \times 10^{17} \text{ 1/cm}^3$

Si-Atomen dotiert. Hierauf folgt der intrinsische nicht dotierte Bereich, in dem sich drei InGaN-QWs mit einem Indiumgehalt von 18.2 % (Probe A) und 13 % (Probe B) befinden. Die InGaN-QWs bzw. GaN-Barrieren haben eine Schichtdicke von 3.2 nm bzw 13 nm. Abgeschlossen wird die Oberfläche der Proben durch zwei p-dotierte Schichten. Diese besitzen eine Dicke von 200 nm und 20 nm. Die zuerst gewachsene p-dotierte Schicht besitzt eine Dotierung von $8 \times 10^{18} \text{ 1/cm}^3$ wohingegen die Dotierung der zweiten Schicht vermutlich größer ist als die der ersten [45]. Die angegebenen Indium Konzentrationen und die Schichtdicke des InGaN-QWs wurden mit Hilfe von hochauflösender Röntgendiffraktometrie bestimmt.

4 Elektreflexion und Photoreflexion

Die Modulationsspektroskopie ist eine optische absorptionskorrelierte Messmethode. Mit ihrer Hilfe lassen sich die kritischen Punkte der Bandstruktur sehr genau bestimmen. Bei den kritischen Punkten der Bandstruktur handelt es sich um charakteristische Punkte, an denen die Zustandsdichte Peaks aufweist bzw. $\nabla_k E = 0$ ist. Diese werden auch als Van-Hove-Singularitäten bezeichnet und wurden als erstes von dem belgischen Physiker Van Hove 1953 am Beispiel der Zustandsdichte von Phononen beschrieben [46]. Die besondere Eignung der Modulationsspektroskopie zur Bestimmung der Energie der Van-Hove-Singularitäten wird im Folgenden näher erklärt. Die Van-Hove-Singularitäten spiegeln sich in der dielektrischen Funktion und damit auch in den optischen Eigenschaften des Materials wieder. Betrachtet man z.B. die Reflexion des Materials, so zeigen sich die Van-Hove-Singularitäten als stark verbreiterte Absorptionskanten, deren Energiepositionen sich nur mit geringer Genauigkeit bestimmen lassen. Dies ändert sich deutlich, wenn die Reflektivität der Probe periodisch mit Hilfe einer externen Störung verändert wird. Wird nun die veränderte Reflexion gemessen und energieabhängig betrachtet, so ist diese proportional zur Ableitung der dielektrischen Funktion. In dieser treten die kritischen Punkte der Bandstruktur deutlich hervor und erscheinen als scharfe Signale. Beispielhaft ist dies in der Abbildung 4.1 für eine GaAs-Probe und für die Probe A dargestellt.

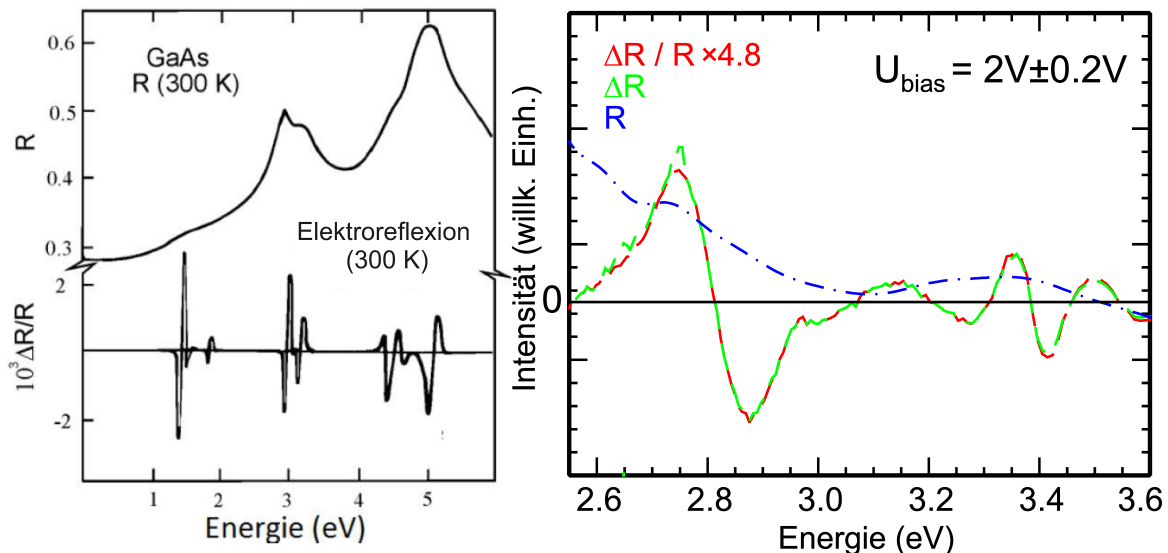


Abb. 4.1: Linkes Bild: Vergleich der Reflexion und der modulierten Reflexion mit der Methode der Elektreflexion am Beispiel einer GaAs-Probe bei 300 K [47]. Rechtes Bild: Vergleich der einfachen Reflexion mit der nicht normierten und normierten modulierten Reflexion nach der Methode der Elektreflexion am Beispiel der Probe A bei 295 K. Das Signal der Reflexion wurde separat für die Messung an der Probe B leicht geglättet.

Je nach verwendeter Störung gibt es verschiedene Arten der Modulationsspektroskopie. Einige Arten sind z.B. die in Abbildung 4.1 verwendete Elektroreflexion (elektrische) aber auch Photoreflexion (optische), Piezoreflexion (Druck) und Thermoreflexion (Temperatur).

4.1 Messplatz

Abbildung 4.2 zeigt den Messplatz mit dessen Hilfe die ER-Messungen vorgenommen wurden. Das von der Xe-Lampe ausgesandte Licht gelangt in den Monochromator und wird dort mit Hilfe eines Strichgitters mit 2400 Strichen pro mm spektral zerlegt. Am Ausgangsspalt befindet sich ein Polarisator, der eine definierte Polarisation des Lichtes ermöglicht. Die Zuordnung der Polarisatorstellung zu der Schwingungsrichtung des Lichtes, bezogen auf die c -Achse der untersuchten Proben, wird im Abschnitt 5.3 diskutiert und festgelegt. Nach dem Polarisator wird das Licht mit Hilfe von zwei Linsen erst in das Unendliche abgebildet und dann durch die zweite Linse fokussiert. Hierbei wird auf eine homogene Ausleuchtung des Kontaktes der Probe geachtet. Die Probe befindet sich in einem Badkryostaten. Zum Erreichen von Temperaturen unterhalb der Raumtemperatur (295 K) wird gasförmiger Stickstoff (77 K) verwendet, der die Probe gleichmäßig umströmt.

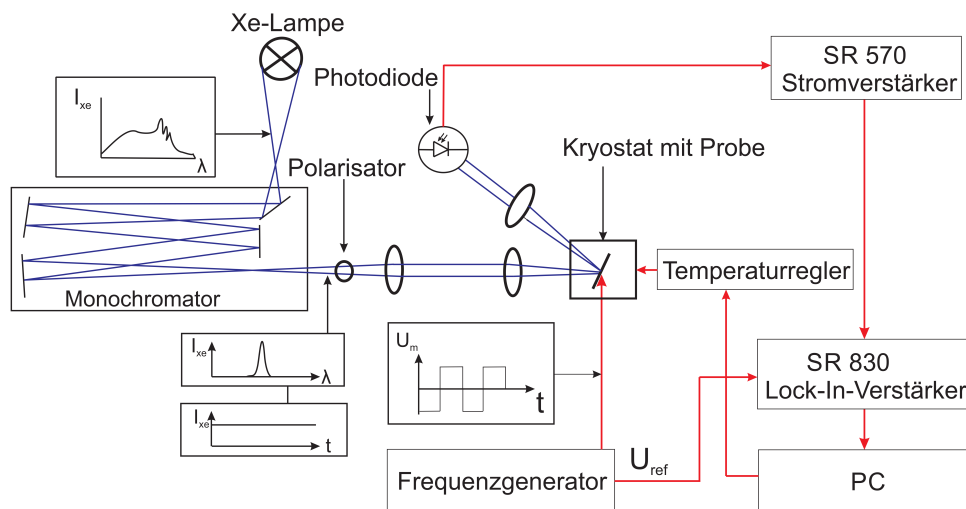


Abb. 4.2: Aufbau des Messplatzes für die Elektroreflexion. Der Lichtweg ist in blau dargestellt. Für die elektrischen Verbindungen wurden rote Pfeile verwendet.

Die Temperatur der Probe wird mit Hilfe einer Heizung und einer Temperaturkontrolle eingestellt. Während der Beleuchtung der Probe wird gleichzeitig an den Kontakten eine aus Gleich- und Wechselspannungsanteil bestehende Rechteckspannung angelegt. Die da-

durch induzierte Änderung der elektrischen Feldstärke bricht die Translationssymmetrie und ändert damit die Energieeigenwerte und die Wellenfunktionen der Schrödingergleichung. Damit wird die dielektrische Funktion und auch die Reflexion des Materials verändert. Die Änderung der Reflexion wird mit Hilfe der Photodiode als Wechselstrom gemessen und das zugehörige Signal mit Hilfe eines Stromverstärkers (SR 570) verstärkt. Hierauf wird das Signal an den Lock-in-Verstärker weitergegeben und unter Verwendung des Referenzsignals (U_{ref}) der modulierenden Rechteckspannung phasensensitiv ausgewertet. Vom Lock-in-Verstärker wird ein Gleichspannungssignal ausgegeben, welches proportional zur Änderung der Reflexion (ΔR) der Probe ist. Für eine wellenlängenabhängige Normierung des Spektrums wird die Reflexion (R) der Probe ohne Modulation verwendet. Diese entspricht dem Gleichstromanteil am Ausgang des Stromverstärkers SR 570. Das Messsignal der Elektreflexion ergibt sich dann nach Gleichung 4.1 zu

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{R(U_{dc} + U_{ac}) - R(U_{dc} - U_{ac})}{R(U_{dc})}. \quad (4.1)$$

Hierbei bezeichnen $R(U_{dc} + U_{ac})$ und $R(U_{dc} - U_{ac})$ die beiden Reflektivitäten bei verschiedenen Spannungswerten und dementsprechend verschiedenen elektrischen Feldern. Die Modulationsmethoden Elektreflexion und Photoreflexion unterscheiden sich lediglich durch die Art der Modulation der elektrischen Felder. Bei der Photoreflexion erfolgt diese durch einen Laser (im abgebildeten Fall ein HeCd mit $\lambda = 325$ nm). Die Intensität des kontinuierlichen Laserstrahls wird mit Hilfe eines Lichtzerhackers zu einem periodischen Rechtecksignal verändert. Trifft das Laserlicht auf die Probe, so wird es absorbiert. Die erzeugten Elektronen-Loch-Paare modulieren die elektrische Feldstärke in der Probe. Die Modulation ist damit vergleichbar mit der Modulation durch den Frequenzgenerator bei der Elektreflexion. Gleichzeitig entsteht aufgrund der Rekombination innerhalb der Probe Lumineszenz. Die Lumineszenz verursacht einen Untergrund für das PR-Spektrum, dessen negativer Einfluss durch die Verwendung von optischen Filtern für den HeCd-Laser verringert wird. Der Vorteil der PR im Vergleich zur ER ist, dass keine aufwendigen Kontakte auf der Probe aufzubringen sind, die die Probeneigenschaften beeinträchtigen können. In dieser Arbeit wird jedoch hauptsächlich die ER verwendet, da diese eine kontinuierliche Variation der elektrischen Feldstärke ermöglicht und die angesprochene Lumineszenz der Probe unterhalb der Durchlassspannung der Diode entfällt.

Im nun folgenden Kapitel wird die Wahl der Parameter für ein rauscharmes und intensitätsstarkes Spektrum diskutiert. Hierbei werden vor allem die Parameter betrachtet, die einen großen Einfluss auf die Qualität des Spektrums haben. Diese Parameter sind z.B. die Modulationsfrequenz und Wahl des Formalismus für die Auswertung des Ausgangssignales des Lock-in-Verstärkers.

4.2 Bestimmung der optimalen Modulationsfrequenz

In diesem Kapitel wird der Einfluss der Modulationsfrequenz auf das Spektrum untersucht. Hierfür wird die Methode der Photoreflexion verwendet und beispielhaft an der Teststruktur MD7998 durchgeführt. Bei dieser Probe handelt es sich um eine unkontaktierte in c -Richtung gewachsene InGaN/GaN-Struktur mit fünf QWs und einem Indiumgehalt von 13.7 %. Bei der PR wird ein HeCd-Laser mit 325 nm und einer Leistung von 20 mW verwendet. Unter Bestrahlung der Probe mit dem HeCd-Laser kommt es zur Anregung der Probe. Die damit verbundene Lumineszenz wird durch eine Verringerung der Laserleistung auf 0.2 mW so stark reduziert, dass eine optimale Messung des Spektrums ermöglicht wird. Die Modulationsfrequenz betrug 130 Hz. In Abbildung 4.3 ist das zugehörige PR-Spektrum dargestellt.

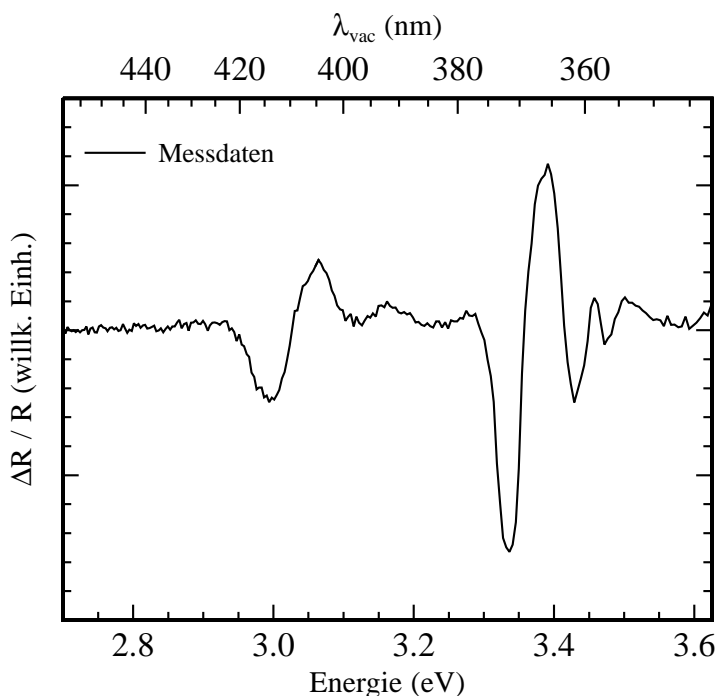


Abb. 4.3: PR-Spektrum der Probe MD7998 unter Verwendung eines HeCd-Lasers (325 nm) und einer Leistung von 0.2 mW.

Im Energiebereich zwischen 2.95 – 3.1 eV befindet sich das Signal des QWs, im Bereich um 3.3 eV das Signal der Barriere mit einem Indiumgehalt von $\approx 3\%$ [48] und oberhalb von 3.4 eV das Signal der GaN-Exzitonen. Im Folgenden wurde die Wellenlänge des modulierten Lichtes konstant auf 2.818 eV \cong 440 nm gehalten. Die Wahl von 440 nm ist beliebig und orientiert sich lediglich daran, dass eine Wellenlänge verwendet wird, bei der im Spektrum kein Signal zu erkennen ist. Am Ausgang des Lock-in-Verstärkers wurden die Messwerte 10 Sekunden lang aufgenommen und einer schnellen Fourier-Transformations-Analyse (engl. fast fourier transformation, FFT) unterzogen. Das Ergebnis ist für die Wahl verschiedener Modulationsfrequenzen von 8 Hz bis 216 Hz in Abbildung 4.4 dargestellt.

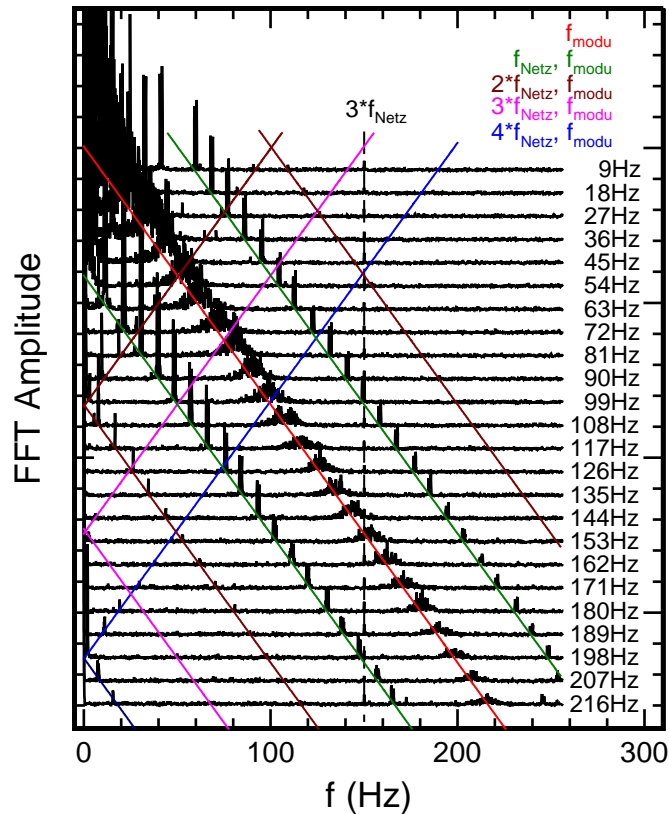


Abb. 4.4: FFT-Spektrum der am Ausgang des Lock-in-Verstärkers gemessenen Messwerte (Probe MD7998) bei einer Wellenlänge von 440 nm, $T= 295$ K. Die Modulationsfrequenz wurde im Bereich zwischen 8 Hz und 216 Hz variiert und die Signale, je nach beteiligtem Kopplungssignal, farblich zugeordnet.

Die Frequenzkomponente bei 0 Hz entspricht dem Offset des Spektrums. Oberhalb einer Frequenz von 0 Hz befinden sich Störfrequenzen. Diese setzen sich aus der gewählten Modulationsfrequenz, den Kopplungen der Modulationsfrequenz und aus Vielfachen der Netzfrequenz ($f_{Netz}=50$ Hz) zusammen. Um den Einfluss der Modulationsfrequenz auf ein Spektrum zu beschreiben, wird das gesamte Rauschniveau durch die Summation der frequenzabhängigen FFT-Amplitude über alle Störfrequenzen ermittelt. Das Ergebnis ist in Abhängigkeit von der Modulationsfrequenz in Abbildung 4.5 dargestellt. Hierbei fällt auf, dass bei einer Frequenz von ≈ 130 Hz die Störfrequenzen mit geringster Intensität im Spektrum auftreten. Zusätzlich sei darauf hingewiesen, dass ein Lock-in-Verstärker, je nach Wahl der Zeitkonstante des verwendeten Tiefpasses, ein unterschiedlich großes Frequenzband um die Modulationsfrequenz durchlässt. Eine Erhöhung der Zeitkonstante ist somit verknüpft mit einer Verringerung des Rauschniveaus, wobei sich die benötigte Messzeit aufgrund des längeren Einschwingvorgangs des Lock-in-Verstärkers erhöht.

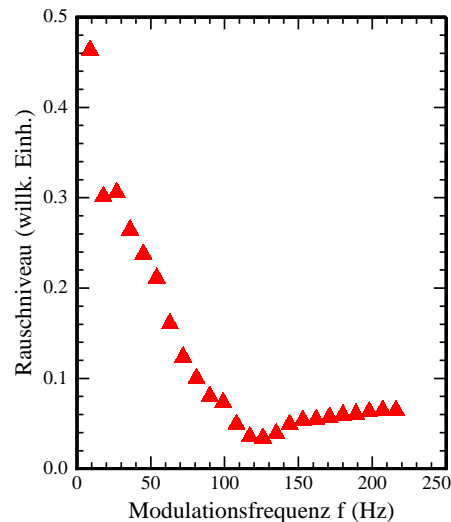


Abb. 4.5: Abhängigkeit des Rauschniveaus von der gewählten Modulationsfrequenz.

4.3 Auswertung der vom Lock-in-Verstärker ausgegebenen Messwerte

Für die Bestimmung des Messsignals (ΔR) gibt es verschiedene Ansätze die im Folgenden näher untersucht werden:

1. Mittelwertbildung der Messwerte
2. Anpassung mit exponentiellem Fit
3. Gaußfit der Verteilung der Messwerte um das Messsignal
4. Frequenzfilterung des Messsignals und die Mittelung der Frequenzanteile nahe 0 Hz

4.3.1 Mittelwertbildung der Messwerte

Bei der Veränderung eines Messwertes, welcher mit dem Lock-in-Verstärker gemessen wird, muss berücksichtigt werden, dass dieser aufgrund des verwendeten Tiefpasses ein exponentielles Einschwingverhalten aufweist. Dieses ist abhängig von der am Lock-in-Verstärker gewählten Zeitkonstante und dem gewählten Filter. Die Zeit für ein Einschwingen des Lock-in-Verstärkers beträgt bei einem Filter von 6 db/oct fünf Zeitkonstanten. Nach dieser Zeit werden 99 % seines endgültigen Wertes erreicht. Sind diese fünf Zeitkonstanten vergangen, wurden die Messwerte mit einer Frequenz von 512 Hz aufgenommen. Die tatsächliche Anzahl der verwendeten Messwerte kann separat eingestellt werden und wird typischerweise zwischen 100 und 500 gewählt. Das Messsignal ΔR wurde daraufhin über den arithmetischen Mittelwert der Messwerte gebildet.

4.3.2 Anpassung mit exponentiellem Fit

Zur Verringerung der Messzeit bei der Ermittlung des Messwertes eines Spektrums, wurde das Einschwingverhalten des Lock-in-Verstärkers untersucht. Ziel der Untersuchung war herauszufinden, ob aufgrund des bekannten exponentiellen Einschwingens des Messsignals eine schnellere Bestimmung des Messwertes erfolgen kann. Für eine Anpassung des Einschwingens hat sich jedoch gezeigt, dass ein stabiler Fit nur erreicht werden konnte, wenn die Messwerte mindestens im Zeitraum von drei bis fünf Zeitkonstanten verwendet wurden. In Abbildung 4.6 ist das exponentielle Einschwingen eines Signals am Ausgang des Lock-in-Verstärkers dargestellt und mit einer exponentiellen Funktion angepasst.

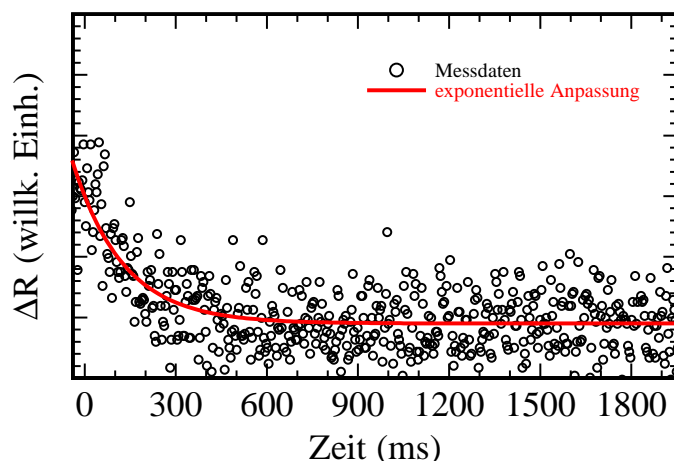


Abb. 4.6: Messsignal am Ausgang des Lock-in-Verstärkers bei einer Frequenz von 512 Hz. Die Messdaten wurden mit einem exponentiellen Fit angepasst. Die gewählte Zeitkonstante des Tiefpassfilters wurde zu $\tau = 300$ ms gewählt.

4.3.3 Gaußfit der Verteilung der Messwerte um das Messsignal

Eine weitere Methode zur Ermittlung des Messsignals ist in Abbildung 4.7 veranschaulicht. Hierbei wurden die Messwerte im eingeschwungenen Zustand des Lock-in-Verstärkers aufgenommen. Der Messbereich wurde in Bereiche mit festgelegter Breite unterteilt und das Auftreten eines Messsignals in jedem dieser Bereiche als Ereignis erfasst.

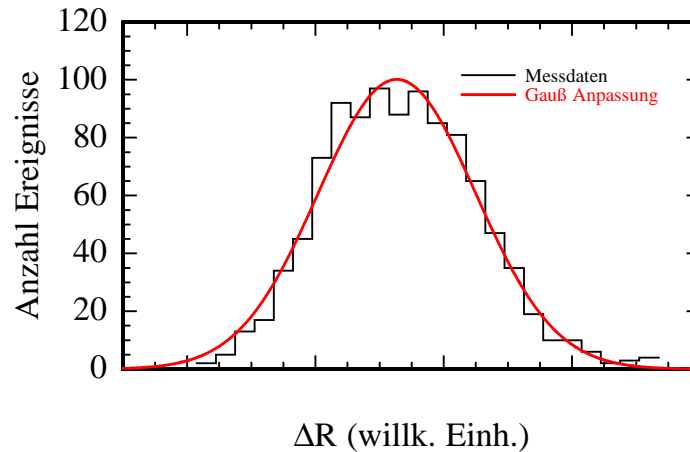


Abb. 4.7: Verteilung der Messwerte am Ausgang des Lock-in-Verstärkers in Abhängigkeit von deren Häufigkeit und Anpassung der Messdaten mit einer Normalverteilung

Die beobachteten Messwerte sind normalverteilt. Der Erwartungswert wird beim späteren Vergleich mit anderen Methoden als ΔR interpretiert.

4.3.4 Frequenzfilterung des Messsignals

Werden die noch vorhandenen Anteile von höheren Frequenzen am Ausgang des Lock-in-Verstärkers betrachtet (siehe Abbildung 4.4), so stellen diese eine Störung des Messsignals dar. Um den Einfluss dieser Störung zu verringern, wurde ein Tiefpassfilter in der Software mit einem Besselfilter bei 5 Hz implementiert. Dieser reduziert Frequenzanteile oberhalb von 5 Hz. Hierauf wurde das Messsignal, wie in Abschnitt 4.3.1 beschrieben, ermittelt.

4.3.5 Vergleich der verschiedenen Auswerteverfahren

In Abbildung 4.8 werden die verschiedenen zuvor beschriebenen Auswerteverfahren anhand eines gemessenen Spektrums an der Probe MD8863 verglichen. Bei der Probe MD8863 handelt es sich um eine InGa_N/Ga_N-Struktur mit einem QW und einem Indiumgehalt von 13 %. Bei den gezeigten Messungen wurde eine geringe Zeitkonstante von $\tau = 300$ ms verwendet, um ein sichtbares Rauschen im Spektrum zu erhalten und die einzelnen Auswerteverfahren effektiv miteinander vergleichen zu können. Bei allen Spektren ist das Signal, das den Exzitonen des Ga_N zugeordnet werden kann (um 3.42 eV), erkennbar. Die Intensität dieses Signals (Spitze-Spitze) wird im Folgenden als A_{Signal} bezeichnet. Im Vergleich der verschiedenen Methoden ist die Amplitude des Signals bei der einfachen Mittelwertbildung am größten. Für die Einschätzung der Qualität der vier verschiedenen Spektren wird auf das Signal-Rausch-Verhältnis zurückgegriffen.

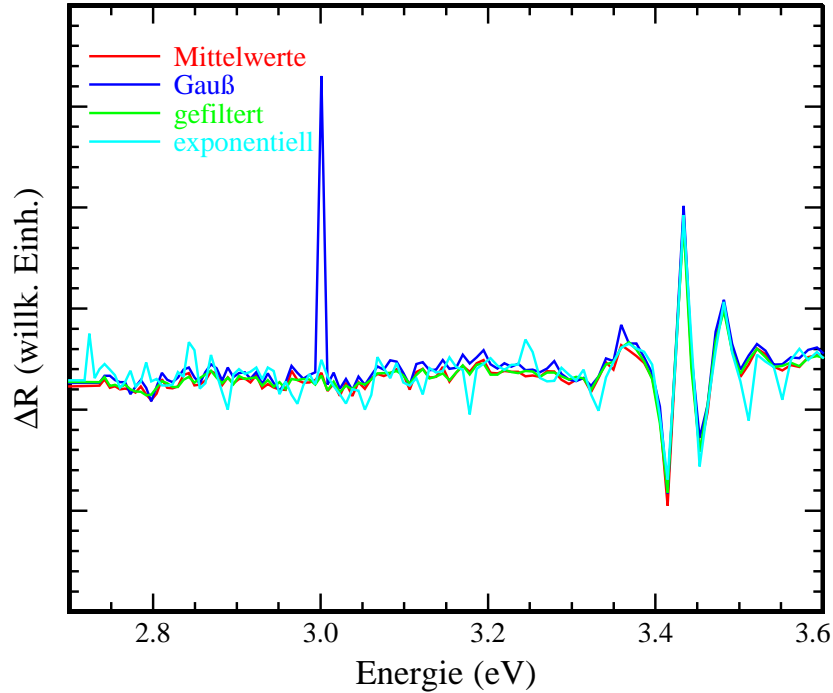


Abb. 4.8: Vergleich der PR-Spektren der Probe MD8863 bei unterschiedlichen Auswerteverfahren. Die Spektren wurden bei Raumtemperatur (295 K) und einer Zeitkonstanten von $\tau = 300$ ms aufgenommen.

Das Signal-Rausch-Verhältnis ist definiert als

$$SNR = \frac{A_{Signal}}{\sigma_{Rausch}}. \quad (4.2)$$

Bei der Ermittlung von σ_{Rausch} wurde ein Bereich von 3.05 – 3.3 eV verwendet, da sich in diesem Bereich keine zum Spektrum beitragenden Signale befinden. Das SNR sowie die für die Berechnung ermittelten Werte von A_{signal} und σ_{Rausch} sind für die vier Spektren in Tabelle 3, zusammengefasst.

	SNR	A_{signal}	σ_{Rausch}
Mittelwerte	41.99	0.02918	0.00069
Gauß	33.90	0.02847	0.00084
Gefiltert	45.36	0.02628	0.00058
exponentiell	16.32	0.02594	0.00158

Tab. 3: Aus der Größen A_{signal} und σ_{Rausch} berechnetes SNR. Die Standardabweichung wurde im Bereich zwischen 3.05 – 3.3 eV ermittelt. Die Größe A_{signal} entspricht der Summe des Signals bei 3.413 eV und 3.432 eV.

Betrachtet man die SNR-Werte in Tabelle 3, so zeigen die Auswertemethoden mit Tiefpassfilterung und einer reinen Mittelwertbildung die größten SNR-Werte auf. Durch die Filterung werden die im Spektrum auftretenden Signale gedämpft. Dies lässt sich am Vergleich

der Werte von A_{signal} für die verschiedenen Fälle erkennen. A_{signal} ist für den gefilterten Fall um bis zu 10 % niedriger als bei der einfachen Mittelwertbildung. Die Dämpfung des Messsignals ist insbesondere bei kleinen Signalen nicht erwünscht. Deshalb wird die reine Mittelwertbildung ohne zusätzlichen Tiefpassfilter bei der Generierung der in dieser Arbeit gezeigten Spektren verwendet.

4.4 Beschreibung der Linienform der Elektreflexion

4.4.1 Die dielektrische Funktion

Die optische Antwort eines Materials lässt sich unter Verwendung der dielektrischen Funktion (DF) beschreiben. Diese ist komplex und kann zu

$$\bar{\varepsilon} = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 \quad (4.3)$$

beschrieben werden. Hierbei ist ε_1 der Realteil und ε_2 der Imaginärteil der DF. Der Realteil der DF beschreibt die Dispersion und der Imaginärteil charakterisiert die Absorption eines Materials. Sowohl Real- als auch Imaginärteil lassen sich über die Kramers-Kronig-Relation [49, 50]

$$\varepsilon_1 - 1 = \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (4.4)$$

$$\varepsilon_2 = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon_1(\omega')}{\omega^2 - \omega'^2} d\omega' \quad (4.5)$$

auseinander bestimmen. P entspricht dabei dem Cauchyschen Hauptwert des auftretenden Integrals. Die Kramers-Kronig-Relation ist eine Integraltransformation bzw. eine Hilbertraumtransformation, deren Gültigkeit sich aus der linearen Antworttheorie ableiten lässt. Die Verbindung von Ursache und Wirkung eines physikalischen Systems linear zu beschreiben, ist eine in der Physik häufig verwendete Modellvorstellung und findet Anwendung bei einer Vielzahl von physikalischen Prozessen. Beispiele sind die Polarisierung eines Dielektrikums als Reaktion auf ein angelegtes elektrisches Feld oder die Auslenkung und äußere Kraft beim getriebenen gedämpften Oszillator. Im Allgemeinen lässt sich die Reaktion eines kausalen, linearen, stationären Systems durch

$$r(t, s) = \int_0^t R(t - t') F(t') dt' \quad (4.6)$$

beschreiben [51]. Hierbei bezeichnet $r(t, s)$ die zeitabhängige Antwort des Systems, $F(t')$ die Anregung des Systems und $R(t - t')$ eine vermittelnde Funktion zwischen Anregung und Antwort. Die Gültigkeit der Kramers-Kronig-Relation lässt sich auf drei notwendige Eigenschaften der Funktion $R(t - t')$ und die Anwendbarkeit des Cauchy-Integral-Theorems auf diese Funktion zurückführen. Die drei Eigenschaften sind [51, 52]:

- $R(t')$ ist reell $\implies R^*(\omega) = R(-\omega)$
- Es existiert ein kausaler Zusammenhang zwischen der Anregung und der Antwort des Systems für $t > 0$
- $R(t)$ ist beschränkt (mindestens t^{-2} für $t \rightarrow \infty$)

Bezüglich der Anwendbarkeit des Cauchy-Integral-Theorems sei auf Shanoff [51] verwiesen. Die angesprochenen notwendigen Eigenschaften sind bei der DF erfüllt.

Eine weitere wichtige Größe ist der Absorptionskoeffizient α . Dieser kann für die Berechnung der Lichteindringtiefe nach dem Lambert-Beerschen Gesetz verwendet werden.

$$I(d) = I_0 e^{-\alpha d} \quad (4.7)$$

$I(d)$ beschreibt die Intensität bei gegebener Tiefe d des Materials. Der Absorptionskoeffizient ist über

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega}{n(\omega)c_0} \varepsilon_2 \quad (4.8)$$

mit der DF verbunden. Hierbei entspricht $n(\omega)$ dem Realteil des komplexen Brechungsindex und c_0 der Lichtgeschwindigkeit im Vakuum.

Im folgenden Abschnitt wird der Einfluss des elektrischen Feldes auf die dielektrische Funktion und die Reflektivität einer Probe behandelt.

4.4.2 Franz-Keldysh-Effekt

Ein geeigneter Effekt zur Ermittlung des elektrischen Feldes ist der Franz-Keldysh-Effekt. Dieser beschreibt die Veränderung der Absorption eines Halbleiters unter Einfluss eines elektrischen Feldes. Der Effekt wurde von Franz und Keldysh in unabhängigen Arbeiten

bereits 1958 vorhergesagt [53, 54] und im gleichen Jahr von Böer *et al.* [55, 56] experimentell bestätigt. Als ein universeller Effekt findet dieser bei der Analyse von Halbleitern vielfältige Anwendungen. Die Franz-Keldysh-Theorie wurde durch weitere Untersuchungen [57] stetig erweitert und berücksichtigt beispielsweise Beiträge von mehreren Bändern und Abweichungen von der Parabolizität der Bänder [58, 59], excitonische Effekte [60, 61, 62, 63], Quantenphänomene in Halbleiter-Nanostrukturen [64, 65, 66], Übergänge unter der Beteiligung von Phononen bzw. unter Beteiligung von mehreren Photonen [64, 65] sowie den Einfluss von starken elektrischen Feldern [67]. Eine Auswirkung des Franz-Keldysh-Effektes sind die sogenannten Franz-Keldysh-Oszillationen. Diese treten in Absorptionsmessungen oberhalb der Bandkante auf und ermöglichen z.B. die Bestimmung der elektrischen Feldstärke. Im Folgenden werden die Grundlagen des Franz-Keldysh-Effektes bzw. der gleichnamigen Oszillationen vorgestellt. Ausgangspunkt hierfür ist die stationäre Schrödingergleichung, unter dem Einfluss eines eindimensionalen elektrischen Feldes in x -Richtung. Diese ist zu

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu^*}\phi(x) + xeF_x\phi(x) = E_x\phi(x) \quad (4.9)$$

definiert. Hierbei bezeichnen F_x das elektrische Feld in x -Richtung und μ^* die effektive Interbandmasse. Gleichung 4.9 lässt sich durch die Einführung der dimensionslosen Größe η mit

$$\eta = \frac{E_x}{\hbar\Theta} - x \left(2 \frac{\mu_x^* e |F_x|}{\hbar^2} \right)^{1/3} \quad (4.10)$$

und der Definition der elektrooptischen Energie

$$\hbar\Theta = \left(\frac{e^2 F_x^2 \hbar^2}{2\mu_x^*} \right)^{1/2} \quad (4.11)$$

weiter vereinfachen und in eine Differentialgleichung der Form

$$\frac{d^2\phi(\eta)}{d\eta^2} = -\eta\phi(\eta). \quad (4.12)$$

überführen.

Diese Differentialgleichung wird Airy-Gleichung genannt, wobei ihre Lösung aus den Airy-Funktionen besteht. Die Airy-Funktionen sind in Abbildung 4.9 als rote bzw. blaue Funktionen dargestellt.

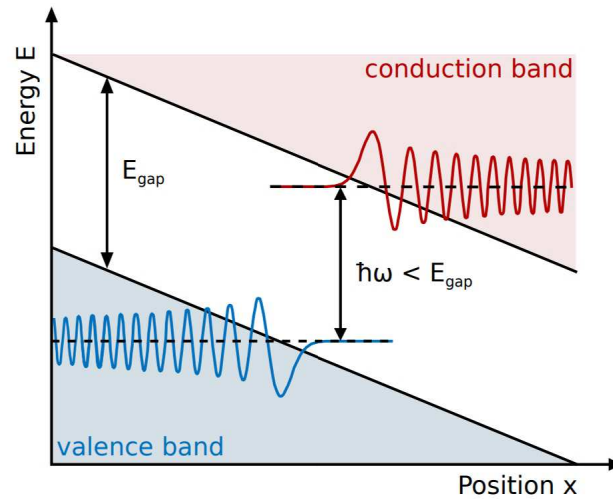


Abb. 4.9: Banddiagramm mit Valenz- und Leitungsband unter dem Einfluss eines konstanten elektrischen Feldes. Die Wellenfunktionen des Valenz- (blaue Kurve) und Leitungsbandes (rote Kurve) sind sowohl im Band als auch im klassisch verbotenen Bereich innerhalb der Bandlücke dargestellt [68].

Bei den Airy-Funktionen handelt es sich um Funktionen, die aus zwei charakteristischen Bereichen bestehen. Einerseits verhalten sich diese tief im Band wie Bloch-Funktionen mit ihrem oszillierenden Verhalten, andererseits weisen sie einen exponentiellen Bereich auf. Durch die Verkippung der Bänder aufgrund des elektrischen Feldes, kann die Wellenfunktion des gestörten Potentials in den klassisch verbotenen Bereich zwischen den Bändern tunneln. Innerhalb der Bandlücke weist das Überlappintegral damit einen von Null verschiedenen Wert auf, wodurch eine Absorption mit einer Energie unterhalb der Bandkante möglich wird. Der Überlapp der Wellenfunktion, wie auch die zugehörige Absorption, nehmen im Bereich der Bandlücke exponentiell ab. Für die Beschreibung der Franz-Keldysh-Oszillationen wird der Imaginärteil der dielektrischen Funktion mit und ohne elektrischem Feld verwendet (gestrichelte schwarze und durchgezogene blaue Funktion in Abbildung 4.10).

Die dielektrische Funktion kann nach Cardona *et al.* [69] aus mikroskopischer Betrachtungsweise folgendermaßen berechnet werden

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{2\pi}{m\omega} \right) e|P_{vc}|^2 \left(\sum_{\vec{k}} \delta(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega) \right). \quad (4.13)$$

Hierbei beschreibt P_{vc} das Dipolmatrixelement für Übergänge zwischen Leitungs- und Valenzband.

Unter Verwendung der Lösung von Gleichung 4.12 ergibt sich ε_2 zu

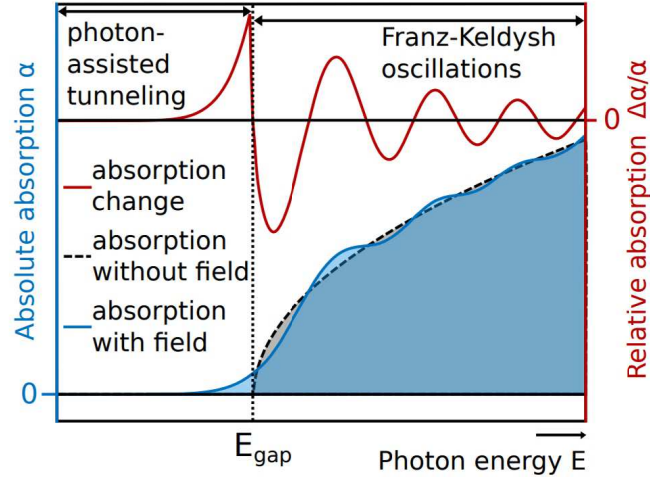


Abb. 4.10: Absorptionskoeffizient ohne Einfluss des elektrischen Feldes (schwarze gestrichelte Kurve) und mit Einfluss des elektrischen Feldes (blaue Kurve) in der Nähe der Bandkante. Die relative Absorptionsänderung zwischen beiden Zuständen ist durch die rote Linie dargestellt [68].

$$\varepsilon_2(\omega, F) = \frac{2\pi e^2 2(\mu^*)^{3/2} P^2 \sqrt{\hbar\gamma}}{m_0^2 \hbar^3 \omega^2} [Ai'^2(\zeta) - \zeta Ai^2(\zeta)] \quad (4.14)$$

mit

$$\zeta = \frac{E_g - \hbar\omega}{\hbar\omega}. \quad (4.15)$$

Für die ER ist nur die Differenz der dielektrischen Funktion mit und ohne Feldeinfluss von Interesse. Diese lässt sich nach der Doktorarbeit von C. Buchheim [31] durch

$$\Delta\varepsilon_2(\omega, E) = \varepsilon_2(\omega, E) - \varepsilon_2(\omega, 0) = \frac{2e^2(2\mu)^{3/2} P^2 \theta^{1/2}}{m^2 \hbar E^2} \mathcal{F}\left(\frac{E_0 - E}{\theta}\right) \quad (4.16)$$

beschreiben, wobei \mathcal{F} die elektrooptische Funktion nach

$$\mathcal{F}(\zeta) = \pi [Ai'^2(\zeta) - \zeta Ai^2(\zeta)] - \sqrt{(-\zeta)\mathcal{H}(\zeta)} \quad (4.17)$$

darstellt. \mathcal{H} ist dabei die Heaviside-Stufen-Funktion. Der Verlauf von $\Delta\varepsilon_2$ ist über die dazu proportionale Absorptionsänderung als rote Kurve in Abbildung 4.10 veranschaulicht.

Das ER-Signal ergibt sich damit zu [59]

$$\frac{\Delta R}{R} \propto \frac{1}{\hbar^2 \omega^2 (\hbar \omega - E_g)} \exp \left(- \frac{2\sqrt{\hbar \omega - E_g} \Gamma}{(\hbar \theta)^{3/2}} \right) \cos \left[\chi + \frac{4}{3} \left(\frac{\hbar \omega - E_g}{\hbar \theta} \right)^{3/2} \right]. \quad (4.18)$$

Diese Näherung beruht darauf, dass die Airy-Funktion für große Werte von ζ angenähert werden kann.

4.4.3 Grundzustand des Quantengrabens

Um die optischen Eigenschaften im energetischen Bereich des QW zu beschreiben, wird die im vorherigen Kapitel angesprochene DF verwendet. Bei der Elektroreflexion wird die DF durch eine an den Kontakten angelegte Wechselspannung periodisch verändert. Das dadurch veränderte elektrische Feld ändert die DF und bedingt eine Verschiebung des Einsatzpunktes der Absorption und eine Verbreiterung der Absorptionskanten. Im Vergleich zum vorher dargestellten, oszillierenden Verhalten der dielektrischen Funktion mit den zugehörigen Franz-Keldysh-Oszillationen, sind diese Oszillationen bei den in dieser Arbeit gemessenen Spektren oberhalb des QW-Signals nicht zu erkennen. Nach Aspnes [70] handelt es sich hierbei um den Niedrigfeld-Fall. Dieser ergibt sich sobald die energetische Verbreiterung deutlich größer ist, als die elektrooptische Energie ($\Gamma \gg \theta$). Das Verhalten des Absorptionskoeffizienten im Niedrigfeldfall ist am Beispiel von GaN für verschiedene elektrische Feldstärken in Abbildung 4.11 dargestellt.

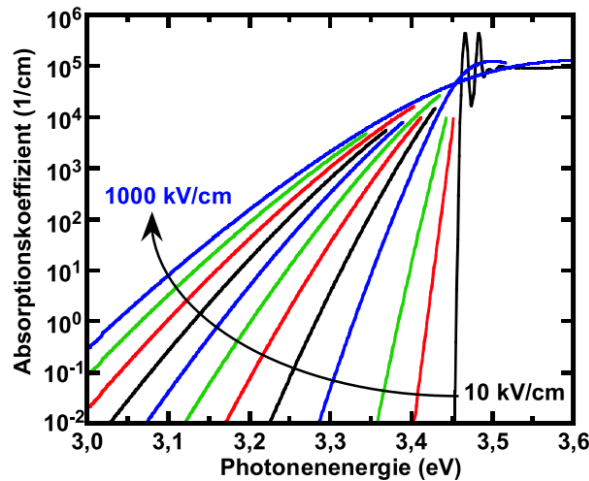


Abb. 4.11: Absorptionskoeffizient von GaN in Abhängigkeit von der elektrischen Feldstärke für den Bereich unterhalb der GaN-Bandkanten. Die Feldstärken wurden zu 10, 50, 100, 200, 300, 400, 500, 600, 700, 800, 900 und 1000 kV/cm gewählt [71].

Um das Signal des Grundzustandes des QW zu beschreiben wird das im nachfolgenden vorgestellte Modell verwendet. Hierbei wird angenommen, dass die optischen Eigenschaften

der GaN-Barrieren und der GaN-Deckschicht für Licht im energetischen Bereich der Absorption des QW unverändert bleiben und somit nicht berücksichtigt werden müssen. Diese Annahme ist berechtigt, da das Signal des QW energetisch im Transparenzbereich der Barriere und der Deckschicht liegt. Das auftreffende Messlicht kann somit keine Veränderung der optischen Eigenschaften abseits des QW verursachen.

Für die Modellierung der Absorptionskanten der aktiven Schicht wird in der Literatur häufig eine Sigmoidalfunktion verwendet [72, 73]. In dieser Arbeit handelt es sich dabei im Speziellen um eine verbreiterte Fehlerfunktion. Diese ist eine gute Näherung im energetischen Bereich um die Absorptionskante, wenn exzitonische Effekte vernachlässigt werden können und ist durch Gleichung 4.19 gegeben.

$$\varepsilon_2 = A \cdot \text{Re} \left(\text{erf} \left(\frac{E - E_{erf}}{\sigma} + 1 \right) \right) \quad (4.19)$$

Hierbei entspricht A der maximalen Höhe der Fehlerfunktion, E_{erf} der charakteristischen Energie des Übergangs und σ der Verbreiterung. Wie später in Kapitel 5.3 gezeigt wird, sind im Photostromspektrum der Proben keine Exzitonen sichtbar und dementsprechend scheint diese Näherung gültig. Für die Beschreibung der Absorption bei einer zugehörigen Feldstärke wird nur eine einzelne Fehlerfunktion verwendet. Dies ist dadurch möglich, dass höhere Übergänge des QW einen genügenden Abstand vom Grundzustand besitzen und der Einfluss dieser Übergänge auf die Anpassung des Grundzustandes als vernachlässigbar gering eingeschätzt werden kann. Die Beschreibung der Absorptionskante wird im Folgenden als Imaginärteil der DF des Grundzustandes des QW festgelegt. Durch die Kramers-Kronig-Relation (siehe Gleichung 4.4) lässt sich der zugehörige Realteil ermitteln.

Um den Einfluss höherer Übergänge auf die Dispersion des InGaN zu berücksichtigen, wird ein konstanter Wert von 4.5 zum berechneten Realteil dazu addiert. Für die spätere Auswertung wird davon ausgegangen, dass die Modulation des elektrischen Feldes eine Veränderung der charakteristischen Energie der Fehlerfunktion von 10 eV bewirkt. Ansonsten bleibt bei der Modulation die Linienbreite der Fehlerfunktion bei beiden elektrischen Feldern unverändert. Am Beispiel einer Übergangsenergie von $E_{erf_1} = 2.81$ eV und $E_{erf_2} = 2.82$ eV sind die sich ergebenden DFs und deren Differenz in Abbildung 4.12 dargestellt.

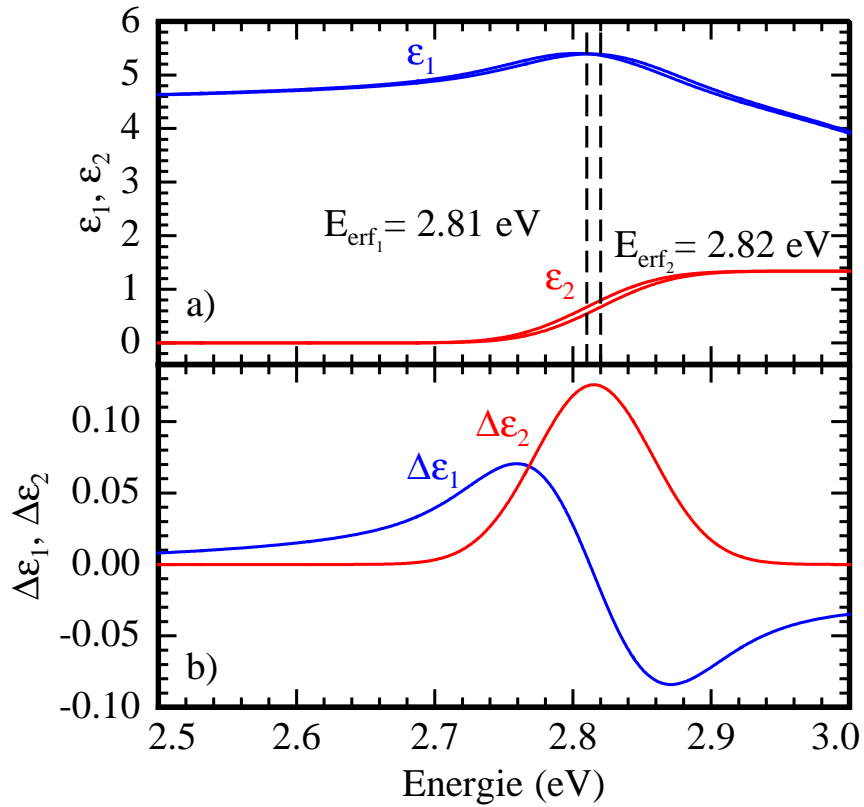


Abb. 4.12: Real- und Imaginärteil zweier simulierter dielektrischer Funktionen für angenommene Übergangsenergien von $E_{\text{erf}_1} = 2.81 \text{ eV}$ und $E_{\text{erf}_2} = 2.82 \text{ eV}$ a) und deren Differenz b).

4.4.4 Berücksichtigung der Schichtstruktur für die Linienformanpassung

Für die optische Antwort der untersuchten Proben ist die Berücksichtigung der Schichtstruktur der Probe von großer Bedeutung. Shields, Klipstein und Apsley [9, 10] entwickelten ein Modell zur Beschreibung des Elektroreflexionssignals von Einzel- und Vielfachquantengraben. Im Folgenden werden die Grundlagen dieses Modells vorgestellt. Hierbei wird das Modell, ausgehend von einer aus zwei Schichten bestehenden Probe, auf eine Probe mit beliebig vielen Schichten erweitert.

Zunächst wird eine aus zwei Schichten bestehende Struktur betrachtet. Hierbei lässt sich die Amplitude der Reflexion (r) und der Phasenunterschied des Lichtes (g) zwischen der Oberfläche und der Grenzschicht zu

$$r = \frac{(r_1 + r_2 \exp(ig))}{(1 + r_1 r_2 \exp(ig))} \quad (4.20)$$

$$g = 2k_{\text{vak}} L n$$

beschreiben. Hierbei bezeichnen r_1 und r_2 die Reflektivitäten an der genannten Oberfläche

und an der Grenzschicht zwischen beiden Schichten und k_{vak} den k Vektor des Lichtes im Vakuum. Die Größen L und n bezeichnen die Dicke der ersten Schicht und den zugehörigen Brechungsindex des Materials. Der Einfallswinkel des Lichtes war bei allen durchgeführten Messungen nahe 90° und muss somit nicht im Phasenunterschied berücksichtigt werden. Für den konkreten Fall eines isolierten QW, bestehend aus Barriere und QW-Schicht, ergeben sich die Reflektivitäten der Schichten nach den Fresnelschen Formeln in Abhängigkeit von den Brechungsindizes n_{QW} und n_b .

$$-r_1 = r_2 = \frac{n_{QW} - n_b}{n_{QW} + n_b} \quad (4.21)$$

Unter der Annahme, dass der Brechungsindex des QW nicht viel größer ist als der des Barrierenmaterials, ergibt sich die Amplitude der Reflektivität des QW zu

$$r_{QW} \approx i(\varepsilon_{QW} - \varepsilon_b) \sin\left(\frac{1}{2}g_{QW}\right) \exp\left(i\frac{g_{QW}}{4n_b^2}\right). \quad (4.22)$$

Die verwendeten Größen ε_{QW} und ε_b entsprechen den dielektrischen Funktionen des QWs sowie der Barriere. Der Lichtweg innerhalb des QWs g_{QW} ist definiert durch

$$g_{QW} = \frac{2n_{QW}d_{QW}E}{\hbar c}. \quad (4.23)$$

Unter d_{QW} und E wird im Folgenden die Dicke der QW-Schicht bzw. die Energie der eingestrahlten Lichtwelle verstanden. Werden nur die reflektierten Lichtstrahlen an der Oberfläche und am QW betrachtet, ergibt sich die gesamte Reflektivität des einzelnen QW (engl. single quantum well, SQW) zu

$$R_{SQW} \approx R_f + 2\left(1 - R_f \operatorname{Re}\left[r_f r_{QW} \exp(ig_{over})\right]\right). \quad (4.24)$$

Hierbei bezeichnet R_f die Reflektivität, r_f die Amplitude der Reflektivität an der Oberfläche und g_{over} den doppelten Lichtweg von der Oberfläche bis zum QW. Dieser ist definiert als

$$g_{over} = \frac{2n_{GaN}d_{cap}E}{\hbar c}, \quad (4.25)$$

wobei unter d_{cap} die Schichtdicke der Deckschicht (engl. cap-layer) verstanden wird. Um die Änderung der Reflektivität des einzelnen Quantengraben zu bestimmen, ist Gleichung

4.24 in Gleichung 4.22 einzusetzen. Damit ergibt sich

$$\Delta R_{SQW} = A Re \left(i \Delta \epsilon e^{ig} \right). \quad (4.26)$$

Die Amplitude A ist definiert als

$$A = (1 - R_f) r_f \sin \left(\frac{ig_{QW}}{4n_b^2} \right) \quad (4.27)$$

und der gesamte optische Lichtweg zu

$$g = g_{over} + \frac{1}{2} g_{QW}. \quad (4.28)$$

Um das vorgestellte Modell auf einen Vielfachquantengraben mit beliebig vielen QWs (der Anzahl N) zu erweitern, ist es nötig, die Amplitudenreflektivität des QW nach Gleichung

$$r_{MQW} \approx r_f + (1 - R_f) \exp(ig_{over}) \sum_{m=0}^N r_{QW} \exp(img_{per}) \quad (4.29)$$

zu verändern.

Der Lichtweg zwischen den QWs wird hierbei als g_{per} bezeichnet. Im Folgenden wird davon ausgegangen, dass alle QWs die gleiche dielektrische Funktion besitzen. Dadurch lässt sich die in Gleichung 4.29 definierte Summe leicht bilden und führt zu

$$R_{MQW} \approx R_f + 2(1 - R_f) Re \left(r_f r_{QW} \exp(ig_{over}) \frac{1 - \exp(i(N+1)g_{per})}{1 - \exp(ig_{per})} \right), \quad (4.30)$$

woraus sich die Änderung der Reflektivität zu

$$\Delta R_{MQW} = A Re \left[i \frac{\sin[\frac{1}{2}(N+1)g_{per}]}{\sin g_{per}} \Delta \epsilon \exp(ig) \right] \quad (4.31)$$

ergibt. Der optische Weg g ist beim MQW um den Summanden $\frac{1}{2} N g_{per}$ größer im Vergleich zum SQW und entspricht damit dem optischen Weg eines Lichtstrahls von der Oberfläche bis zur Mitte des MQW-Stapels. Der Lichtweg g_{per} ist definiert als

$$g_{per} = \frac{2n_{InGa} N d_{QW} E}{\hbar c}. \quad (4.32)$$

Die entscheidenden Größen sind in Abbildung 4.13 dargestellt.

Um sicherzustellen, dass die verwendeten Vereinfachungen für die Analyse der vorliegenden Strukturen geeignet sind, wurde zusätzlich zu dieser analytischen Beschreibung der Änderung der Reflektivität das Programm WVase32 verwendet [74]. Dieses wird normalerweise für die Anpassung von Ellipsometrie-Messdaten benutzt. Das Programm beinhaltet eine auf der Transfer-Matrix-Methode beruhende numerische Berechnung der Reflektivität bei bekannter vorgegebener Schichtstruktur und den zugrundeliegenden vorgegebenen di-

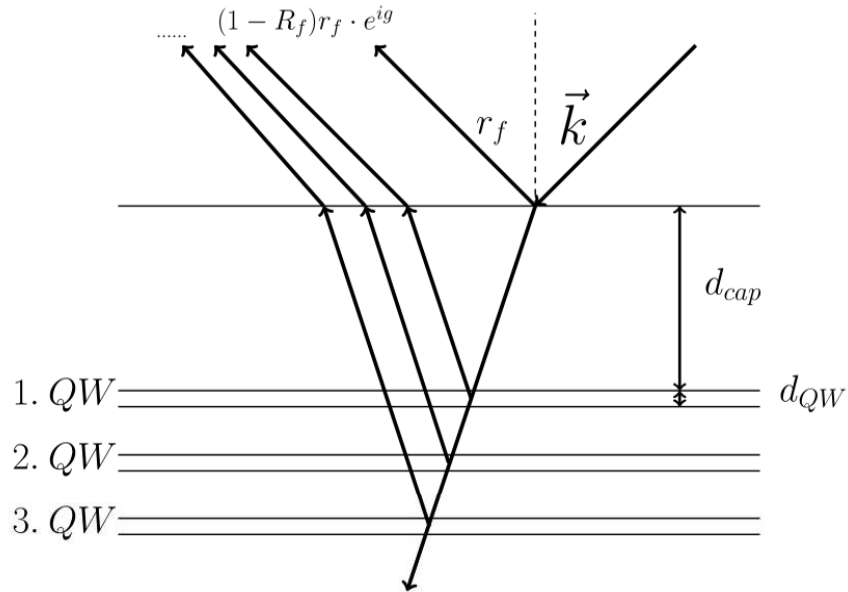


Abb. 4.13: Skizze zur Veranschaulichung der für das Modell nach Shields *et al.* [10] benötigten Größen.

elektrischen Funktionen. Hierbei werden im Gegensatz zu der vorgestellten Methode auch Mehrfachreflexionen exakt berücksichtigt. Unter Mehrfachreflexionen wird die weitere Reflexion bereits am QW reflektierter Lichtstrahlen verstanden. Ein Vergleich der beiden unterschiedlichen Bestimmungsmethoden ist in Abbildung 4.14 dargestellt.

Hierfür wurde ein Testfall mit zwei energetisch leicht verschobenen dielektrischen Funktionen konstruiert und die Änderung der Reflektivität berechnet. Die mit dem Interferenzmodell und dem Programm WVase32 ermittelten Reflektivitätsunterschiede zeigen eine außerordentlich gute Übereinstimmung. Diese lässt sich noch verbessern, indem die oberste GaN-Schichtdicke im Vergleich zum im Programm WVase32 vorgegebenen Wert um ca. 5 % geringfügig verändert wird. Bei der Auswertung der ER-Spektren wird die angesprochene Korrektur berücksichtigt. Die Ursache für diese Korrektur könnte in den bisher vernachlässigten Mehrfachreflexionen liegen und ihre Verwendung ermöglicht eine noch realitätsnähere Modellierung der gemessenen ER-Spektren.

Das in der Literatur zur Beschreibung von ER-Spektren häufig verwendete Modell von Aspnes wird im Folgenden kurz vorgestellt. Bei diesem Modell wird davon ausgegangen, dass es sich um einen exzitonischen Übergang handelt. Die elektrischen Feldstärken sollten niedriger als die Ionisationsfeldstärke sein, um den exzitonischen Charakter des Übergangs zu erhalten. Für die Beschreibung der Auswirkung eines Exzitons auf eine DF wird eine Lorentzfunktion angenommen. Diese lässt sich mit Gleichung 4.33

$$\varepsilon_{FX} = \frac{A}{E - E_1 + i\Gamma} \quad (4.33)$$

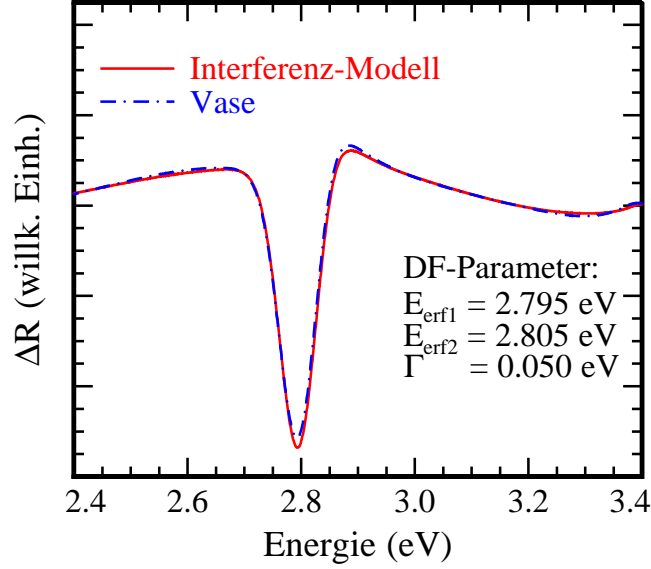


Abb. 4.14: Vergleich der simulierten Reflektivitätsänderung nach der angesprochenen Vorgehensweise aus [9, 10] und unter Verwendung des Programms WVase32. Die zugrundeliegenden dielektrischen Funktionen bestehen aus einer im Imaginärteil angenommenen verbreiterten Fehlerfunktion (siehe Gleichung 4.19). Der zugehörige Realteil wurde aus der Kramers-Kronig-Relation ermittelt.

beschreiben. Hierbei entspricht A der Amplitude, E_1 der Übergangsenergie des Exzitons und Γ der Verbreiterung. Um nun die für die ER notwendige Änderung der dielektrischen Funktion zu beschreiben, wird allgemein die Änderung der DF unter Feldvariation zu

$$\Delta\varepsilon_{FX} = \left(\frac{\delta\varepsilon_{FX}}{\delta I} \frac{\delta I}{\delta F} + \frac{\delta\varepsilon_{FX}}{\delta E_1} \frac{\delta E_1}{\delta F} + \frac{\delta\varepsilon_{FX}}{\Gamma} \frac{\delta \Gamma}{\delta F} \right) \Delta F \quad (4.34)$$

verwendet. Im Folgenden wird davon ausgegangen, dass die dielektrische Funktion nur durch die Veränderung der Übergangsenergie durch das elektrische Feld beeinflusst wird und die Abhängigkeit der Amplitude bzw. der Verbreiterung vernachlässigbar klein ist. Diese Veränderung der Übergangsenergie, bei Variation des elektrischen Feldes, entsteht durch die schon für den Spezialfall einer zweidimensionalen Struktur angesprochenen Starkverschiebung (siehe Kapitel 2.5). Damit ergibt sich die Änderung der dielektrischen Funktion zu

$$\Delta\varepsilon_{FX} = \frac{A}{(E - E_1 + i\Gamma)^2}. \quad (4.35)$$

Diese bildet die Grundlage zur Beschreibung von ER-Messsignalen, die sich durch [70]

$$\frac{\Delta R}{R} = \operatorname{Re} \left(\frac{C e^{i\phi}}{(E - E_1 + i\Gamma)^3} \right). \quad (4.36)$$

abbilden lassen. Der Parameter C entspricht dabei der Amplitude und ϕ der Phase des Signals. Für die Beschreibung von Band-Band-Übergängen kann die Gleichung 4.36 ebenfalls verwendet werden. Hierbei ist je nach Dimensionalität des kritischen Punktes der Bandstruktur ein anderer Exponent anzunehmen. Dieser beträgt 2.5, 3 bzw. 3.5 für einen drei, zwei bzw. eindimensionalen kritischen Punkt.

Das Modell von Aspnes wurde ursprünglich entwickelt, um das ER/PR-Signal von Volumenmaterial zu beschreiben. In der Literatur wird das Modell aber häufig für die Beschreibung von QWs verwendet. In Abbildung 4.15 werden das Modell von Aspnes und das Modell nach Shields, Klipstein und Apsley (im folgenden als Interferenzmodell bezeichnet) am Beispiel der Anpassung eines ER Spektrum der Probe B bei Raumtemperatur und einer extern angelegten Spannung von +1 V verglichen.

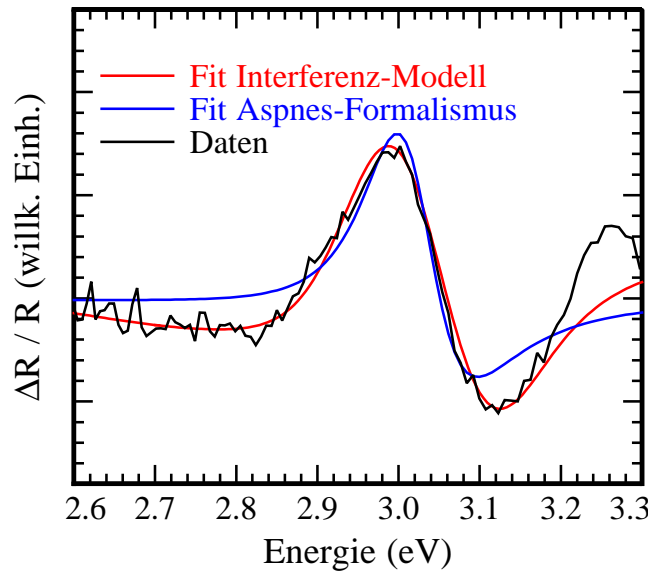


Abb. 4.15: Anpassung eines ER-Spektrums der Probe B bei Raumtemperatur und einer externen Spannung von +1 V. Zwei verschiedene Anpassungen nach Aspnes [70] und nach der Methode von Shields, Klipstein und Apsley [9, 10] sind zum Vergleich dargestellt.

Hierbei fällt auf, dass die Beschreibung durch das zuvor vorgestellte Interferenzmodell deutlich besser geeignet ist, um das vorliegende Spektrum zu beschreiben. Der entscheidende Unterschied des verwendeten Modells zur Beschreibung nach Aspnes ist die Berücksichtigung von optischen Interferenzeffekten. Außerdem sind die elektrischen Felder innerhalb der Probe in den seltensten Fällen kleiner als die Ionisationsfeldstärke. Die Eignung des Interferenzmodells wurde für weitere Werte der externen Spannung geprüft und bestätigte auch für diese eine bessere Beschreibung des Messsignals. Somit wird das Interferenzmodell

für die Auswertung der in Abschnitt 4.5 gemessenen ER-Spektren verwendet.

4.5 Auswertung der ER-Spektren

Im folgenden Abschnitt wird detailliert auf die Auswertung der durch die absorptionskorrelierte Messmethode der Elektreflexion ermittelten Spektren eingegangen. Diese Methode wird in der Literatur bei der Analyse von semipolaren InGaN/GaN QW-Proben aufgrund des hohen Aufwands zur Analyse der Spektren nur vereinzelt verwendet, obwohl Sie einen Zugriff auf ansonsten schwer zugängliche Parameter bietet [75, 76, 77]. Dazu zählen beispielsweise die Übergangsenergien der InGaN-QWs oder die elektrischen Feldstärken in unterschiedlichen Gebieten der Proben.

4.5.1 Semipolare Probe A

Bei der im Folgenden untersuchten Probe handelt es sich um die Probe A ($20\bar{2}\bar{1}$) mit drei $\text{In}_x\text{GaN}_{1-x}/\text{GaN}$ -QWs und mit einem Indiumgehalt von $x = 18.2\%$. Für weitere Informationen über die Schichtstruktur sei auf Kapitel 3.2 verwiesen. In Abbildung 4.16 a) ist ein ER-Spektrum der Probe A für $E \parallel c'$ und $E \perp c$ bei 295 K dargestellt.

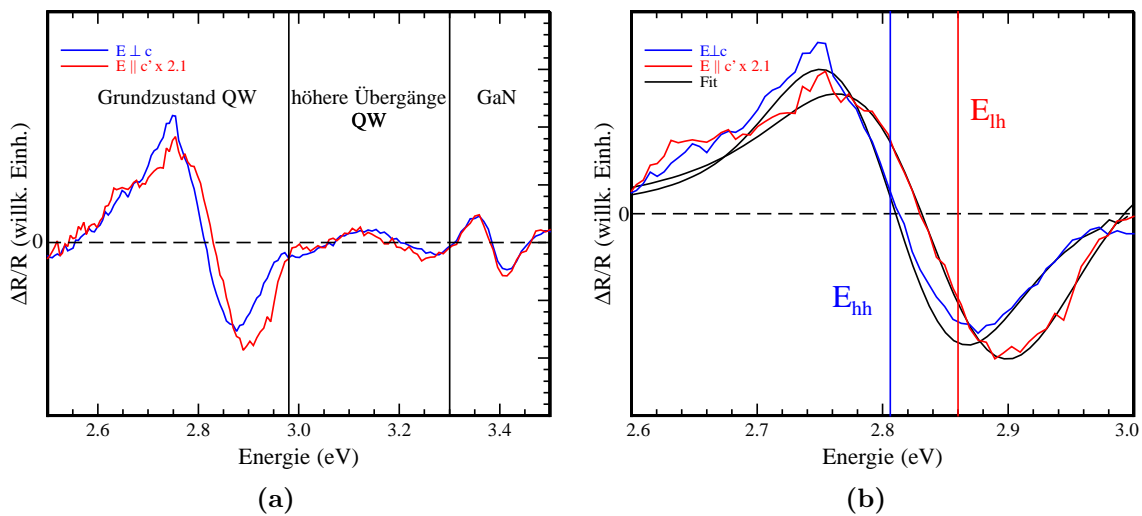


Abb. 4.16: a) ER-Spektren der Probe A bei einer angelegten Spannung von 2.0 V und einer Polarisationsrichtung von $E \perp c$ (blau) und $E \parallel c'$ (rot) bei einer Temperatur von 295 K. Die energetischen Bereiche in denen sich die Signale des QWs und des GaN befinden sind über schwarze durchgezogene Linien getrennt. b) Vergrößerter Ausschnitt des Energiebereichs in dem sich das Signal des Grundzustandes des QWs befindet. Die zugehörige Anpassung nach der in Kapitel 4.4.4 dargestellten Methode ist für beide Polarisationsrichtungen durch eine schwarze Linie angedeutet. Die Nulllinie des Signals ist als gestrichelte Linie in beiden Abbildungen eingezeichnet.

Dieses wurden bei einer angelegten Spannung von 2.0 V und einer Modulationsspannung von 0.4 V gemessen. Die gemessenen Signale lassen sich dem jeweiligen Grundzustand des

QWs, höher angeregten Zuständen des QWs und den GaN-Exzitonen zuordnen. Betrachtet man den Grundzustand des QWs, so weist die Messung mit Polarisation $E \perp c$ im Vergleich zu $E \parallel c'$ eine Verschiebung des oszillierenden Signals zu niedrigerer Energie auf. Dies ist eine direkte Folge der optischen Anisotropie der Probe. Deren Ursache liegt einerseits in der reduzierten Kristallsymmetrie der semipolaren Probe und andererseits in der vorhandenen komplexen anisotropen Verzerrung der InGaN-Schicht. Durch die Anpassung der Spektren mit dem im Abschnitt 4.4.4 vorgestellten Modell, wurde die Übergangsenergie des Grundzustandes des QWs ermittelt. Diese ist in Abbildung 4.16 (b) zu sehen. Die Übergangsenergien konnten zu 2.806 eV ($E \parallel c'$) und 2.860 eV ($E \perp c$) bestimmt werden. Nachfolgend wurden vergleichbare Messungen im Spannungsbereich zwischen -7.8 V bis $+2$ V im Abstand von 0.2 V durchgeführt. Die gemessenen Spektren sind in der farbkodierten ER-Karte in Abbildung 4.17 dargestellt.

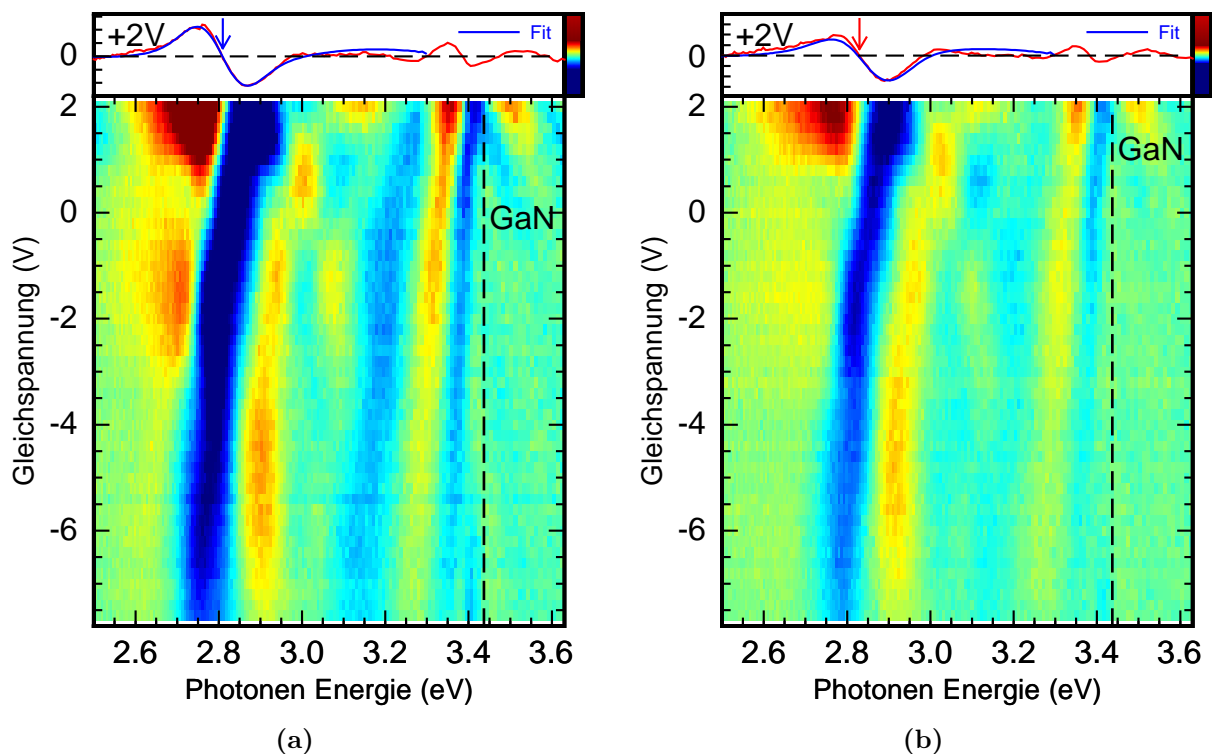


Abb. 4.17: ER-Spektren der Probe A (18.2 % Indium) bei einer Gleichspannung von 2 V und zwei verschiedenen Polarisationsrichtungen (a) $E \parallel c'$ und (b) $E \perp c$. Die Spektren wurden im Bereich um das QW-Signal bei ≈ 2.8 eV mit dem Modell aus 4.4.4 angepasst. Die daraus bestimmte Übergangsenergie ist jeweils durch einen Pfeil markiert. Unterhalb der Spektren befinden sich farbkodierte ER-Karten in der jeweiligen Polarisationsrichtungen. Die Bandkante des GaN ist durch eine gestrichelte Linie angedeutet.

Im Bereich zwischen 2.6 eV und 3 eV verschiebt der zum QW-Übergang gehörende Oszillator mit steigender positiver Gleichspannung zu höheren Energien. Dies ist eine unmittelbare Folge des Stark-Effekts und entspricht einer Verringerung der elektrischen Feldstärke im QW. Eine Übersicht der Übergangsenergie des QWs ist in Abbildung 4.18 gezeigt. Betrachte

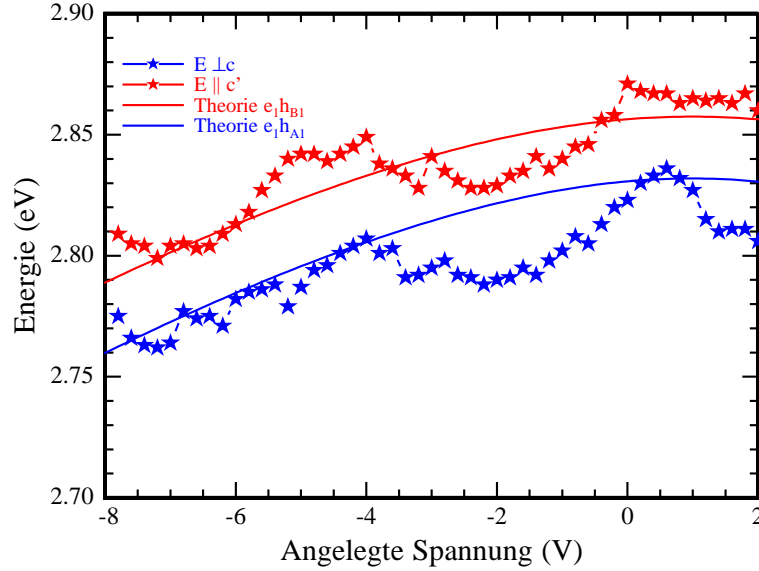


Abb. 4.18: Abhängigkeit der Übergangsenergien der Grundzustände des QWs von der angelegten Gleichspannung für die Polarisationsrichtungen $E \parallel c$ und $E \perp c$. Die durchgezogenen Linien stellen die Lösung der effektiven Massengleichung dar.

tet man die Übergangsenergien der beiden Polarisationsrichtungen im Spannungsverlauf, so zeigt sich ein vergleichbares Verhalten. Dies legt eine nahezu identische effektive Masse der beiden Valenzbänder nahe.

Die höchste Übergangsenergie im Spannungsverlauf kann aufgrund des QCSE als Flachbandfall im QW interpretiert werden und befindet sich bei $U_{FB} \approx +1$ V. Die Spannung, bei der der Flachbandfall eintritt, ist direkt verknüpft mit dem Polarisationsfeld im QW und kann genutzt werden, um dieses zu ermitteln. Zur Bestimmung des Polarisationsfeldes im QW wurde Gleichung 3.1 verwendet. Die Abhängigkeit des elektrischen Feldes im QW vom angenommenen Polarisationsfeld ist in Abbildung 4.19 für Polarisationsfelder von $100 \frac{\text{kV}}{\text{cm}}$ bis $800 \frac{\text{kV}}{\text{cm}}$ exemplarisch dargestellt. Je nach Polarisationsfeld ergibt sich über dem Schnittpunkt mit der Nulllinie des elektrischen Feldes die zu erwartende Flachbandspannung. Bei kontinuierlicher Veränderung des Polarisationsfeldes wird der experimentell bestimmte Wert der Flachbandspannung $U_{FB} = +1$ V bei einem Polarisationsfeld von $-458 \frac{\text{kV}}{\text{cm}}$ erreicht.

Vergleichbare Untersuchungen zur Bestimmung des Polarisationsfeldes im QW wurden z.B. von Lai *et al.* [78] an c -orientierten InGaN/GaN-MQW mit Hilfe der Methode der Transmissionsspektroskopie durchgeführt oder auch von Hsu *et al.* [79] an InGaN/AlInGaN-MQW unter Verwendung der ER. Bei den semipolaren Proben ist die Bestimmung des Polarisationsfeldes bisher nur bei einigen ausgewählten Proben und Orientierungen durchgeführt wurden [80, 75, 76, 77]. Gründe hierfür sind z.B. die eingeschränkte Probenverfügbarkeit und die Qualität der Proben. Auf der anderen Seite sind die elektrischen Felder in semipolaren Proben im Vergleich zu konventionellen c -orientierten Proben sehr niedrig und die

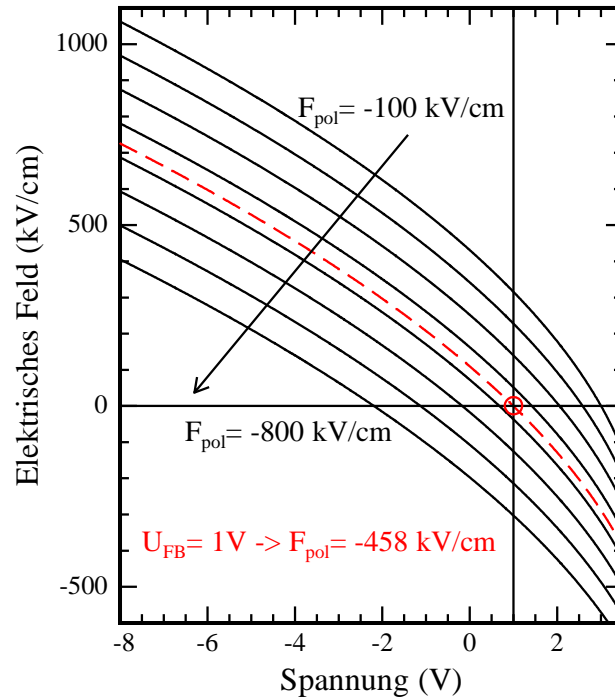


Abb. 4.19: Berechnete elektrische Felder im QW in Abhängigkeit vom angenommenen Polarisationsfeld. Die unter Verwendung der ER bestimmte Flachbandspannung des QWs ist Rot eingezeichnet und der zugehörige Feldstärkenverlauf gestrichelt dargestellt.

Messung dementsprechend schwierig. Für die hier vorgestellte Probe mit der Orientierung $(20\bar{2}1)$ konnten in der Literatur keine veröffentlichten Werte für das experimentell bestimmte Polarisationsfeld gefunden werden. Allerdings ist es durch Gleichung 2.25 in Verbindung mit der spontanen und piezoelektrischen Polarisation möglich, das Polarisationsfeld des QWs bei gegebener Indiumkonzentration zu berechnen. Die dafür nötigen piezoelektrischen Parameter für GaN weisen, je nach verwendeter Literatur, zum Teil deutliche Unterschiede zueinander auf. Ein Überblick über einige Parametersätze und deren Bestimmungsmethode ist in Tabelle 4 gegeben.

Der Grund für die angesprochenen Unterschiede liegt zum Beispiel darin, dass die klassischen Methoden zur Bestimmung der piezoelektrischen Koeffizienten wie z.B. die Plattendicken-Resonanzmethode (engl. plate-thickness resonance method) und die Puls-Echo-Methode (engl. pulse-echo method) [81, 82, 83, 84, 85] auf GaN nicht bzw. nur schwer anwendbar sind. Diese benötigen viele verschiedene unabhängige Messungen in unterschiedlichen Orientierungen der Probe, um einen vollständigen Satz von Piezokoeffizienten zu bestimmen. Um trotzdem die piezoelektrischen Koeffizienten von GaN zu bestimmen, wird aktuell mit der Resonanten Ultraschallspektroskopie (RUS) eine weniger aufwändige Methode verwendet. Bei dieser werden elastische Wellen auf die Probe übertragen und frequenzabhängig deren Resonanzen gemessen. Vorteilhaft bei dieser Messmethode ist, dass die Anzahl der vermessenen Resonanzen größer ist, als die zu bestimmende Anzahl der

#	$e_{31}(\frac{C}{m^2})$	$e_{33}(\frac{C}{m^2})$	$e_{15}(\frac{C}{m^2})$	Bestimmungsmethode
1	-0.220	0.430	-0.220	Deformation [86]
2	-0.320	0.630	-0.320	Theorie [87]
3	-0.490	0.730	-0.40	Theorie [88]
4	-0.504	0.821	0.169	Theorie [32]
5	-0.14	1.15	-0.22	RUS [81]
6	0.17	0.29	0.10	RUS [25]
7	-0.45	0.83	-0.38	Theorie [89]
8	-0.35	1.27	-0.30	Interferometrie [90]
9	-0.58	1.55	-0.48	RUS [91]
10	-0.05	0.46	-0.10	PR [92]

Tab. 4: Ausgewählte verschiedene Parametersätze für die piezoelektrischen Tensorelemente von GaN. Die piezoelektrischen Tensorelemente aus [32] wurden aus den Komponenten des piezoelektrischen Tensors unter Verwendung der elastischen Konstanten aus [21] ermittelt.

Koeffizienten. Die zusätzlichen Resonanzen werden zur Verbesserung der Genauigkeit der Piezokoeffizienten verwendet. Nachteilig ist, dass die Piezokoeffizienten bei dieser Messmethode nicht unabhängig von den elastischen Konstanten messbar sind. Außerdem sind die Beiträge der Resonanzfrequenzen zu den Piezokoeffizienten mehrere Größenordnungen kleiner als der Einfluss weiterer Größen, wie z.B. der Schichtdicke und der Massendichte der Probe [81, 93, 94]. Diese Probleme führen in der Literatur unter anderem zu den angesprochenen Unterschieden zwischen den verschiedenen Parametersätzen.

Für eine Berechnung der elektrischen Feldstärke im QW ist sowohl die Wahl der elastischen Konstanten als auch der piezoelektrischen Tensorelemente von Bedeutung. Für die Wahl der elastischen Konstanten von GaN standen die in Tabelle 1 angegebenen Parametersätze zur Verfügung. Für diese Parametersätze wurde, bei konstant gehaltenen piezoelektrischen Tensorelementen (nach Romanov *et al.* [88]), die elektrische Feldstärke in Abhängigkeit vom Winkel θ berechnet. Dies ist in Abbildung 4.20 dargestellt. Hierbei wurde der Indiumgehalt auf $x_{In} = 0.18$ festgelegt. Die Wahl des Parametersatzes der elastischen Konstanten spielt offensichtlich eine untergeordnete Rolle für das elektrische Feld im QW. Je nach Parametersatz ist die Variation des elektrischen Feldes z.B. bei einem Winkel von $\theta = 0^\circ$ höchstens 9 %.

Für die weitere Betrachtung werden die elastischen Konstanten nach Yamaguchi *et al.* [22] aus Tabelle 1 verwendet. Nachdem der Einfluss verschiedener Parametersätze der elastischen Konstanten von GaN auf das elektrische Feld untersucht wurde, wird dies ebenfalls bezüglich der verschiedenen Sätze von piezoelektrischen Tensorelementen (siehe Tabelle 4) durchgeführt. Das Verhalten der elektrischen Feldstärke (siehe Abbildung 4.20) lässt sich

in drei verschiedene Bereiche einteilen. Der erste Bereich liegt zwischen $\theta = 0$ und $\theta \approx 40^\circ$. In diesem sinkt die elektrische Feldstärke mit steigendem Winkel und erreicht bei $\theta \approx 40^\circ$ eine Feldstärke von null. Der genaue Winkel, bei dem die Feldstärke null ist, ist für alle Parametersätze leicht unterschiedlich. Die Ursache ist ein ansteigender Beitrag von ε_{xz} in diesem Winkelbereich. Der zweite Bereich liegt zwischen $\theta \approx 40^\circ$ und $\theta \approx 70^\circ$. In diesem hat sich das Polarisationsfeld im Vergleich zum c-plane Fall umgedreht und erreicht bei $\theta \approx 70^\circ$ ein Minimum, bevor es im dritten Bereich wieder auf 0 bei $\theta = 90^\circ$ abfällt. Der Winkelbereich oberhalb von $\theta = 90^\circ$ ergibt sich aus einer Punktspiegelung des Graphen an $\theta = 90^\circ$.

Die schon zuvor angesprochenen Unterschiede zwischen den unterschiedlichen Parametersätzen der piezoelektrischen Tensorelemente führen zu erheblichen Unterschieden in den elektrischen Feldern. Betrachtet man die elektrische Feldstärke am Beispiel von Proben mit einer c-Richtung ($\theta = 0^\circ$), so variieren diese für das gewählte Beispiel zwischen 990 kV/cm und 4110 kV/cm. Das in diesem Kapitel bestimmte Polarisationsfeld von -458 kV/cm, bei einem Winkel von $\theta = 104.91^\circ$ (2021), stimmt am besten mit der durch den Parametersatz von Bykhovski *et al.* [86] ermittelten elektrischen Feldstärke überein. Für eine weiterführende Einschätzung der verschiedenen Parametersätze wird im Folgenden auf experimentelle Arbeiten Bezug genommen, in denen ebenfalls Polarisationsfelder bestimmt wurden. Diese sind in einer Übersicht in Tabelle 5 zusammengefasst. Hierbei fällt auf, dass in den experimentellen Arbeiten starke Unterschiede zwischen den elektrischen Feldstärken bei sehr ähnlichem Indiumgehalt ermittelt wurden. Dies gilt vor allem für Proben mit einem Indiumgehalt von 15 %, für die in der Literatur häufig die Polarisationsfelder ermittelt werden konnten. Um eine Vorstellung über den Beitrag der verschiedenen piezoelektrischen Tensorelemente zum Piezofeld zu bekommen, wurden die Koeffizienten vor den entsprechenden Beiträgen e_{31} , e_{33} und e_{15} aus Gleichung 4.37 parametrisiert und in Abhängigkeit von θ in Abbildung 4.21 dargestellt. Die entsprechenden Beiträge finden sich in Gleichung 4.37 und werden als K_{31} , K_{33} und K_{15} bezeichnet.

$$P_{pz} = K_{31}e_{31} + K_{33}e_{33} + K_{15}e_{15} \quad (4.37)$$

Die verschiedenen Beiträge zum Piezofeld sind in Abbildung 4.21 dargestellt. Hierbei fällt auf, dass die Bestimmung der e_{31} Komponente besonders signifikant durch die Bestimmung des elektrischen Feldes einer c-orientierten Probe möglich ist. Für das piezoelektrische Tensorelement e_{15} ist hingegen eine Probenorientierung mit einem semipolaren Winkel im Bereich zwischen $\theta = 60^\circ$ bis $\theta = 80^\circ$ (bzw. 100° bis 120°) von Vorteil. Es liegt daher nahe, dass e_{15} einen besonders großen Einfluss auf das in dieser Arbeit bestimmte elektrische Feld hat. Der Anteil von e_{33} ist im Vergleich zu den beiden anderen Komponenten über dem kompletten Winkelbereich hinweg klein und erreicht den maximalen relativen Beitrag

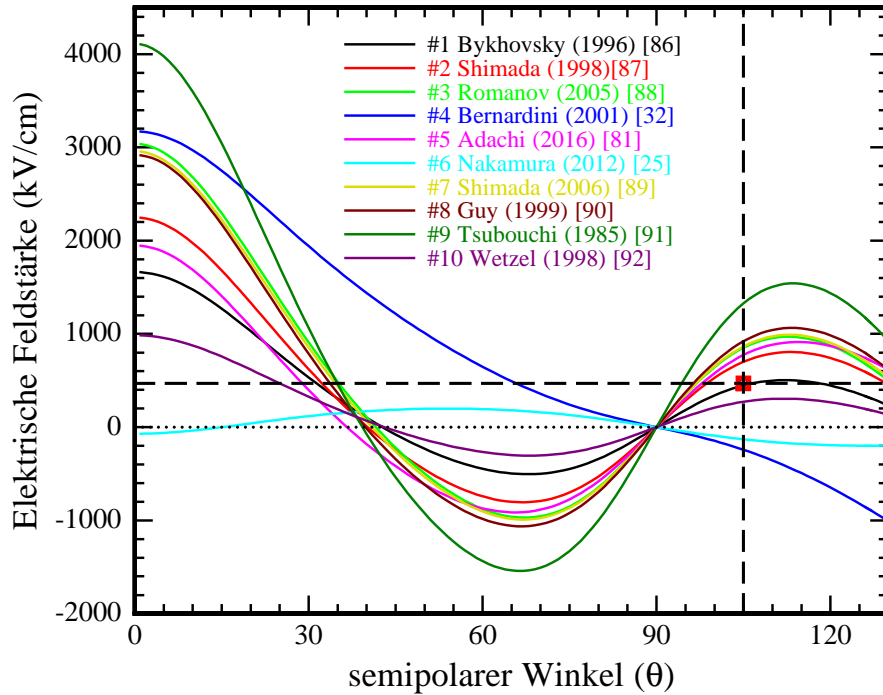


Abb. 4.20: Theoretische Berechnung des elektrischen Feldes im QW in Abhängigkeit vom verwendeten Parametersatz für die piezoelektrischen Koeffizienten, bei einem festen Indiumgehalt von 18 %. Die experimentell ermittelte Feldstärke im QW der Probe A ist rot markiert und der zugehörige Abszissen- bzw. Ordinatenwert durch eine gestrichelte Linie hervorgehoben.

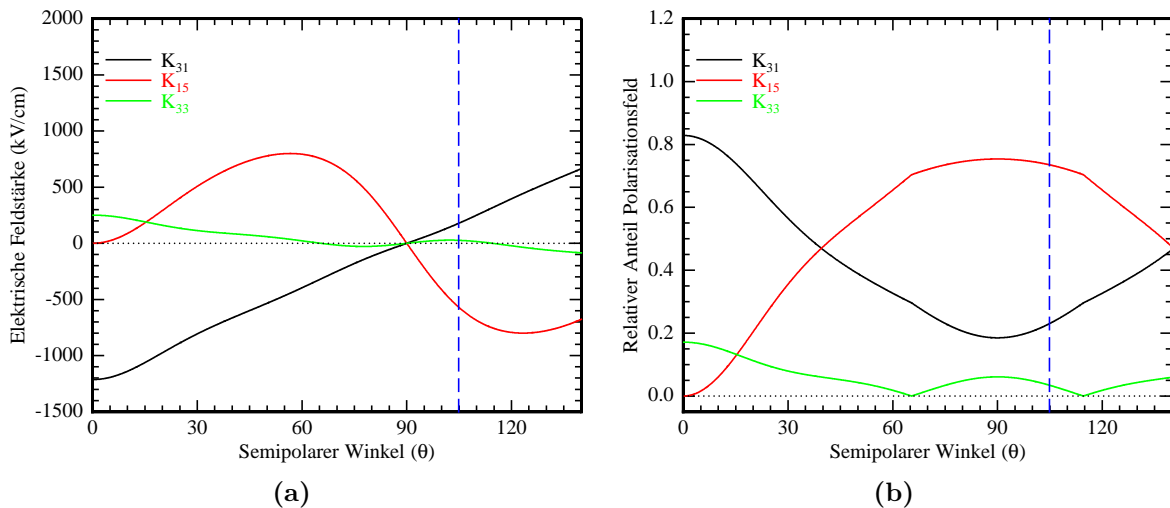


Abb. 4.21: Absolute (a) und relative (b) Beiträge der Koeffizienten K aus Gleichung 4.37 zum elektrischen Feld eines $\text{In}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{N}/\text{GaN}$ -QWs in Abhängigkeit vom semipolaren Winkel θ . Die gestrichelte Linie markiert die Orientierung der in dieser Arbeit untersuchten semipolaren Probe bei $\theta = 104.91^\circ$.

zum Piezofeld bei einer c-orientierten Probe zu lediglich 17 %. Im Folgenden werden die experimentellen Ergebnisse für das Polarisationsfeld (siehe Tabelle 5) genutzt, um deren Übereinstimmung mit den in der Tabelle 4 aufgelisteten Sätzen von Piezokoeffizienten zu ermitteln. Hierfür wird das Modell von Romanov verwendet und ein Fit an experimentellen Daten aus der Literatur aus Tabelle 5 durchgeführt. Die Fitparameter sind die Piezokoeffizienten e_{31} und e_{15} . Der Piezokoeffizient e_{33} kann aufgrund des geringen Beitrags zum Piezofeld (siehe Abbildung 4.21) und der zu geringen Datenlage nicht separat vom Koeffizienten e_{31} bestimmt werden. Um trotzdem Informationen über den Verlauf von e_{31} und e_{15} zu gewinnen, wurde e_{33} kontinuierlich für eine Schar von Fits zwischen 0 bis 2 C/m^2 variiert. Das Ergebnis ist in Abbildung 4.22 dargestellt. Die experimentellen Polarisationsfelder werden für den Fit so gewichtet, dass jeder Autor, unabhängig von der Anzahl seiner untersuchten Proben, den gleichen Einfluss auf den Fit aufweist. Sowohl e_{31} als auch e_{15} vergrößern sich mit steigendem e_{33} .

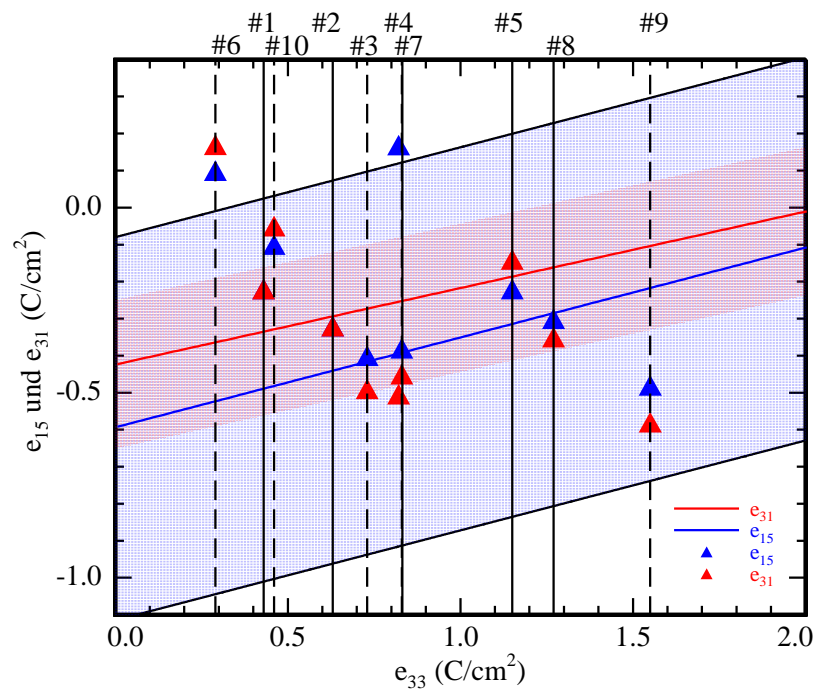


Abb. 4.22: Durch Anpassung an die in Tabelle 5 aufgelisteten experimentellen Polarisationsfelder ermittelte piezoelektrische Tensorelemente e_{15} (blaue Linie) und e_{13} (rote Linie) in Abhängigkeit von dem jeweils fest angenommenen piezoelektrischen Tensorelement e_{33} . Die Dreiecke entsprechen den in Tabelle 4 angegebenen Tensorelementen e_{31} (blaue Dreiecke) und e_{15} (rote Dreiecke) aus der Literatur. Die Vertrauensbereiche für ein 95 prozentiges Vertrauensniveau wurden ermittelt und sind für die beiden piezoelektrischen Koeffizienten als markierter Bereich veranschaulicht. Für eine bessere Zuordnung der Dreiecke zu der zugehörigen Quelle wurde der zur Literaturstelle gehörende Wert für e_{33} durch eine vertikale durchgezogene bzw. gestrichelte schwarze Linie markiert. Parametersätze, welche mit durchgezogener/gestrichelter Linie hervorgehoben sind, befinden sich innerhalb/außerhalb des eingezeichneten Vertrauensbereichs.

Orientierung	θ (Grad)	[In]	Polarisationsfeld (kV/cm)	Methode
(0001)	0	0.21	1340	ER [77]
(0001)	0	0.15	1400	ER [95]
(0001)	0	0.15	920	ER [95]
(0001)	0	0.08	500	Kapazitäts-Messung [96]
(0001)	0	0.15	810	Kapazitäts-Messung [96]
(0001)	0	0.15	830	ER [97]
(0001)	0	0.15	700	ER [97]
(0001)	0	0.16	2600	Photolumineszenz [41]
(0001)	0	0.07	1100	Elektrolumineszenz [98]
(0001)	0	0.18	2200	Elektrolumineszenz [98]
(0001)	0	0.18	2200	Elektroholographie [99]
(0001)	0	0.074	1051	Elektroabsorption [100]
(0001)	0	0.076	1140	Elektroabsorption [100]
(0001)	0	0.077	1110	Elektroabsorption [100]
(0001)	0	0.078	1110	Elektroabsorption [100]
(0001)	0	0.081	1261	Elektroabsorption [100]
(0001)	0	0.082	1230	Elektroabsorption [100]
(0001)	0	0.086	1290	Elektroabsorption [100]
(0001)	0	0.088	1340	Elektroabsorption [100]
(0001)	0	0.089	1370	Elektroabsorption [100]
(0001)	0	0.091	1400	Elektroabsorption [100]
(0001)	0	0.091	1400	Elektroabsorption [100]
(0001)	0	0.15	2100	Photolumineszenz [101]
(0001)	0	0.25	1400	Photolumineszenz [102]
(0001)	0	0.16	1200	Photolumineszenz [103]
(11 $\bar{2}2$)	58.41	0.12	-575	ER [104]
(10 $\bar{1}1$)	61.96	0.15	-1000	ER [77]
(20 $\bar{2}\bar{1}$)	104.91	0.182	458	Diese Arbeit
(10 $\bar{1}\bar{1}$)	118.04	0.15	840	ER [104]
(11 $\bar{2}\bar{2}$)	121.59	0.12	575	ER [75]
(000 $\bar{1}$)	180	0.17	-1980	ER [77]

Tab. 5: Experimentell ermittelte Polarisationsfeldstärken für unterschiedlich orientierte InGaN/GaN-QW Strukturen. Ferner sind der zugehörige semipolare Winkel Θ sowie der Indiumgehalt der aktiven Schicht und die zur Ermittlung verwendete Untersuchungsmethode dargestellt. Hierbei werden die Vorzeichen des angegebenen Polarisationsfeldes so gewählt, dass diese mit der Beschreibung nach dem Parametersatz von Romanov *et al.* in Abbildung 4.20 übereinstimmen.

Die Vertrauensbereiche (Vertrauensniveau von 95 %) für die Bestimmung der Piezokoeffizienten e_{15} und e_{31} sind durch die blaue bzw. rote schraffierte Fläche angedeutet. Für den Piezokoeffizienten e_{15} ist der Vertrauensbereich um 330 % größer als für den Piezokoeffizienten e_{31} . Dies liegt daran, dass in der Literatur hauptsächlich Polarisationsfeldmessungen an c -orientierten Proben durchgeführt wurden, welche für eine Bestimmung von e_{31} geeignet sind, aber nicht zur Bestimmung der e_{15} Komponente herangezogen werden können. Betrachtet man nun die verschiedenen Datensätze der Piezokonstanten, so zeigt sich, dass die Parametersätze von Bykhovski *et al.* [86], Shimada *et al.* [87, 89], Adachi *et al.* [81] und Guy *et al.* [90] innerhalb dieses Vertrauensniveaus liegen. Der Parametersatz von Shimada *et al.* beschreibt die Gesamtheit der aus der Literatur entnommenen Polarisationsfelder am genauesten, wobei der Parametersatz von Bykhovski *et al.* die beste Beschreibung des elektrischen Feldes der hier untersuchten Probe ermöglicht.

4.5.2 Elektrisches Feld der GaN-Barrieren

Für das Verständnis der hier betrachteten Messungen hat auch die Feldstärke in den GaN-Barrieren eine große Bedeutung. Herfür werden Spektren verwendet, die bei einer Temperatur von 80 K gemessen wurden (siehe Abbildung 4.23).

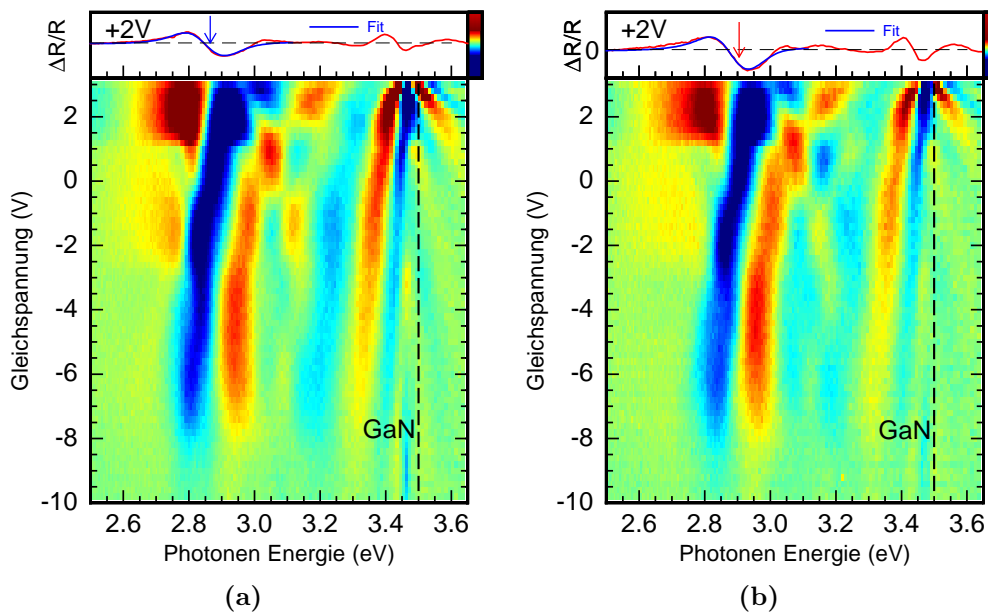


Abb. 4.23: ER-Spektren der Probe A bei einer Gleichspannung von 2 V und zwei verschiedenen Polarisationsrichtungen (a) $E \perp c$ und (b) $E \parallel c'$ sowie einer konstanten Temperatur von 80 K. Die Spektren wurden im Bereich um das QW-Signal bei ≈ 2.8 eV mit Gleichung 4.31 angepasst. Die daraus bestimmte Übergangsenergie ist durch einen Pfeil markiert. Unterhalb der Spektren befinden sich farbkodierte ER-Karten in der jeweiligen Polarisationsrichtung. Die Übergangsenergie für die Bandkante des GaN ist durch eine gestrichelte Linie markiert.

Die polarisationsabhängigen Übergangsenergien sind in Abbildung 4.24 dargestellt.

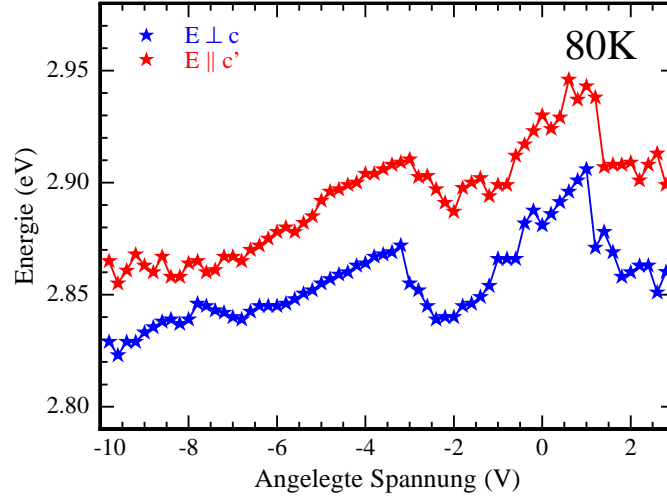


Abb. 4.24: Charakteristische Energie des Grundzustandes der QWs der Probe A in Abhängigkeit von der angelegten Spannung für die Polarisationsrichtungen $E \perp c$ und $E \parallel c'$.

Die Übergangsenergien zeigen im Vergleich zu den Messungen bei Raumtemperatur einen ähnlichen spannungsabhängigen Verlauf mit einer energetischen Verschiebung von ≈ 50 meV. Um die elektrische Feldstärke in den GaN-Barrieren zu ermitteln, werden nachfolgend die Spektren aus der Abbildung 4.23 im Spannungsbereich zwischen 1.6 V und 3 V untersucht. Möglich wird dies durch die Analyse der schon in Abschnitt 4.4.2 angesprochenen Franz-Keldysh-Oszillationen. Für die Bestimmung der elektrischen Feldstärke wird die Näherung nach Gleichung 4.18 verwendet, um die Spektren oberhalb der GaN-Bandkante ($E_g = 3.500$ eV) bei einer Temperatur von 80 K [105]) anzupassen. Die Energie der GaN-Bandkante wurde hierbei aus der energetischen Lage des freien A-Exzitons des GaN zuzüglich einer Bindungsenergie von 25 meV [106] abgeschätzt. Beispielhaft ist die Anpassung des Spektrums bei $U = 3.0$ V in Abbildung 4.25 dargestellt.

Aus dieser Anpassung lässt sich die elektrooptische Energie ermitteln, die sich nach Umstellen von Gleichung 4.11 in die elektrische Feldstärke überführen lässt. Die elektrische Feldstärke ist in Abbildung 4.26 in Abhängigkeit von der angelegten Spannung dargestellt. Die experimentell bestimmten elektrischen Felder zeigen als Funktion der Spannung eine gute Übereinstimmung mit dem modellierten Verlauf. An dieser Stelle sei jedoch darauf hingewiesen, dass sowohl die angenommene Donator- als auch die Akzeptorkonzentration einen starken Einfluss auf den Wert des berechneten elektrischen Feldes haben. Eine Vergrößerung von Akzeptor- bzw. Donatorkonzentration führt nach Gleichung 3.2 zu einer verkleinerten Raumladungszone und damit nach Gleichung 3.1 zu einem höheren elektrischen Feld in der Barriere. Bei der Variation der Akzeptor- und Donatorkonzentration würde sich außerdem auch das in Abschnitt 4.5 ermittelte Polarisationsfeld ändern. Dieser Einfluss ist beispielhaft für einige ausgewählte Variationen von Donator- bzw. Akzeptorkonzentration veranschaulicht. Eine angenommene geänderte Donator- und Akzeptorkonzentration führt

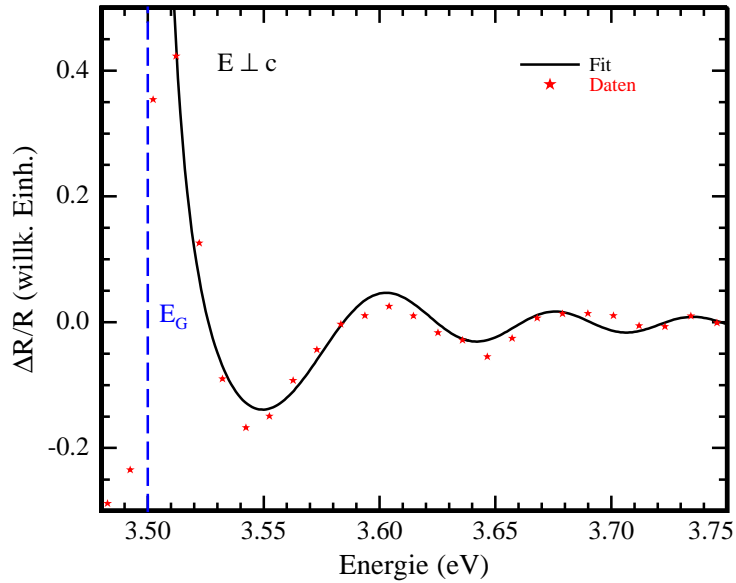


Abb. 4.25: Experimentelle Messdaten (rote Punkte) der Probe A bei einer extern angelegten Spannung von $U = 3.0$ V und einer Temperatur von $T = 80$ K für $E \perp c$. Die schwarze Linie zeigt die zugehörige Linienanpassung nach Gleichung 4.18 oberhalb der GaN-Bandkante. Die Bandkante des GaN ist blau gestrichelt markiert.

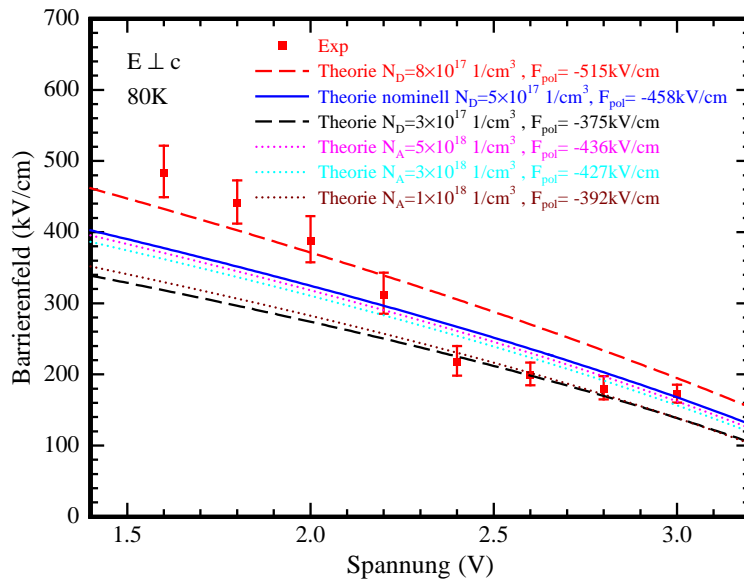


Abb. 4.26: Elektrische Feldstärke in den Barrieren in Abhängigkeit von der extern angelegten Spannung. Die eingezeichneten Fehlergrenzen entsprechen einem 95 %-Konfidenzintervall. Die theoretisch ermittelte Feldstärke in der Barriere in Abhängigkeit von den ausgewählten angenommenen Donatorkonzentrationen der n-Schicht (gestrichelte Linien) und der Akzeptorkonzentration der p-Schicht (gepunktete Linien) sowie dem erwarteten Polarisationsfeld im QW.

jedoch zu keiner deutlichen Verbesserung der Übereinstimmung von Theorie und Experiment. Dies bestätigt die Eignung der verwendeten Konzentrationen und stellt eine weitere Untermauerung der in Kapitel 4.5 bestimmten Polarisationsfeldstärke dar.

4.5.3 Semipolare Probe B

Bei der semipolaren Probe B handelt es sich ebenfalls um eine Probe mit drei InGaN/GaN-QWs. Diese Probe weist eine identische Struktur im Vergleich zur vorher betrachteten Probe A auf. Allerdings ist der Indiumgehalt der QWs mit 13 % niedriger und die Schichtstruktur wurde auf einer $(20\bar{2}1)$ Orientierung gewachsen. Die $(20\bar{2}1)$ Orientierung besitzt einen Winkel von $\theta = 75.09^\circ$ und damit, im Vergleich zur Probe A, ein gedrehtes Polarisationsfeld in der intrinsischen Zone mit dem gleichen Betrag (siehe Abbildung 4.20). Bei der $(20\bar{2}1)$ Orientierung besitzt das elektrische Feld die gleiche Richtung wie bei einer vergleichbaren Ga-polaren c-orientierten Probe, wohingegen bei der $(20\bar{2}1)$ Orientierung die Feldrichtung einer N-polaren c-orientierten Probe entspricht [15]. Im Folgenden werden an dieser Probe die polarisationsabhängigen ER-Messungen vorgestellt. In Abbildung 4.27 (a) ist ein ER-Spektrum für die Polarisationsrichtungen $E \parallel c'$ und $E \perp c$ bei einer Temperatur von 295 K dargestellt.

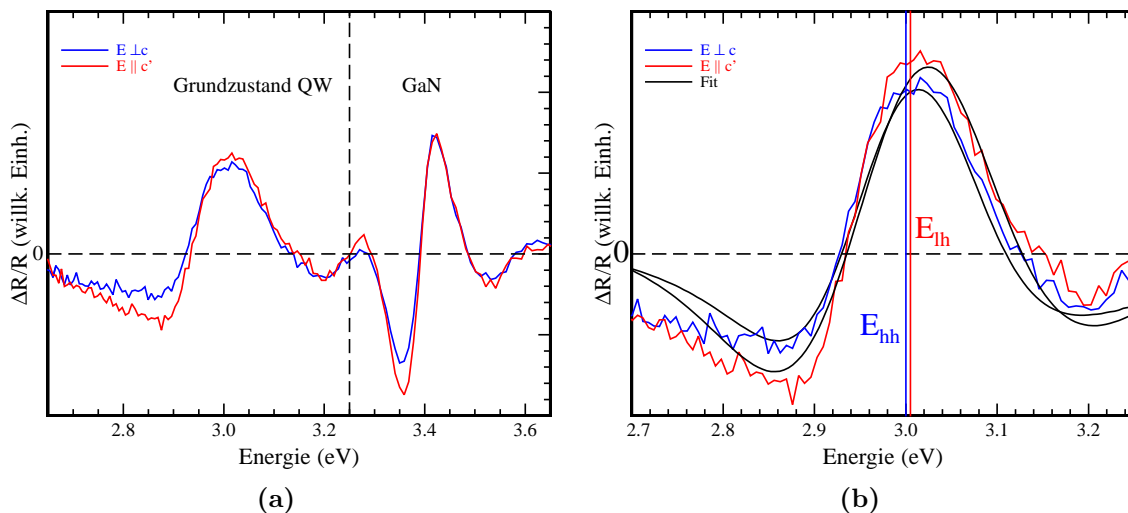


Abb. 4.27: a) ER-Spektren der Probe B bei einer angelegten Spannung von 2.0 V und einer Polarisationsrichtung von $E \perp c$ (blau) und $E \parallel c'$ (rot) bei einer Temperatur von 295 K. Die energetischen Bereiche, in denen sich die Signale des Grundzustandes des QWs und des GaN befinden, sind über eine gestrichelte Linie getrennt. b) Vergrößerter Ausschnitt des Energiebereichs, in dem sich das Signal des Grundzustandes des QWs befindet. Die zugehörige Anpassung nach der in Kapitel 4.4.4 dargestellten Methode ist für beide Polarisationsrichtungen durch eine schwarze Linie angedeutet.

Bei dieser Untersuchung wurde eine extern angelegte Gleichspannung von 2.0 V mit einer Modulationsspannung von 1 V verwendet. Wie auch bei der Probe A tritt das mit dem Grundzustand des QWs korrelierte Signal deutlich hervor. Die energetisch höheren

Übergänge oberhalb des Grundzustandes sind dagegen bei dieser Probe nicht bzw. nur un-
deutlich vom Grundzustand separiert. Im energetischen Bereich oberhalb des QW-Signals
befindet sich, wie bei der Probe A, das Signal der GaN-Exzitonen. Um nun die Über-
gangsenergie des Grundzustandes des QWs zu ermitteln, wurde wiederum das Interfe-
renzmodell aus Abschnitt 4.4.4 verwendet. Die Anpassung ist in Abbildung 4.27 (b) zu
sehen, wobei die sich daraus ergebenden Übergangsenergien für die Polarisationsrichtung
 $E \perp c$ 3.000 eV und für $E \parallel c'$ 3.005 eV betragen. Die sich ergebende Energiediffe-
renz von $\Delta E = 5$ meV ist im Vergleich zur Probe A ($\Delta E = 54$ meV) sehr niedrig. Der
große Unterschied in der polarisationsabhängigen Übergangsenergie wurde von Zhao *et al.*
[107] bereits für Emissionsmessungen an $(20\bar{2}\bar{1})$ und $(20\bar{2}1)$ orientierten Proben festgestellt.
Diese Messergebnisse widersprechen Modellsimulationen mit z.B. der Nextnano3-Software,
da aufgrund der gleichen Verzerrungssituation für beide Orientierungen keine veränderte
Bandstruktur erwartet wird. Eventuell könnte das Vorhandensein dieser Energiedifferenz
auf mikroskopische Unterschiede des Indiumprofils im QW zurückgeführt werden [108].
Für Elektrolumineszenz-Messungen ist dies eine plausible Erklärung, da die Lumineszenz
von lokalisierten Ladungsträgern getrieben werden kann und dadurch, je nach Kompo-
sitionsschwankung eine andere Übergangsenergie ermittelt wird. Wie in diesem Kapitel
angegeben, tritt die Energiedifferenz jedoch auch bei den in dieser Arbeit durchgeführten
Elektroreflexionsmessungen auf. Die von Zhao *et al.* angegebene Ursache lässt sich nicht
auf die ER übertragen, da die ER, als eine absorptionskorrelierte Messmethode, sensitiv auf
die Zustandsdichte des Materials reagiert. Die Zustandsdichte des Materials sollte jedoch
auch bei vorhandenen lokalisierten Kompositionsschwankungen, einen vernachlässigbaren
Effekt auf die durch ER ermittelte Übergangsenergie haben.

Im Vergleich zu den mit der Nextnano3-Software durchgeführten Modellsimulationen [108],
wurden in dieser Arbeit Mehrband k-p-Simulationen durchgeführt. Diese berücksichtigten,
im Vergleich zu früheren Untersuchungen, auch die Nichtparabolizität der Valenzbänder,
wobei das Leitungsband als parabolisch angenommen wird. Nur ein kleiner Anteil der Auf-
spaltungsdifferenz (≈ 10 %) könnte damit erklärt werden. Dementsprechend ist vermutlich
ein weiterer bisher nicht bekannter Prozess beteiligt, der die beobachteten Energiedifferen-
zen verursacht. In Abbildung 4.28 werden die farbkodierten ER-Karten für die Polarisati-
onsrichtungen (a) $E \perp c$ und (b) $E \parallel c'$ dargestellt. Für eine genauere Betrachtung der
Übergangsenergie des QWs wurden die zugehörigen Signale, der in den farbkodierten ER-
Karten gezeigten Spektren, separat angepasst. Die Übergangsenergien sind in Abbildung
4.29 dargestellt.

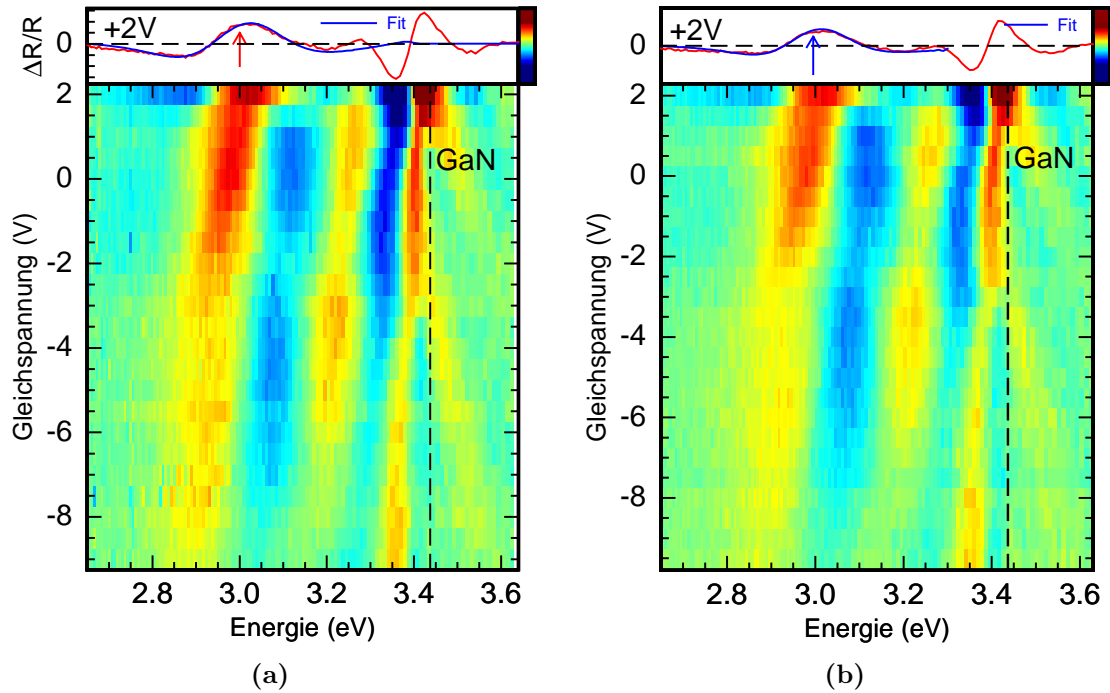


Abb. 4.28: ER-Spektren der Probe B bei einer Gleichspannung von 2 V und zwei verschiedenen Polarisationsrichtungen (a) $E \parallel c'$ und (b) $E \perp c$. Die Spektren wurden im Bereich um das QW-Signals bei $E \approx 2.8$ eV mit dem Modell aus 4.4.4 angepasst. Die daraus bestimmte Übergangsenergie ist durch einen Pfeil markiert. Unterhalb der Spektren befinden sich farbkodierte ER-Karten der jeweiligen Polarisationsrichtungen. Die Übergangsenergie für die Bandkante des GaN ist durch eine gestrichelte Linie markiert.

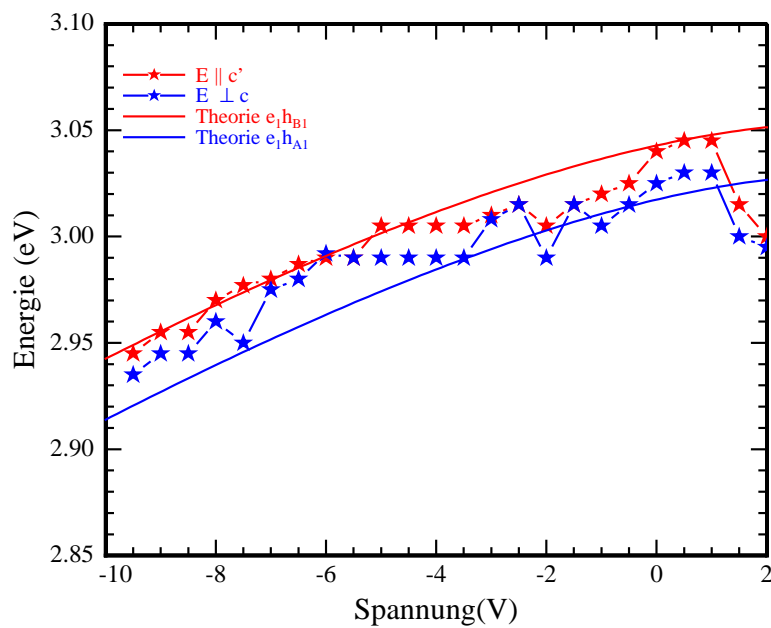


Abb. 4.29: Charakteristische Energie des Grundzustandes des QWs der Probe B in Abhängigkeit von der angelegten Spannung für die beiden Polarisationsrichtungen $E \perp c$ und $E \parallel c'$.

Wie bei der Probe A zeigt sich eine Verschiebung des Signals des QWs zu niedrigerer Energie von positiven zu negativen angelegten Spannungen. Dies ist ebenfalls auf den schon bei der Probe A angesprochenen QCSE zurückzuführen. Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung zwischen den experimentell ermittelten und durch die Lösung der effektiven Massengleichung berechneten Übergangsenergien in beiden Polarisationsrichtungen. Eine Bestimmung der Flachbandspannung für die Probe B ist nicht möglich, da diese deutlich oberhalb der Durchlassspannung liegt und damit außerhalb des möglichen Messbereichs der Elektroreflexion.

5 Photostrom

Photostrommessungen stellen eine weitere Möglichkeit dar, die Absorptionseigenschaften der verwendeten Proben zu untersuchen. In der Literatur werden Photostrommessungen vielfältig eingesetzt. Diese werden z.B. genutzt, um energetische Übergänge bzw. die Flachbandspannung des Quantengraben zu ermitteln [109, 110], Informationen über den Transport von Ladungsträgern innerhalb der Struktur zu erhalten [111] oder auch Aussagen über die Ursachen von Fluktuationen zu treffen [112].

5.1 Aufbau des Photostrom-Messplatzes

Der Versuchsaufbau für die in dieser Arbeit durchgeführten Photostrom-Messungen ist in Abbildung 5.1 dargestellt.

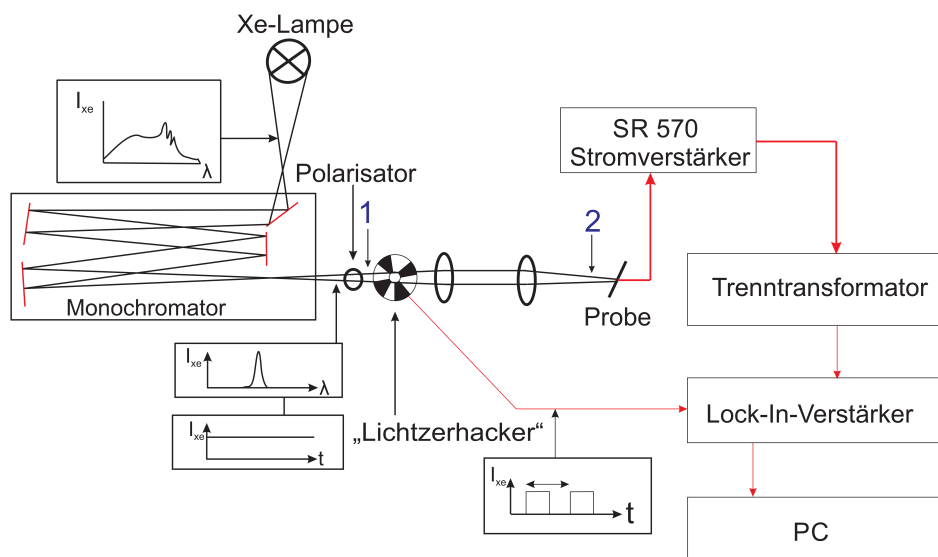


Abb. 5.1: Aufbau des Photostrom-Messplatzes. Die roten Linien bezeichnen die elektrischen Verbindungen zwischen den unterschiedlichen Geräten. Die schwarzen Linien veranschaulichen den Lichtweg.

Ausgehend von der Xe-Lampe gelangt das Licht in den Monochromator. Dieser zerlegt den Lichtstrahl durch Beugung an einem Gitter mit 2400 Strichen pro mm, welches für den UV-Spektralbereich optimiert wurde. Das austretende monochromatische Licht wird durch einen Polarisator geführt. Dieser ermöglicht eine definierte Polarisierung des Messlichtes. Der darauf folgende Lichtzerhacker moduliert die bisher konstante zeitliche Intensität des Lichtes zu einem optischen Rechtecksignal. Nach dem Lichtzerhacker wird das

Licht auf den Kontakt der Probe fokussiert, wobei auf eine gleichmäßige Ausleuchtung des Kontaktes geachtet wurde. Ist die Energie der eintreffenden Photonen höher als die Bandlücke des untersuchten Materials, werden Elektron-Loch-Paare erzeugt. Diese werden aufgrund des vorhandenen internen elektrischen Feldes in der pin-Diode getrennt und sorgen für einen Stromfluss. Während der Beleuchtung des Kontaktes wird gleichzeitig eine Gleichspannung an den Kontakt der Probe angelegt. Diese ermöglicht eine kontinuierliche Veränderung des Potentialverlaufes der pin-Diode. Das an den Kontakten anliegende Signal weist die vom Lichtzerhacker eingestellte Frequenz auf. Für eine Vergleichbarkeit mit den in der Modulationsspektroskopie durchgeführten Messungen wird mit $f = 130$ Hz die gleiche Frequenz wie bei der ER verwendet. Der Photostrom gelangt von den Kontakten zum Stromverstärker SR 570 und wird dort verstärkt. Hiernach gelangt der Photostrom zu einem Trenntransformator. Dieser ermöglicht eine galvanische Trennung zur Probe und bewirkt eine Separation des Wechselstromanteils für die weitere Analyse. Das ebenfalls vorhandene Gleichspannungssignal wird nicht übertragen. Der Wechselstromanteil wird an den Lock-in-Verstärker weitergeleitet und das Signal mit Hilfe der Referenzfrequenz des Lichtzerhackers phasensensitiv ausgewertet. Dabei generiert der Lock-in-Verstärker ein Gleichspannungssignal. Dieses ist in seiner Amplitude proportional zum Photostrom und bezeichnet die verwendete Messgröße. Hierauf wird das Messsignal weiter an den PC geleitet und dort wellenlängenabhängig aufgezeichnet. Das eigentliche Photostromspektrum zeigt den Photostrom in Abhängigkeit von der Energie der eintreffenden Photonen.

5.2 Polarisationsabhängige Charakterisierung des Photostrom-Messplatzes

Um die Polarisationsseigenschaften der zu untersuchenden Proben zu bestimmen, ist es nötig, die Polarisation des eintreffenden Lichtes vor der Probe genau zu kennen. Zudem sollte der Einfluss der verschiedenen im Strahlengang befindlichen optischen Elemente berücksichtigt werden. Hierfür wurde die Lichtintensität polarisationsabhängig an zwei unterschiedlichen Stellen (markiert mit „1“ und „2“ in Abbildung 5.1) im Strahlengang ermittelt. Die erste Position im Strahlengang wurde ausgewählt, um eine Information über die polarisierenden Eigenschaften des im Monochromator verbauten Gitters und des verwendeten Polarisators zu erhalten. Darüber hinaus charakterisiert die mit „2“ markierte Stelle im Strahlengang das eintreffende Licht vor der Probe. Einige ausgewählte Xe-Lampenspektren, die an Stelle „2“ gemessen wurden sind in Abbildung 5.2 dargestellt.

Die Spektren, die an der Stelle „1“ gemessen wurden, sind in Form und Intensität sehr ähnlich zu den dargestellten Spektren der Stelle „2“. Daher wird auf eine separate Darstellung verzichtet. Werden die verschiedenen Spektren bei unterschiedlicher Polarisatorstellung betrachtet, so steigt die gemessene Intensität mit steigendem Polarisationswinkel von 0° bis 90° an und sinkt bei weiterer Erhöhung des Polarisationswinkels, bis sie bei 180° wieder

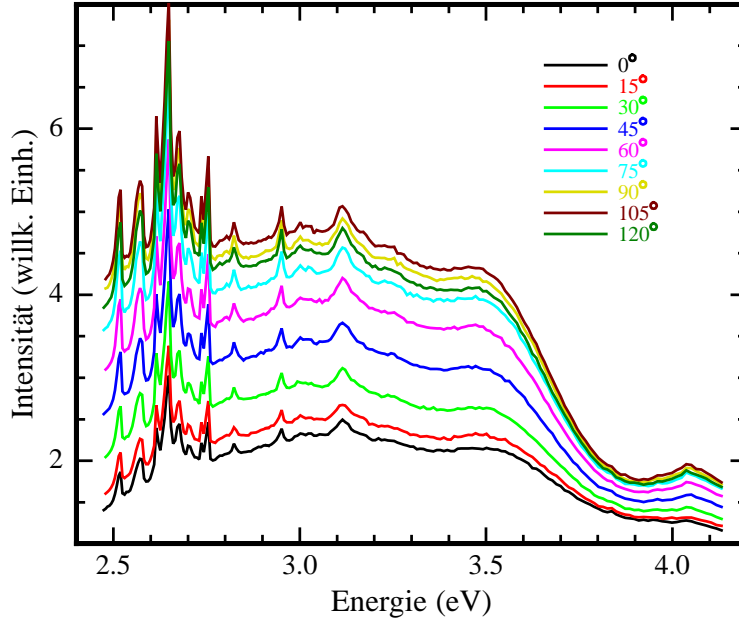


Abb. 5.2: Polarisationsabhängige Intensitäts-Spektren an der in Abbildung 5.1 markierten Stelle „2“. Die am Polarisator eingestellten Winkel sind angegeben.

den ungefähr gleichen Intensitätsbetrag wie bei 0° erreicht. Die Intensität des einfallenden linear polarisierten Lichtes lässt sich mit dem Gesetz von Malus [113] nach Gleichung 5.1 beschreiben.

$$I(\phi) = I_0 \cos^2 \phi \quad (5.1)$$

Für das in diesem Fall vorhandene teilweise linear polarisierte Licht lassen sich die Intensitäten für unterschiedliche Stellungen des Polarisators mit Gleichung 5.2 beschreiben.

$$I(\Phi) = I_{E \perp c} + I_{E \parallel c'} = I_{E \perp c} + (I_{E \parallel c'} - I_{E \perp c}) \sin^2(\Phi + \Phi_0) \quad (5.2)$$

Hierbei bezeichnet I die Intensität des Lichtes hinter dem Polarisator sowie $I_{E \perp c}$ und $I_{E \parallel c'}$ die Intensität des Lichtes parallel und senkrecht zur optischen Achse. Der zusätzlich enthaltene Winkel ϕ_0 beschreibt eine eventuell abweichende Orientierung zwischen dem einfallenden Licht und der optischen Achse des Polarisators. Um die Größe von ϕ_0 zu überprüfen, die bei einem optimal ausgerichteten Setup null ist, wurden die Intensitäten an der Stelle „2“ im Strahlengang polarisations- und energieabhängig ermittelt. Diese wurden nach Gleichung 5.2 für jede Energie angepasst. Die polarisationsabhängige Intensität und die zugehörige Anpassung sind in Abbildung 5.3 beispielhaft für eine Energie von $E = 3.35$ eV dargestellt. Die Messwerte lassen sich gut mit Gleichung 5.2 beschreiben und

die zugehörige Anpassung ergibt einen Winkel von $\phi_0 = -3.4^\circ$. Das energieabhängige Fitergebnis für den ermittelten Winkel ϕ_0 ist in Abbildung 5.4 dargestellt.

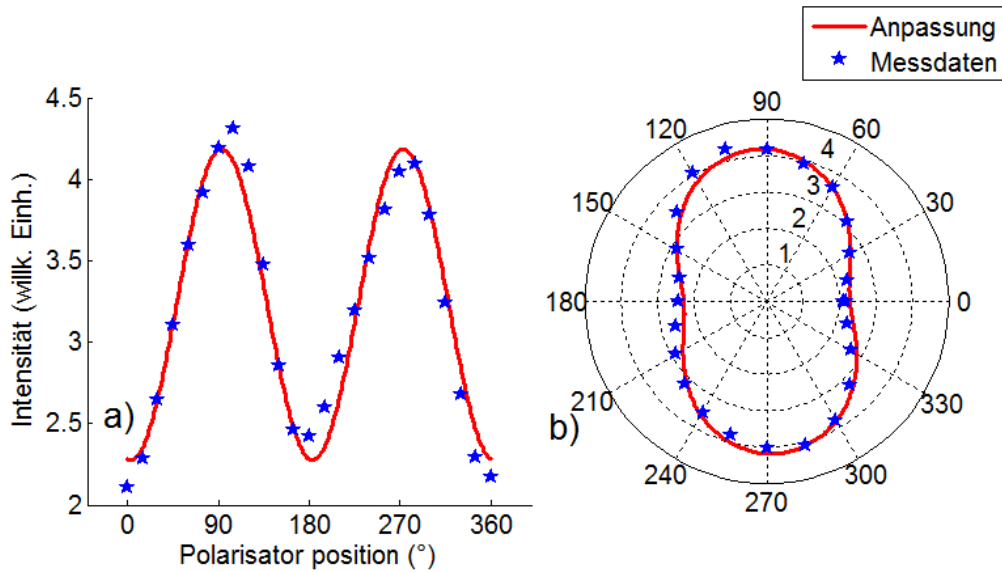


Abb. 5.3: Polarisationsabhängige Intensitätsmessung in a) kartesischen Koordinaten b) Polarkoordinaten bei einer Energie von 3.35 eV. Die Messdaten wurden mit Gleichung 5.2 angepasst.

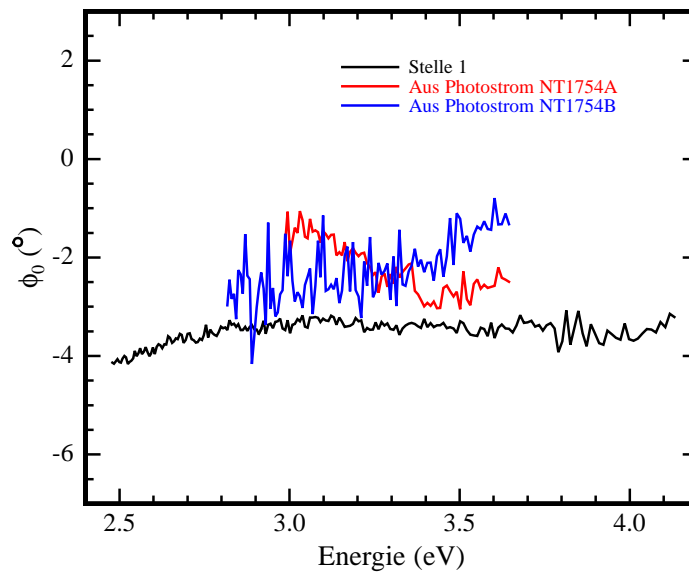


Abb. 5.4: Ermittelter Winkel ϕ_0 für die Messung an Position „2“ (schwarze Kurve) und aus polarisationsabhängigen Photoströmmessungen der beiden Proben A(NT1754B) und B(NT1754A).

Es zeigt sich, dass dieser Winkel nahezu konstant bei $\approx -3^\circ$ liegt und somit als vernachlässigbar klein eingeschätzt wird. Somit wird im Folgenden das Licht, das durch den Polarisator bei einer Polarisatorstellung von 0° und 90° gelangt, als Licht mit $E \parallel c'$ bzw. $E \perp c$ bezeichnet. Nachdem der Einfluss des Messaufbaus bestimmt wurde, konnte die Probe untersucht werden. Hierfür wurden Photostromspektren mit unterschiedlicher Polarisatorstellung gemessen und wie zuvor der Winkel ϕ_0 ermittelt. Wie in Abbildung 5.4 ebenfalls veranschaulicht, ist dieser nahezu konstant und liegt für beide Proben bei $\approx -2^\circ$.

5.3 Photostrommessungen

Die Photostrommessungen wurden wie bei der ER polarisationsabhängig durchgeführt. Die verschiedenen Charakteristika der Spektren werden am Beispiel von Photostromspektren mit Polarisation $E \parallel c'$ und $E \perp c$ erläutert (siehe Abbildung 5.5).

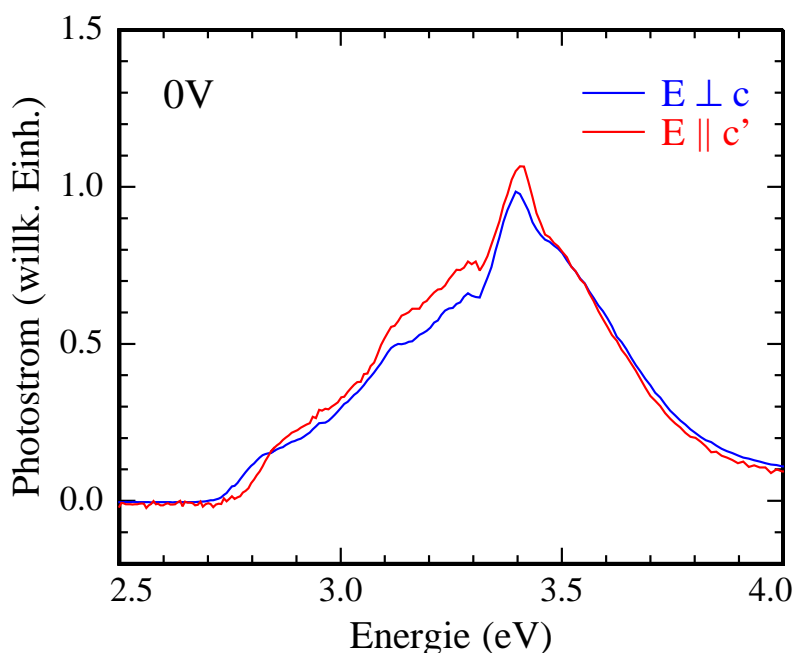


Abb. 5.5: Polarisationsabhängige Photostromspektren der Probe A, die mit dem zugehörigen Xe-Lampenspektrum korrigiert wurden.

Die Intensität des Photostromsignals ist von zwei Prozessen abhängig. Einerseits handelt es sich dabei um die Erzeugung von Ladungsträgern und andererseits um deren Transport zu den Kontakten. Unterhalb einer Energie von 2.7 eV findet nur eine sehr geringe Absorption innerhalb der Probenstruktur statt und der zugehörige Photostrom ist nahe null. Oberhalb einer Energie von 2.7 eV steigt der Stromfluss deutlich an. In diesem energetischen Bereich führt eine steigende Absorption im QW zu mehr erzeugten Elektronen-Loch-Paaren. Diese werden dann aufgrund des elektrischen Feldes in der Raumladungszone getrennt und gelangen zu den Kontakten, an denen sie als Photostrom detektiert werden.

Im energetischen Verlauf von 2.7 eV bis 3.3 eV ändert sich der Anstieg des Photostroms an mehreren Stellen. Da davon ausgegangen werden kann, dass sich die beteiligten Transportprozesse in diesem energetischen Bereich nicht ändern, deutet eine starke Änderung des Photostroms auf eine veränderte Absorption durch höherenergetische Übergänge des QWs hin. Oberhalb einer Energie von 3.3 eV steigt der Photostrom noch einmal deutlich an, bevor er bei 3.42 eV abfällt. Ursache für den Anstieg sind zusätzlich erzeugte Ladungsträger im nun absorbierenden GaN. Dass die GaN-Schichten im energetischen Bereich um 3.3 eV überhaupt absorbieren, liegt an dem intrinsischen elektrischen Feld in der Raumladungszone, die zu einer Verbreiterung der Absorptionskante führt [71]. Die schon angesprochene Verringerung des Photostroms oberhalb von 3.42 eV ist dagegen auf die einsetzende Absorption der GaN-Deckschicht zurückzuführen. Die in der Deckschicht erzeugten Elektronen-Loch-Paare können, aufgrund des fehlenden bzw. geringen elektrischen Feldes, nicht mehr ausreichend getrennt werden und tragen damit nicht mehr zum Photostrom bei. Die Eindringtiefe des Lichtes sinkt gleichzeitig mit steigender Energie und führt simultan zu immer weniger erzeugten Ladungsträgern in der RLZ und somit zu einem niedrigeren Photostrom. Im Folgenden wird, wie bei der ER, die Spannung an den Kontakten der Probe kontinuierlich verändert und damit das elektrische Feld der RLZ variiert. Dies ist für die beiden Polarisationsrichtungen $E \perp c$ und $E \parallel c'$ in den Abbildungen 5.6 und 5.7 dargestellt. Wird die Spannung in Rückwärtsrichtung erhöht, so zeigt sich bei beiden Polarisationsrichtungen ein Anstieg des Photostroms. Dieser Trend ist energieunabhängig, besitzt im energetischen Bereich der Absorption des QWs und im Bereich der Bandkante des GaN jedoch unterschiedliche Ursachen. Auf diese wird nachfolgend eingegangen.

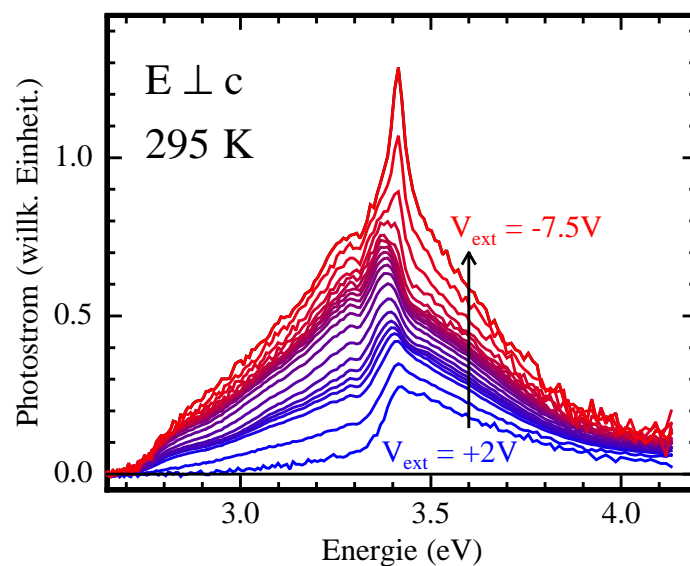


Abb. 5.6: Spannungsabhängige und polarisationsabhängige ($E \perp c$) Photostrommessung an der Probe A.

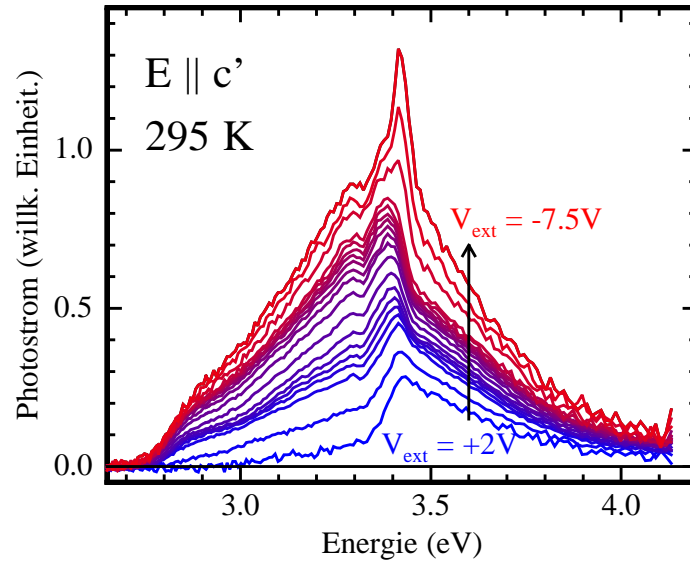


Abb. 5.7: Spannungsabhängige und polarisationsabhängige ($E \parallel c'$) Photostrommessung an der Probe A.

5.3.1 Signal des GaN

Der folgende Abschnitt beschäftigt sich mit dem energetischen Bereich um 3.4 eV, in dem sich das Signal des GaN befindet. Eine naheliegende Ursache für einen ansteigenden Photostrom in diesem Bereich ist, dass sich die Raumladungszone mit steigender Rückwärtsspannung immer weiter vergrößert. Die Breite der Raumladungszone einer pin-Diode ergibt sich aus der Summe des spannungsabhängigen Anteils der RLZ berechnet nach Gleichung 3.2 und der intrinsischen Größe des undotierten Gebietes d_u . In Abbildung 5.8 ist die Breite der Raumladungszone für die Probe A dargestellt.

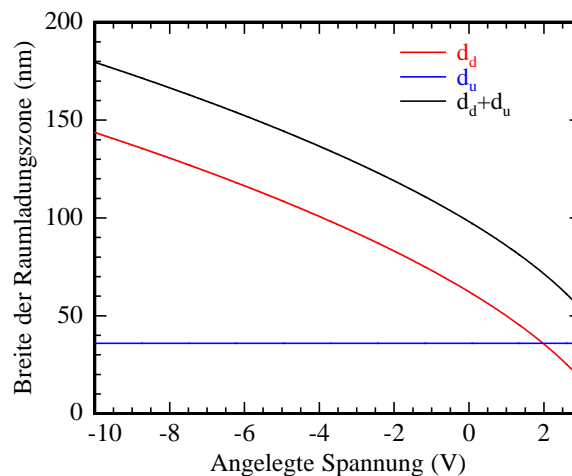


Abb. 5.8: Breite der Raumladungszone in Abhängigkeit von der angelegten Spannung für die Probe A. Hierbei bezeichnet d_d die Größe der spannungsabhängigen Raumladungszone nach Gleichung 3.2 und d_u die spannungsunabhängigen Größe der Raumladungszone.

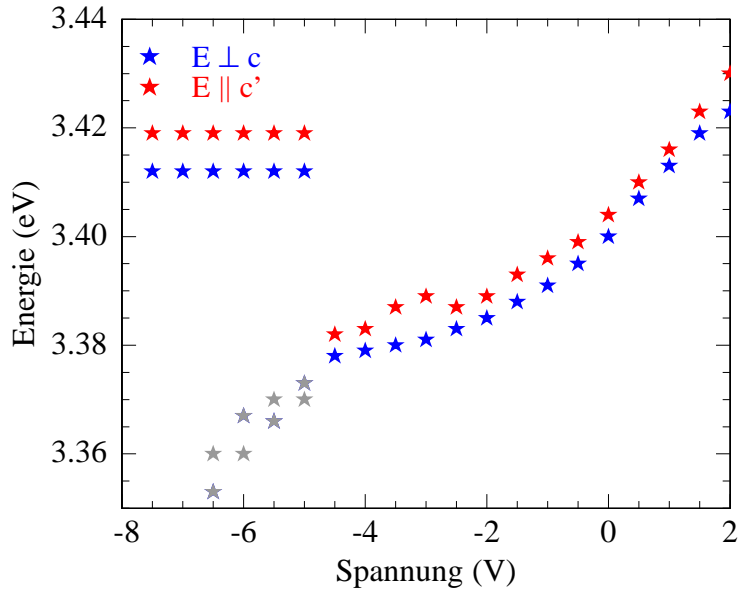


Abb. 5.9: Spannungsabhängige und polarisationsabhängige Energiepositionen der für die Beschreibung des GaN-Signals verwendeten Normalverteilungen. Zur Anpassung des Photostromsignals wurden in den Spannungsbereichen eine Normalverteilung (Spannungsbereich -7.5 V bis -7 V und im Spannungsbereich von -4.5 eV bis $+2$ V) zwei Normalverteilungen verwendet. Die ausgegrauten Werte gehören zu intensitätsschwachen Beiträgen im Spektrum.

Zusätzlich zur spannungsabhängigen Intensitätsveränderung tritt eine energetische Verschiebung des Maximums des Photostromes auf. Diese wird im Folgenden genauer betrachtet. Um die Linienform im Bereich zwischen 3.35 eV und 3.4 eV zu beschreiben, wird eine bzw. werden zwei Normalverteilungen verwendet. Im Spannungsverlauf zeigen sich drei Spannungsbereiche, in denen sich die Charakteristika der gemessenen Photostromspektren verändern. Im ersten Spannungsbereich zwischen $+2$ V und -4.5 V sinkt die Energie des Maximums und die Linienform lässt sich mit einer einzelnen Normalverteilung beschreiben. Im zweiten Spannungsbereich zwischen -5 V und -6.5 V entsteht auf der Hochenergieflanke ein weiterer Beitrag, für dessen Beschreibung eine zusätzliche Normalverteilung verwendet wird. Wird die angelegte Spannung in Rückwärtsrichtung weiter erhöht, so dominiert der Beitrag der höherenergetischen Normalverteilung. Die durch diese Anpassung ermittelten Energiepositionen sind in Abbildung 5.9 dargestellt.

Eine mögliche Erklärung für dieses Verhalten ist, dass in Abhängigkeit von der Spannung Ladungsträger abhängig vom Ort ihrer Entstehung zum Stromfluss beitragen. Die Ladungsträger können in der intrinsischen Zone oder im p-dotierten GaN erzeugt werden. Damit entstehen Ladungsträger entweder in einem Gebiet mit elektrischem Feld (intrinsische Zone) bzw. in einem Gebiet mit vergleichbar geringem Feld. Betrachten wir die pin-Diode mit einer angelegten Spannung im Bereich zwischen $+2$ V und -5 V, weist die Breite der RLZ nach Abbildung 5.8 Werte zwischen 70 nm und 150 nm auf. In diesem

Spannungsbereich dominieren die in der Raumladungszone erzeugten Ladungsträger. Das zugehörige Photostromsignal zeigt eine Rotverschiebung durch den Stark-Effekt. Mit sich vergrößernder Raumladungszone unterhalb einer angelegten Spannung von -5 V nimmt die Bedeutung von im p-Gebiet erzeugten Ladungsträgern entscheidend zu. Diese gelangen in immer größerer Anzahl in die Raumladungszone und können dadurch zum Photostrom beitragen. Jenseits von -6.5 V ist der Beitrag der Ladungsträger aus der intrinsischen Zone nicht mehr von dem Beitrag der Ladungsträger aus dem p-Gebiet separierbar. Die Energieposition der höherenergetischen Normalverteilung bleibt bei weiterer Erhöhung der Rückwärtsspannung aufgrund eines vernachlässigbaren Feldeinflusses konstant. Der energetische Unterschied zwischen den Polarisationsrichtungen $E \perp c$ und $E \parallel c'$ variiert zwischen 3 meV und 9 meV und nimmt einen im Spannungsbereich unterhalb von $U = -5\text{ V}$ einen konstanten Wert von $\Delta E = 8\text{ meV}$ an. Dieser Unterschied entspricht sehr gut dem aus der Literatur bekannten Wert der Aufspaltung zwischen dem A-Valenzband (Γ_9 -Symmetrie) und dem B-Valenzband (Γ_{7+}) von GaN. Die Aufspaltung wurde in den Arbeiten von Carvalho *et al.* [114] zu 9 meV bestimmt. Weitere Arbeiten von Gil *et al.* [115] und Misra *et al.* [116] ermittelten ein ΔE von 7 meV bzw. 5 meV .

5.3.2 Signal des Quantengrabens

Im Folgenden wird der energetische Bereich zwischen 2.7 eV und 3 eV betrachtet. In diesem Bereich sind die GaN-Schichten der Probe optisch transparent und Ladungsträger werden nur im QW erzeugt. Bei der Betrachtung eines InGaN/GaN-QW-Signals im Photostrom, werden in der Literatur verschiedene Herangehensweisen vorgenommen. Zum Beispiel werden in der Veröffentlichung von Shin *et al.* [110] InGaN/GaN-Proben mit unterschiedlichem Indium-Gehalt untersucht. Es wurde festgestellt, dass sich diese nicht sinnvoll vergleichen lassen, wenn nicht eine Normierung auf eine Energie unterhalb der GaN-Bandkante verwendet wird. Mit einem Wert von 3.2 eV wurde diese Energie deutlich unterhalb der GaN-Bandkante gesetzt, um den Einfluss des p-GaN auf das Photostromspektrum zu vermeiden. Die Beschreibung des Photostromspektrums wird nur für eine externe Spannung, die der Flachbandspannung für den QW entspricht, gezeigt und lässt keine Rückschlüsse auf eine Anwendbarkeit dieses Verfahrens auf eine Spannungsserie zu, bei der sich der Transport der Ladungsträger zu den Kontakten deutlich ändern kann. Mögliche Prozesse hierfür sind z.B. eine veränderte elektrische Feldstärke, nichtstrahlende Rekombination und Rekombination an Störstellen. Nach eigenen Erfahrungen beeinflusst die Wahl des Normierungspunktes die zu bestimmende Übergangsenergie des Grundzustandes des QWs aus dem Photostrom. Eine eindeutige Bestimmung der Übergangsenergie mit Hilfe einer einzelnen Sigmoidalfunktion scheint deshalb problematisch zu sein. Eine vergleichbare Vorgehensweise wird in der Veröffentlichung von Park [117] mit der Normierung auf das GaN-Signal verwendet, wohingegen in der Veröffentlichung von Yee *et al.* [118] eine Übergangsenergie des

QWs über die Energieposition bei einem gewählten Prozentsatz der Intensität des Photostromspektrums vom Maximum von 6 % verwendet wird. Die Angabe der 6 % wird nicht weiter erläutert. Eine weitere Veröffentlichung, die sich mit dem Photostromsignal eines QWs beschäftigt, ist die Arbeit von Islam *et al.* [119]. In dieser wird das spannungsabhängige Verhalten von InGaN/GaN-QWs insbesondere im Vergleich mit der gleichzeitig gemessenen Elektreflexion behandelt. Hierbei ist anzumerken, dass die Auswertung der Elektreflexion augenscheinlich ohne die Berücksichtigung des Imaginärteils der dielektrischen Funktion geschieht und damit als fehlerhaft eingeschätzt wird. Über die gemessenen Photostromspektren werden Änderungen in der Brechzahl bestimmt und darüber z.B. die Position des Flachbandfalls ermittelt. Diese Vorgehensweise wurde für die in dieser Arbeit untersuchten Proben getestet, lieferte aber aufgrund eines anderen spannungsabhängigen Verhaltens keine zusätzlichen Informationen. Für die in dieser Arbeit vorgestellten Photostromspektren wird eine mit der Arbeit von Rigutti *et al.* [109] vergleichbare Vorgehensweise angewandt. Bei dieser werden zwei Sigmoidalfunktionen verwendet, um den Absorptionskoeffizienten und damit das dazu proportionale Photostromsignal im Bereich des QWs zu beschreiben. Die Verwendung von Sigmoidalfunktionen zur Beschreibung der Absorption von QWs hängt mit der Zustandsdichte des QWs zusammen, die als stufenförmig angenommen wird. Die Absorption im QW lässt sich nach Kwon *et al.* [120] als eine Summe aus zwei Sigmoidalfunktionen durch

$$\alpha_{QW}(E) = \frac{C_1}{1 + \exp\left(-\frac{E-E_{g,QW}}{D_1}\right)} + \frac{C_2}{1 + \exp\left(-\frac{E-E_{g,QW}-E_u}{D_2}\right)} \quad (5.3)$$

beschreiben. Hierbei bezeichnen C_1 und C_2 die effektive Absorptionsstärke, D_1 bzw. D_2 die Verbreiterungsparameter und $E_{g,QW}$ die charakteristische Energie des QWs. Der Parameter E_u stellt die energetische Lage der zur Abbildung des Untergrundes verwendeten Sigmoidalfunktion dar. Bei dem hier mit Untergrund bezeichneten Beitrag zum Photostrom handelt es sich um die Gesamtheit des Photostroms, der unter anderem mit der Absorption durch höhere Übergänge des QW im Zusammenhang steht. Dieser Beitrag dient nur als Hilfsmittel für die Bestimmung der charakteristischen Energie des QWs. Eine Beispielanpassung für die Polarisationsrichtungen $E \perp c$ und $E \parallel c'$ ist in Abbildung 5.10 dargestellt und die einzelnen Summanden aus Gleichung 5.3 sind als gepunktet-gestrichelte Linien gekennzeichnet. Es wird deutlich, dass die Anpassung die Spektren sehr gut abbildet. Beim Vergleich der Polarisationsrichtungen ist zu erkennen, dass bei der Polarisationsrichtung $E \parallel c'$ die zugehörige Sigmoidalfunktion eine größere effektive Absorptionsstärke besitzt. Dies stimmt mit Ellipsometriemessungen aus der Literatur überein [121].

Weiterführend wird das am Beispiel gezeigte Modell mit der Anpassung durch die genannten Sigmoidalfunktionen angepasst und auf die aus Abbildung 5.6 und 5.7 bekannten Spektren übertragen. Diese sind in Abbildung 5.11 in Abhängigkeit von der Spannung

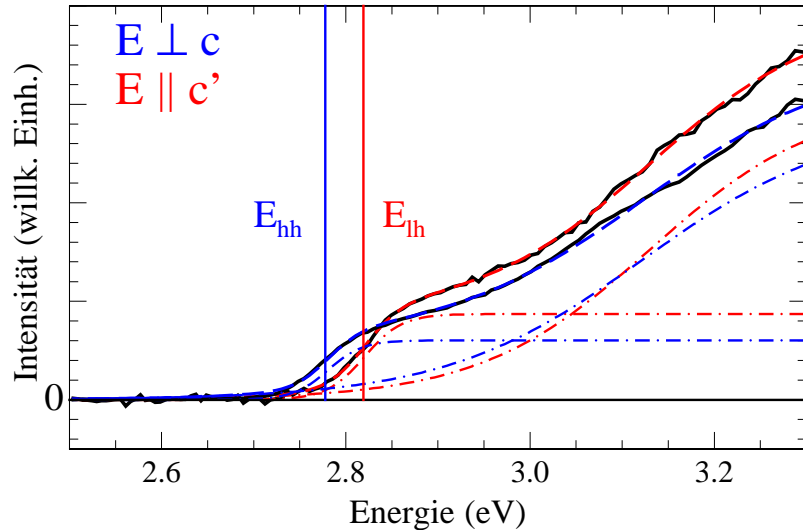


Abb. 5.10: Photostromspektren für verschiedene Polarisationsrichtungen an der Probe A und die zugehörige Anpassung (gestrichelte Linie) unter Verwendung von Gleichung 5.3 bei einer Spannung von 0 V. Die gepunktet-gestrichelte Linie entspricht dem ersten bzw. zweiten Summanden aus Gleichung 5.3.

dargestellt. Auch für die verschiedenen Spannungen kann eine sehr gute Linienanpassung der Messdaten erzielt werden. Die aus der Anpassung ermittelte Übergangsenergie $E_{g,QW}$ ist für beide Polarisationsrichtungen in Abbildung 5.12 dargestellt.

Hierbei fällt auf, dass die Übergangsenergie über einen großen Spannungsbereich nahezu konstant ist. Dies ist unterschiedlich zu dem beobachteten Verhalten in der ER. Eine mögliche Ursache hierfür sind im Photostrom enthaltene Transportprozesse. Diese müssten z.B. über die Drift-Diffusions-Gleichung [122, 123, 124] berücksichtigt werden, was jedoch jenseits des Zieles dieser Arbeit lag. Abweichungen von der angesprochenen Konstanz der Übergangsenergie sind in der Nähe der Flachbandspannung von 1 V aufgrund des dort einbrechenden Signals des QWs und unterhalb von -5 V aufgrund der sinkenden Qualität des Spektrums zu erkennen. Betrachtet man die Aufspaltung zwischen den bestimmten Übergangsenergien der beiden verwendeten Polarisationsrichtungen, so sind die Werte vergleichbar mit denen aus der ER.

Vergleicht man die Spektren der beiden Methoden bei einer Spannung von 0 V (siehe Abbildung 5.13), so ist bei beiden Polarisationsrichtungen ein Signal im Bereich des QWs ($E < 2.9$ eV) zu erkennen. Dies ändert sich bei Annäherung an die Flachbandspannung des QWs ($U = 1$ V), unabhängig von der Polarisationsrichtung des Lichtes und führt bei einer Spannung von $U = 2$ V zu einem Photostromsignal nahe der Nulllinie. Der starke Einbruch der Intensität des Photostroms entsteht dadurch, dass sich je nach angelegter Spannung sowohl die elektrische Feldstärke des QWs ändert als auch deren Richtung umdrehen lässt. Dieser Richtungswechsel im QW führt zu einer effektiv breiteren Barriere, die von den Ladungsträgern durchtunnelt werden muss, um zum Photostrom beizutragen.

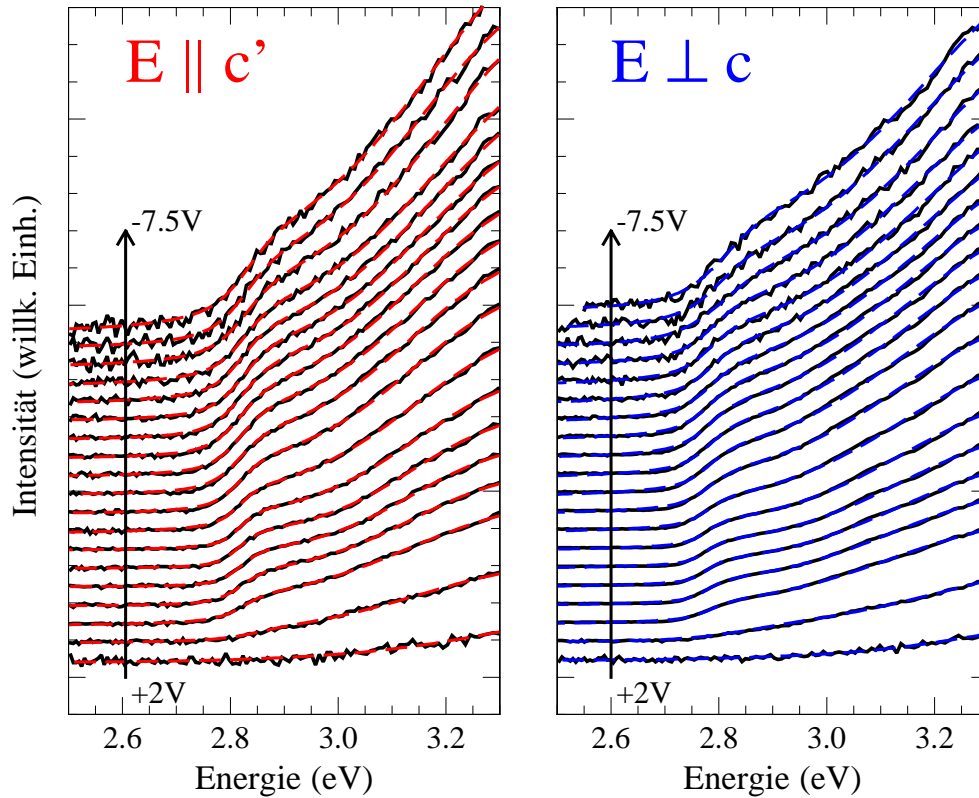


Abb. 5.11: Spannungsabhängige Photoströmspektren an der Probe A für verschiedene Polarisationsrichtungen und die zugehörige Anpassung unter Verwendung von Gleichung 5.3.

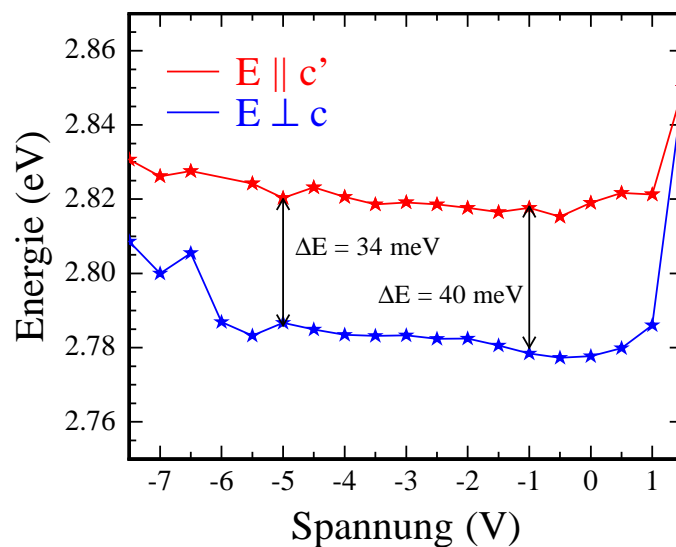


Abb. 5.12: Ermittelte charakteristische Energien des QWs unter Verwendung von Gleichung 5.3 für verschiedene Spannungen und Polarisationsrichtungen des einfallenden Lichtes.

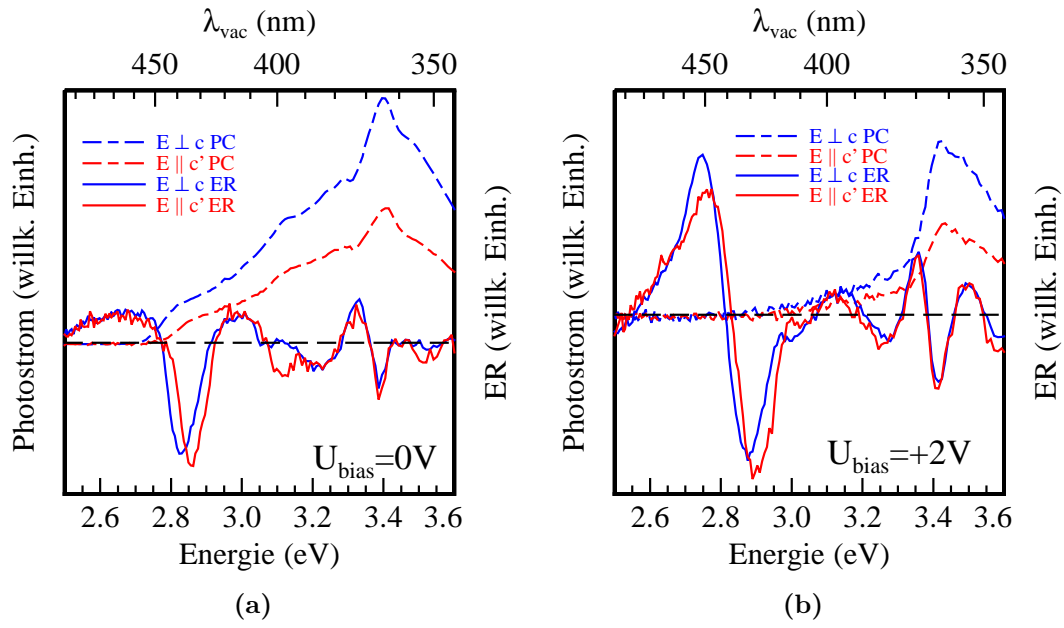


Abb. 5.13: Elektroreflexions- (ER) und Photostrommessungen (PS) an Probe A bei einer Temperatur von 295 K.

6 Photolumineszenz und Elektrolumineszenz

Im folgenden Kapitel werden die an den Proben durchgeführten Emissionsmessungen vorgestellt. Hierbei werden die Messmethoden der Photolumineszenz und der Elektrolumineszenz verwendet. Die notwendige Anregung der Proben erfolgte bei der Photolumineszenz mit Hilfe von energiereichen Photonen, wohingegen bei der Elektrolumineszenz Strom injiziert wurde. Bei beiden Methoden handelt es sich um sehr verbreitete Vorgehensweisen zur Grundcharakterisierung von Halbleiterproben. Unter anderem lassen sich Informationen über Bandstruktur und Materialqualität der untersuchten Proben ermitteln.

6.1 Photolumineszenz

Die Photolumineszenz ist eine Unterart der Emissions-Spektroskopie. Wird ein Material mit einer Energie oberhalb der Bandkante bestrahlt, so wird ein Teil dieses Lichtes absorbiert und Elektronen bzw. Löcher gelangen in einen angeregten Zustand. Die erzeugten Ladungsträger relaxieren daraufhin in das Minimum des Leitungs- bzw. das Maximum des Valenzbandes. Aus dem Quasigleichgewicht rekombinieren die Ladungsträger unter Aussendung von Photonen strahlend oder nichtstrahlend. Bei der Photolumineszenz können nur strahlende Übergänge erfasst werden, so dass im Folgenden nur diese weiter betrachtet werden.

6.1.1 Setup und Funktionsweise

In Abbildung 6.1 ist der Messplatzaufbau für die Messung der Photo- und Elektrolumineszenz dargestellt. Für die Anregung der Probe wurde bei der Photolumineszenz entweder ein HeCd-Laser mit einer Emissionswellenlänge von 325 nm und einer Laserleistung von 20 mW verwendet oder ein Nd:YAG-Laser mit einer Emissionswellenlänge von 266 nm und einer Laserleistung von 50 mW. Bei der Elektrolumineszenz wird über einen Frequenzgenerator (Yokogawa FC110) eine Gleichspannung an die Probe angelegt. Die Probe befindet sich bei beiden Methoden innerhalb des Kryostaten. Nach der Anregung wird das emittierte Licht mit einem Linsensystem aufgefangen und durch einen Monochromator aufgespalten. Hierbei handelt es sich um einen Gittermonochromator mit einer Fokallänge von 1.25 m. Das Gitter des Monochromators besitzt 1200 Striche/mm und eine Blazewellenlänge von 300 nm. Für die hochauflösenden 8 K-Messungen im Bereich der GaN-Bandkante (siehe Anhang) wird eine Spaltbreite von 20 μm verwendet. Bei allen weiteren Messungen wird eine Spaltbreite von 100 μm genutzt. Nach dem Passieren des Monochromators gelangt das Licht in eine CCD-Kamera, die auf eine Temperatur von 140 K gekühlt wird. Das mit Hilfe der CCD-Kamera gemessene Signal wird dann an den PC weitergegeben.

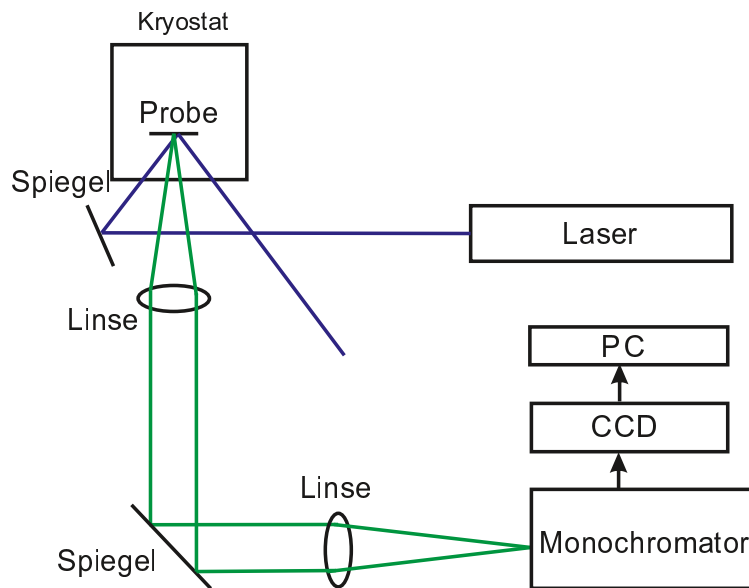


Abb. 6.1: Schematischer Aufbau des Photolumineszenz-Messplatzes. Bei den verwendeten Lasern handelt es sich entweder um einen HeCd-Laser mit einer Emissionswellenlänge von 325 nm oder um einen frequenzvervierfachen Nd:YAG-Laser mit einer Emissionswellenlänge von 266 nm. Die Messung der spektralen Intensität erfolgt mit einer CCD-Kamera (engl. Charge Coupled Device).

6.1.2 Unkontaktierte Photolumineszenz-Messungen

Für die Charakterisierung der Emission des QWs wurde die Photolumineszenz der Proben A und B temperaturabhängig aufgenommen. Die zugehörigen Spektren sind in den Abbildungen 6.2 und 6.3 dargestellt. Die Temperatur wurde hierfür zwischen 8 K und 295 K variiert und der QW zeigt ein Signal im Bereich um eine Energie von 2.75 eV. Um die Übergangsenergie des QWs zu ermitteln, wird das Spektrum in diesem Bereich mit Hilfe von zwei Normalverteilungen angepasst. Der höherenergetische Beitrag entspricht hierbei dem eigentlichen Signal des QWs, wohingegen es sich beim niederenergetischen Beitrag um einen strahlenden Übergang mit einem beteiligten Phonon handelt. Sichtbare Phononen in InGaN/GaN-QWs wurden in der Literatur häufig beobachtet und resultieren aus der Kopplung von Exzitonen und Phononen [125, 126]. Bei tiefen Temperaturen ($T < 80$ K) sind bis zu drei Phononen-Beiträge zu erkennen. Bei einer Anpassung mit drei zugehörigen Normalverteilungen ist festzustellen, dass die energetische Lage der niederenergetischen Beiträge jeweils um ein Vielfaches von ≈ 0.09 eV vom Hauptsignal entfernt ist. Dies ist vergleichbar mit der Energie von longitudinal-optischen Phononen im GaN [126, 127, 128]. Beim Material InGaN wird eine ähnliche Phononenenergie wie im GaN erwartet.

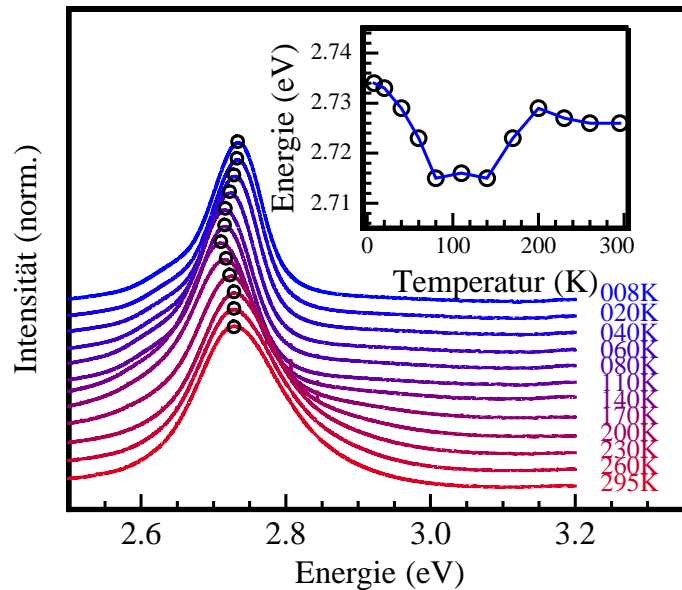


Abb. 6.2: Temperaturabhängige Photolumineszenz-Spektren im Bereich des QWs für die Probe A im Temperaturbereich zwischen 8 K und 295 K. Eingefügtes Bild: Darstellung der durch Anpassung mit zwei Normalverteilungen ermittelten Übergangsenergie des Hauptsignals.

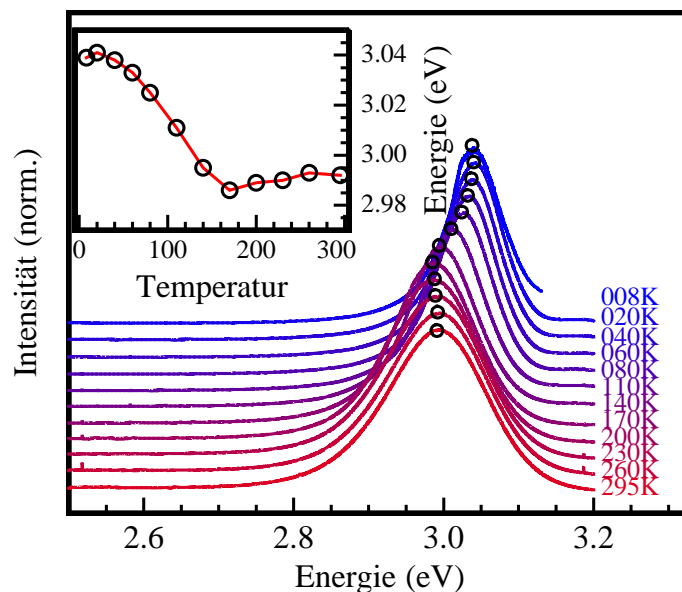


Abb. 6.3: Temperaturabhängige Photolumineszenz-Spektren im Bereich des QWs für die Probe B. Eingefügtes Bild: Darstellung der durch Anpassung mit zwei Normalverteilungen ermittelte Übergangsenergie des Hauptsignals.

Dies liegt daran, dass der Indiumgehalt der Proben sehr niedrig ist und die Phononenenergie von InN mit $\approx E = 0.07$ eV vergleichbar hoch ist [129]. Die Übergangsenergie der beiden Proben (siehe eingefügtes Bild in Abbildung 6.2 und 6.3) weist für die Probe A (B) im Temperaturbereich zwischen 8 K und 80 K (8 K und 170 K) eine Rotverschiebung

auf. Im Temperaturbereich zwischen 80 K und 210 K (170 K, 260 K) folgt eine Blauverschiebung und zwischen 210 K und 295 K (bei 295 K) eine erneute Rotverschiebung. Im Bereich zwischen 8 K und 80 K wäre die zu erwartende Bandkantenverschiebung aufgrund der Temperaturänderung nur wenige meV groß, dahingegen beträgt die beobachtete Energieverschiebung für die Probe A 19 meV und für die Probe B 14 meV. Somit ist zu erwarten, dass weitere Prozesse diese Energieverschiebung verursachen, wobei bei dem angesprochenen Temperaturverlauf in der Literatur von einem s-förmigen (engl. s-shape) Verhalten gesprochen wird. Als Ursache für den s-shape werden häufig Potentialfluktuationen angegeben. Zwei mögliche Erklärungen sind ein lokal unterschiedlicher Indiumgehalt oder eine gewisse Oberflächenrauigkeit der aktiven Schicht [130, 131]. Durch die Potentialfluktuationen können je nach thermischer Energie der Ladungsträger entweder niederenergetische oder aber höherenergetische Übergänge stattfinden. Diese verursachen damit im Temperaturverlauf das s-förmige Verhalten der Übergangsenergie des QWs.

6.1.3 Kontaktierte Photolumineszenz-Messungen

Über das Anlegen einer Spannung an die auf den Proben angebrachten Kontakte lässt sich die elektrische Feldstärke in der RLZ verändern. Dies hat einen direkten Einfluss auf die gemessenen Photolumineszenz-Spektren. Unter anderem ändert sich z.B. die Übergangswahrscheinlichkeit, aber auch die für die strahlende Rekombination zur Verfügung stehende Anzahl von angeregten Ladungsträgern. Dies drückt sich direkt in der Intensität der Photolumineszenz aus. Um das bisher beobachtete Verhalten in der I-U-Charakteristik der Probe A näher zu untersuchen, wurde die Photolumineszenz spannungsabhängig für die Polarisationsrichtung $E \perp c$ bei Raumtemperatur aufgenommen. Die Messwerte sind in Abbildung 6.4 im Spannungsbereich zwischen +2 V und -10 V dargestellt. Eine sinkende Spannung führt zu einer niedrigeren Intensität der Photolumineszenz (siehe 6.4 Bild rechts). Es zeigt sich ein gegensätzliches Verhalten der Intensität der Photolumineszenz im Vergleich zur I-U-Charakteristik der pin-Diode. Die im QW erzeugten Ladungsträger können entweder strahlend oder nicht strahlend rekombinieren oder gelangen zu den Kontakten. Nimmt die Anzahl der zu den Kontakten gelangenden Ladungsträger zu, so verbleiben im QW weniger Ladungsträger die strahlend rekombinieren können. Ändert sich der gemessene Strom nur geringfügig, so bleibt auch die zugehörige Photolumineszenz-Intensität nahezu konstant. Dieses Verhalten wird auch in der Literatur z.B. in den Arbeiten von Yang *et al.* [132] und Choi *et al.* [111] beobachtet.

Die im Spannungsverlauf erkennbaren Stufen sind in beiden Messungen bei den gleichen Spannungen sichtbar. In der Literatur werden solche Stufen unterschiedlich erklärt. Zum Beispiel werden von Baranovskiy *et al.* [133] pn-Dioden mit InGaN/GaN-MQWs untersucht. Diese zeigen in spannungsabhängigen Photostromuntersuchungen ebenfalls Stufen und die freie Ladungsträgerkonzentration, die aus Kapazitätsmessungen ermittelt wird,

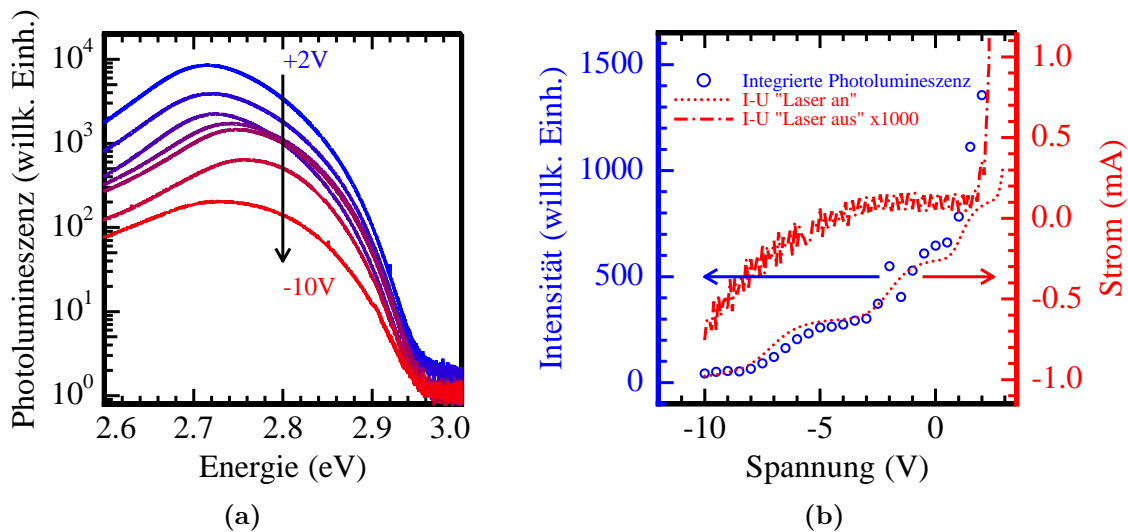


Abb. 6.4: Links: Spannungsabhängige Photolumineszenzspektren im Bereich des QWs. Die angelegte Spannung wurde zwischen +2 V und -10 V in 0.5 V Schritten variiert. Zur besseren Sichtbarkeit der Spektren wurden diese im Abstand von 2 V dargestellt. Rechts: Integrierte Intensität der Photolumineszenz in Abhängigkeit von der Spannung in Blau. Im Vergleich dazu die gemessene I-U-Kennlinie mit und ohne Bestrahlung des Kontaktes mit dem Laser ($\lambda = 266$ nm, $W = 50$ mW).

zeigt an der Position der QWs deutliche Peaks auf. Diese werden auf eine spannungsabhängige Verschiebung der Raumladungszone durch die Struktur zurückgeführt. Hierbei werden je nach Spannung die unterschiedlichen QWs erreicht und damit die zugehörigen dort erzeugten Ladungsträger messbar. Dies trifft bei den in dieser Arbeit untersuchten Proben nicht zu, da es sich bei diesen um pin-Dioden handelt. Die QWs liegen damit im gesamten Spannungsbereich in der Raumladungszone. Eine mögliche Erklärung für dieses Verhalten besteht im resonanten Tunneln zwischen verschiedenen Energieniveaus der unterschiedlichen QWs [134]. Das resonante Tunneln setzt dann ein, wenn z.B. zwei Energieniveaus unterschiedlicher QWs durch eine veränderte elektrische Feldstärke in der Raumladungszone die gleiche Energie aufweisen. Dies führt dann in der Folge zu einer größeren Tunnelwahrscheinlichkeit und damit auch zu einem größeren Tunnelstrom. Damit ergibt sich ein stärkerer Anstieg im spannungsabhängigen Photostrom in Rückwärtsrichtung.

6.2 Elektrolumineszenz

Um weitere Informationen über die Bandstruktur der Proben A und B zu erhalten, wurden polarisations- und spannungsabhängige Elektrolumineszenzmessungen durchgeführt. Diese werden in der Literatur genutzt, um Größen wie die Energiedifferenz zwischen den beiden obersten Valenzbändern oder auch den Polarisationsgrad zu ermitteln. Der Polarisationsgrad spielt unter anderem eine bedeutende Rolle für die Realisierung von LEDs in Flüssigkristalldisplays [135] und kann durch die Intensität der verschiedenen Polarisations-

richtungen mit Hilfe von Gleichung

$$\rho = \frac{I_{E \perp c} - I_{E \parallel c'}}{I_{E \perp c} + I_{E \parallel c'}} \quad (6.1)$$

ermittelt werden. Hierbei entspricht $I_{E \perp c}$ ($I_{E \parallel c'}$) der integrierten Intensität des EL-Spektrums bei Polarisation $E \perp c$ ($E \parallel c'$).

Im Folgenden werden die angesprochene Energiedifferenz und der Polarisationsgrad der beiden Proben ermittelt. Die Stromstärke wurde bei beiden Proben zu 2 mA gewählt und die zugehörigen Spektren sind in Abbildung 6.5 dargestellt.

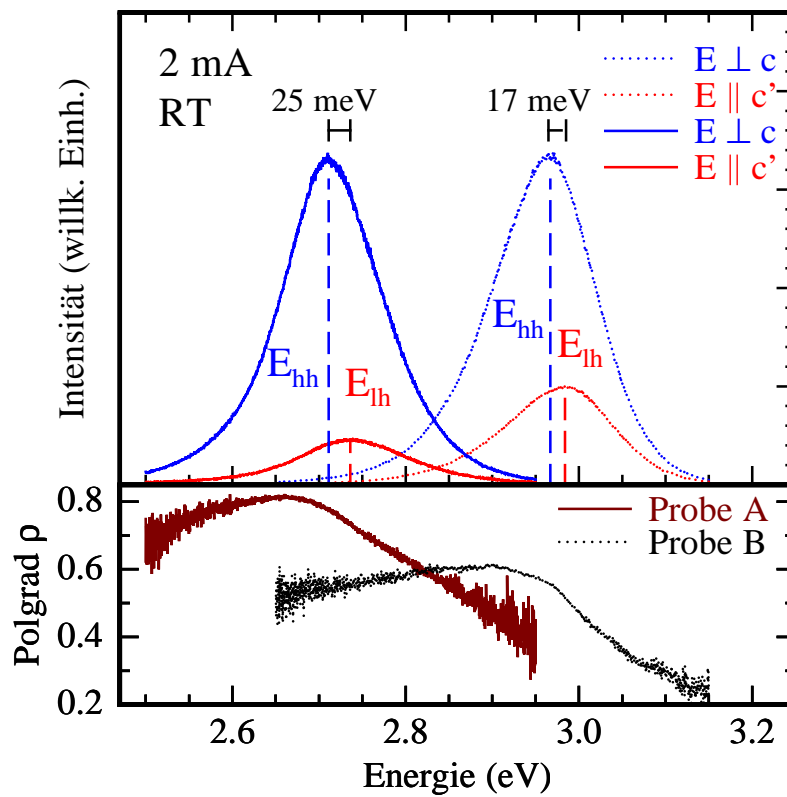


Abb. 6.5: Oberes Bild: Polarisationsabhängige Elektrolumineszenz der Proben A (durchgezogene Linie) und B (gepunktete Linie) bei einer Stromstärke von 2 mA. Die Maxima der Übergänge sind gestrichelt markiert. Für eine bessere Probenvergleichbarkeit wurden beide Spektren der Probe A mit einem gemeinsamen Faktor so multipliziert, dass die zu $E \perp c$ gehörenden Spektren die gleiche Höhe besitzen. Unteres Bild: Darstellung des spektralen Polarisationsgrades der Proben A und B.

Beide Proben zeigen eine starke Polarisationsabhängigkeit. Aus Abbildung 6.5 geht hervor, dass sich die Polarisationsrichtungen sowohl durch die Intensität des Spektrums als auch durch die energetische Position unterscheiden. Der Polarisationsgrad ergibt sich für die Probe A und Probe B nach Gleichung 6.1 für die dargestellten Spektren zu $\rho = 0.75$ bzw. $\rho = 0.49$. In der Literatur wird der Polarisationsgrad für Emissionsmessungen an (20 $\bar{2}1$) ori-

entierten Proben sehr unterschiedlich angegeben. Dies liegt daran, dass dieser von Größen wie der QW-Breite, dem Indium-Gehalt und der Verzerrung der aktiven Schicht abhängt [135, 136]. Beispiele von ermittelten Polarisationsgraden mit einer $(20\bar{2}\bar{1})$ Orientierung sind in der Literatur verfügbar. So ergaben Rechnungen von Huang *et al.* [137] und Yamaguchi *et al.* [136] einen Polarisationsgrad von $\rho = 0.6$ für Proben mit einem Indiumgehalt von $x_{\text{In}} = 0.24$ bzw. $x_{\text{In}} = 0.27$. Experimentelle Arbeiten von Marcinkevičius *et al.* [135] lieferten dagegen einen Polarisationsgrad von $\rho = 0.82$ in PL ($x_{\text{In}} = 0.24$) bzw. von Zhao *et al.* [138] von $\rho = 0.55$ in EL (Emissionswellenlänge $\lambda \approx 440$ nm). Weitere Arbeiten von Mounir *et al.* [139] und Schade *et al.* [140] lieferten $\rho \approx 0.79$ in μ PL ($x_{\text{In}} = 0.18$) und $\rho = 0.61$ in EL ($x_{\text{In}} = 0.10$). Der ermittelte Polarisationsgrad der Probe A liegt damit höher, als für eine Probe mit $(20\bar{2}\bar{1})$ Orientierung und $x_{\text{In}} = 0.182$ theoretisch erwartet, aber in der gleichen Größenordnung wie in der experimentellen Arbeit von S. Marcinkevičius und C. Mounir *et al.*. Für die $(20\bar{2}\bar{1})$ Orientierung sind durch die Arbeit von Kyono *et al.* Polarisationsgrade von $\rho = 0.2 - 0.3$, bei einer EL-Emissionswellenlänge zwischen 400 – 500 nm bekannt [141]. Eine weitere Arbeit von Chung *et al.* [142] berichtet von einem Polarisationsgrad zwischen 0.4 und 0.5 bei EL Emissionswellenlängen von 469 – 528 nm. Theoretische Berechnungen zum Polarisationsgrad von $(20\bar{2}\bar{1})$ und $(20\bar{2}\bar{1})$ orientierten InGa_N/Ga_N-QWs weisen im Allgemeinen keinen Unterschied auf, da der Verspannungszustand bei gleichem Indiumgehalt als identisch angenommen wird. Der erhebliche Unterschied im Polarisationsgrad zwischen beiden Orientierungen ist bisher noch nicht abschließend geklärt. Eine mögliche Ursache ist, dass beide Orientierungen eine mikroskopisch unterschiedliche Struktur und damit ein verändertes Indium-Profil aufweisen [138]. Eine aktuelle Arbeit von Mounir *et al.* [143] beschäftigt sich detailliert mit diesem Phänomen und gibt zahlreiche mögliche Erklärungen.

Bei diesen handelt es sich um:

- Unterschiedliche effektive Verbreiterungen der Valenzband-Struktur aufgrund einer rauerer Oberfläche des QWs in $(20\bar{2}\bar{1})$ Orientierung
- Verschieden starke Lokalisierung von Löchern in beiden Orientierungen
- Unterschiedliches Verhalten von Löchern an den Oberflächen des QWs in $(20\bar{2}\bar{1})$ und $(20\bar{2}\bar{1})$ Orientierung aufgrund der unterschiedlichen Polarisationsfelder

Die genannten Polarisationsfelder haben einen starken Einfluss auf das Emissionsverhalten der Proben und erfahren deshalb über spannungsabhängige EL-Messungen in diesem Kapitel besondere Aufmerksamkeit.

Im unteren Bild der Abbildung 6.5 ist der spektrale Polarisationsgrad für beide Proben dargestellt. Dieser hat sein Maximum leicht unterhalb des eigentlichen Emissionsmaximums der polarisationsabhängigen Spektren und fällt bei der Hochenergieflanke deutlich ab. Eine

mögliche Erklärung wird in der Arbeit von Schade *et al.* [140] angegeben. Die dort untersuchte Probe ist auf der $(10\bar{1}2)$ Orientierung mit einem Verkippungswinkel zur c -Achse von $\theta = 43.2^\circ$ gewachsen. Das Verhalten ist vergleichbar mit dem der Proben A und B aus Abbildung 6.5. Schade *et al.* erklären das angesprochene Verhalten des spektralen Polarisationsgrades dadurch, dass unterschiedliche Gebiete der Probe einen unterschiedlichen Indium-Gehalt besitzen und damit zum Emissionsspektrum beitragen. Auf der Niederenergieflanke des Spektrums emittieren Bereiche mit höherem Indium-Gehalt, wohingegen die Hochenergieflanke von Gebieten mit niedrigerem Indium-Gehalt gebildet wird. Aus $k \cdot p$ -Rechnungen ist ein steigender Polarisationsgrad mit steigendem Indiumgehalt bekannt und in zahlreichen Arbeiten veröffentlicht. Bei den hier vorliegenden Proben sind Indium Fluktuationen bereits in den unpolarisierten, temperaturabhängigen Messungen als mögliche Ursache für das s-förmige Verhalten der Übergangsenergie vermutet wurden und kommen deshalb auch für diese Orientierung bzw. Probe in Frage.

Zusätzlich zu dem bisher diskutierten Polarisationsgrad fällt die vorher angesprochene Aufspaltung der Übergangsenergie für die beiden Polarisationsrichtungen auf (siehe Abbildung 6.5). Für die Probe A ergibt sich eine Aufspaltung von $\Delta E = 25$ meV, wohingegen diese bei der Probe B $\Delta E = 17$ meV beträgt. Das der Polarisationsgrad bei Proben mit größerer energetischer Aufspaltung größer ist, wird ebenfalls bei Proben aus der Literatur beobachtet [144]. Nach Rechnungen von Mounir *et al.* [143] beträgt die Aufspaltung $\Delta E = 26$ meV für eine $(20\bar{2}1)$ Probe mit einem Indiumgehalt von $x_{\text{In}} = 0.18$ und einer QW-Breite von $d_{\text{QW}} = 4$ nm. Zhao *et al.* [138] berichten von $\Delta E \approx 38$ meV bei $x_{\text{In}} = 0.18$ und $d_{\text{QW}} = 3$ nm. Weitere Untersuchungen von Marcinkevičius *et al.* [135] ermittelten in PL ein $\Delta E = 32$ meV bzw. $\Delta E = 30$ meV bei $x_{\text{In}} = 0.24$ und $d_{\text{QW}} = 3$ nm. Damit liegt die ermittelte Aufspaltung des Valenzbandes für die Probe A leicht unterhalb von bekannten Werten aus der Literatur. Für die Probe B, die die Orientierung $(20\bar{2}1)$ aufweist, sind für Proben mit einer Emissionswellenlänge zwischen 470 – 528 nm typische Valenzbandabstände im Bereich zwischen $\Delta E = 5 - 15$ meV [142]. Hierbei handelte es sich um Proben mit InGaN- bzw. AlGaN-Barrieren. Theoretische Berechnungen von Schade [145] ergeben einen Valenzbandabstand von $\Delta E \approx 22$ meV für eine $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ -Probe. Bei Proben mit GaN-Barrieren, untersucht von z.B. Zhao *et al.* [138], zeigen die Aufspaltungen der Valenzbänder nahezu keine Abhängigkeit von der Emissionswellenlänge. Dort wurde ein $\Delta E \approx 15$ meV angegeben. Diese Energiedifferenz ist mit dem in dieser Arbeit ermittelten Wert von $\Delta E = 17$ meV vergleichbar.

Die Halbwertsbreite der dargestellten Spektren ist bei beiden Polarisationsrichtungen und Proben sehr ähnlich. Sie beträgt für die Probe A 138 meV für $E \perp c$ und 153 meV für $E \parallel c'$ und bei der Probe B 141 meV für $E \perp c$ und 146 meV für $E \parallel c'$. Dies ist nahezu identisch zu bekannten Halbwertsbreiten für Emissionsmessungen aus der Literatur bei vergleichbaren Proben im zugehörigen Spektralbereich [146, 138] und legt eine ähnliche Materialqualität der untersuchten Proben nahe.

6.2.1 Spannungsabhängige Elektrolumineszenz

Für ein tieferes Verständnis des Einflusses der angelegten Spannung bzw. des Stroms und damit der Polarisationsfelder auf die Emissionseigenschaften der Proben wurden diese beiden Größen verändert und die zugehörigen EL-Spektren polarisationsabhängig aufgenommen. Die hierfür durchgeführten Messungen erfolgten bei Raumtemperatur. Die dabei verwendete Stromstärke wurde zwischen 0.8 mA und 50 mA variiert. Der zugehörige Spannungsbereich lag zwischen 2.50 V und 4.61 V. Die Spektren sind in den Abbildungen 6.6 und 6.7 dargestellt. Für die Beschreibung der Elektrolumineszenz bei einer Temperatur von 295 K wurde eine Anpassung mit einer einzelnen Normalverteilung verwendet. Die darüber bestimmte Energieposition ist im oberen Bild von Abbildung 6.8 für die Probe A und in Abbildung 6.9 für die Probe B dargestellt.

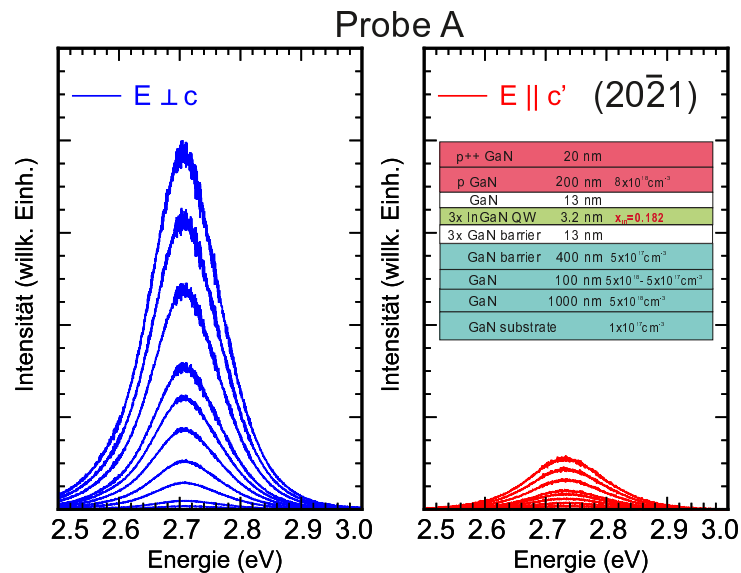


Abb. 6.6: Polarisationsabhängige Elektrolumineszenz der Probe A. Vom untersten zum obersten Spektrum wurde der Strom (die Spannung) in folgenden Schritten variiert: 0.8 mA (2.5 V), 2 mA (3.2 V), 3 mA (3.38 V), 5 mA (3.61 V), 8 mA (3.77 V), 12 mA (3.92 V), 16 mA (4.03 V), 20 mA (4.12 V), 30 mA (4.32 V), 40 mA (4.48 V) und 50 mA (4.61 V).

Im Folgenden werden zuerst die dargestellten Ergebnisse der Probe A betrachtet. Die Übergangsenergie verringert sich bei Änderung der Spannungen von 2.5 V bis 3.3 V um 9 meV bzw. 6 meV für die Polarisationsrichtungen $E \perp c$ und $E \parallel c'$. Bei höheren Spannungen als 3.3 V erfolgt nahezu keine energetische Verschiebung mehr. Die Verringerung der Übergangsenergie mit steigender Spannung bzw. Strom in der EL ist in der Literatur aus theoretischen Betrachtungen von InGaN/GaN-Strukturen auf c-orientierten Substraten bekannt [147, 148]. Experimentelle Arbeiten stellen häufig eine Erhöhung der Übergangsenergie mit steigender Spannung bzw. Strom fest. Für diese Erhöhung werden strahlende Übergänge durch lokalisierte Ladungsträger im QW verantwortlich gemacht, die bei höheren Ladungsträgerdichten zum Spektrum beitragen. Aufgrund des konträren beobachteten

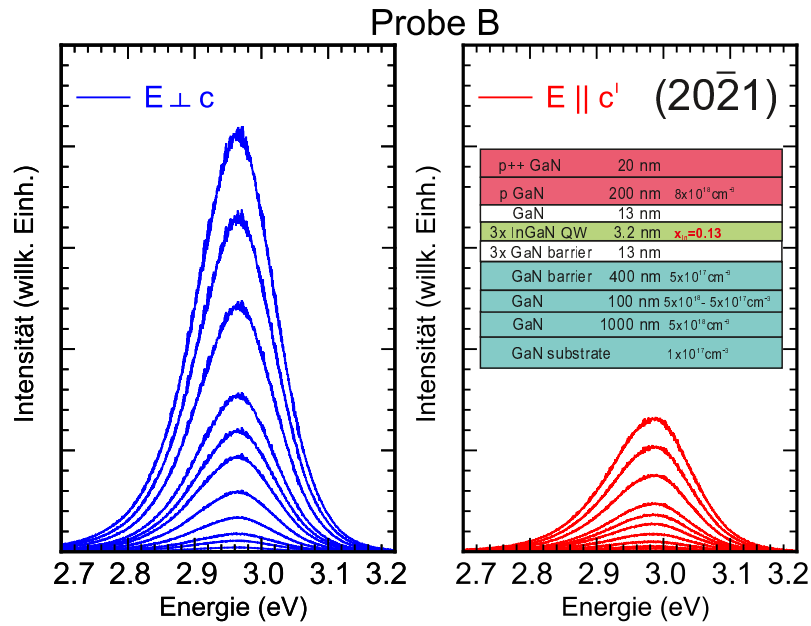


Abb. 6.7: Polarisationsabhängige Elektrolumineszenz der Probe B. Vom untersten zum obersten Spektrum wurde der Strom (die Spannung) in folgenden Schritten variiert: 0.8 mA (3.2 V), 2 mA (3.39 V), 3 mA (3.46 V), 5 mA (3.58 V), 8 mA (3.68 V), 12 mA (3.77 V), 16 mA (3.83 V), 20 mA (3.87 V), 30 mA (4.03 V), 40 mA (4.12 V) und 50 mA (4.30 V).

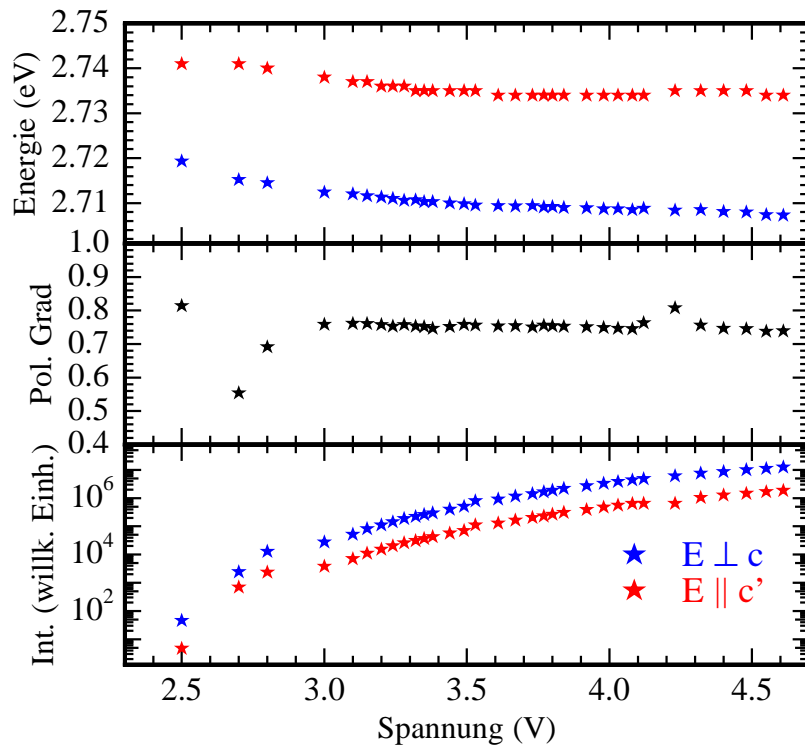


Abb. 6.8: Spannungs- und polarisationsabhängige Übergangsenergie (oberes Bild), Polarisationsgrad (mittleres Bild) und integrierte Gesamtintensität der Probe A aus der Elektrolumineszenz bei einer Temperatur von 295 K.

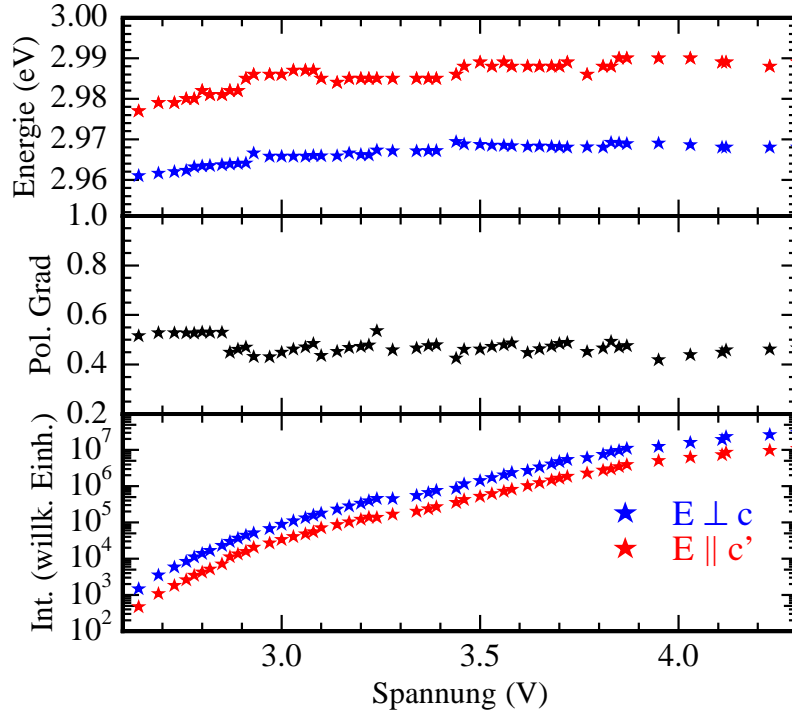


Abb. 6.9: Spannungs- und polarisationsabhängige Übergangsenergie (oberes Bild), Polarisationsgrad (mittleres Bild) und integrierte Gesamtintensität der Probe B aus der Elektrolumineszenz bei einer Temperatur von 295 K.

Verhaltens sollte mindestens eine weitere Ursache vorliegen. Hierbei könnte es sich um eine Kombination aus dem genannten Einfluss der Ladungsträger und des elektrischen Feldes handeln. Dieses führt durch den QCSE zu einer Verringerung der Übergangsenergie bei Vergrößerung des elektrischen Feldes. Bei der Probe A ist die Spannung für den Flachbandfall nach Kapitel 4 $V_{FB} \approx +1$ V. Damit verursacht eine weitere Erhöhung der Spannung eine größere elektrische Feldstärke im QW und kommt als Ursache für die Verringerung der Übergangsenergie bei steigender Spannung in Frage. Das elektrische Feld scheint somit im niedrigen Spannungsbereich (2.5 V bis 3.3 V) für diese Probe den dominierenden Effekt für die Verringerung der Übergangsenergie darzustellen. Für den Bereich von höheren Spannungen bewirkt die dann steigende Ladungsträgerkonzentration eine Abschirmung und damit Abschwächung des elektrischen Feldes und bewirkt eine nahezu unveränderte Übergangsenergie. Bei der Probe B führt eine steigende Spannung zu einer Erhöhung der Übergangsenergie. Auch hier wird eine Kombination der beiden angesprochenen Effekte als Ursache vermutet. Das Polarisationsfeld ist im Vergleich zur Probe A allerdings entgegengesetzt und der Flachbandfall sollte erst bei Spannungen von $U_{FB} \approx 4.6$ V eintreten. Der Wert von $U_{FB} = 4.6$ V wurde durch die Verwendung von Gleichung 3.1 ermittelt. Eine Erhöhung der Spannung bewirkt also im Bereich zwischen 2.64 V und 3.5 V sowohl eine Verringerung des elektrischen Feldes und damit durch den QCSE eine Erhöhung der Übergangsenergie, als auch eine zu erwartende Erhöhung der Übergangsenergie aufgrund

der Auffüllung von lokalisierten Zuständen im QW. Die Verschiebung der Übergangsenergie beträgt im angesprochenen Spannungsbereich $\Delta E = 12$ meV bzw. $\Delta E = 9$ meV für die Polarisationsrichtungen $E \perp c$ bzw. $E \parallel c'$. Die energetische Verschiebung mit steigender Spannung ist häufig bei c -orientierten Proben [149, 150] größer als bei Proben mit semipolarer Orientierung (z.B. $(11\bar{2}2)$ und $(10\bar{1}\bar{3})$) [142, 149, 151]. Zur Probe B vergleichbare Probenstrukturen aus den Referenzen [142, 152] mit $(20\bar{2}1)$ Orientierung und einer Emissionswellenlänge von 470 nm bzw. 512 nm liefern $\Delta E \approx 13$ meV bzw. $\Delta E \approx 34$ meV. Der Polarisationsgrad im mittleren Bild von Abbildung 6.8 ist mit Ausnahme des niedrigen Spannungsbereich (2.5 V-2.8 V nahezu konstant. Allerdings war bei niedrigerer Spannung die EL-Intensität des $E \parallel c'$ polarisierten Lichtes sehr klein, was eine mögliche Ursache für die Variation des Polarisationsgrades bei niedriger Spannungen darstellt. Die Konstanz des Polarisationsgrades wurde bei beiden Proben mit steigender Spannung beobachtet und entspricht damit Ergebnissen aus der Literatur [142, 107]. Zur Vollständigkeit wurden die polarisationsabhängigen Intensitäten, die für die Ermittlung des Polarisationsgrades benötigt wurden, in Abhängigkeit von der Spannung im unteren Bild von Abbildung 6.8 und Abbildung 6.9 dargestellt. Mit steigender Vorwärtsspannung gelangt eine immer größere Menge an Ladungsträgern in die aktive Zone der LED und führt zu einer steigenden Intensität der Emission für beide Polarisationsrichtungen.

7 Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit war die optische Charakterisierung von Nitridhalbleitern mit InGaN/GaN-QW-Strukturen, wobei im Speziellen Strukturen mit semipolarer Orientierung untersucht wurden. Bei der Wahl der Untersuchungsmethoden wurde ein besonderes Augenmerk auf die absorptionskorrelierte Messmethode der ER gelegt. Diese Messmethode bietet den Vorteil, dass die Bandstruktur und der Einfluss des elektrischen Feldes auf die Eigenschaften von LEDs besonders genau und mit nur geringfügiger Überlagerung von Ladungsträgerreflektoren beobachtet werden können. Damit ermöglicht die ER einen besseren Einblick in die grundlegenden Eigenschaften der Proben im Vergleich mit den ebenfalls durchgeführten Emissionsmessungen, wie der spannungsabhängigen Elektrolumineszenz, die als häufig in der Literatur verwendete Charakterisierungsmethode zum Vergleich herangezogen wurden.

Der Hauptteil der Arbeit befasst sich mit den ER-Messungen. Zu Beginn wurden die messtechnischen Grundlagen der Methode erklärt. Hierauf wurde der zur Messung verwendete Messplatz untersucht. Verschiedene Verfahren der Messwerterfassung wurden dargestellt, wobei sich die Mittelwertbildung der durch den Lock-in-Verstärker gemessenen Werte als bestes Verfahren herausstellte. Anschließend wurden die durch ER erzielten Messdaten vorgestellt. Diese zeichnen sich dadurch aus, dass sie polarisationsabhängig und in einem großen Spannungsbereich (im Bereich von -10 V bis zu $+2.5$ V) aufgenommen wurden. Die vorgestellten Messdaten sind für die beiden untersuchten semipolaren Orientierungen $(20\bar{2}1)$ und $(20\bar{2}1)$ weltweit bislang einzigartig. Für die Beschreibung der Spektren wurde als Grundlage ein analytisches Schichtmodell von Shields *et al.* [9] verwendet. Eingangsgröße für dieses Modell ist unter anderem die dielektrische Funktion. Der Imaginärteil der dielektrischen Funktion wird als einfache Stufenfunktion angenommen und der Realteil mit Hilfe der Kramers-Kronig-Transformation ermittelt. Trotz dieser verhältnismäßig einfachen Annahme über die dielektrische Funktion, gelang eine noch bessere Linienanpassung des Grundzustandes des QWs, als mit der häufig in der Literatur verwendeten Methode nach Aspnes. Durch die Anpassung der Spektren wurde im gesamten Spannungsbereich die Übergangsenergie des Grundzustandes ermittelt. Dies wurde für die beiden Polarisationsrichtungen $E \perp c$ und $E \parallel c'$ durchgeführt, wobei die Übergangsenergie-differenz (engl. splitting) für die $(20\bar{2}1)$ bzw. $(20\bar{2}1)$ orientierte Probe einen Wert von bis zu $\Delta E = 54$ meV bzw. $\Delta E = 5$ meV aufwies. Bisher angegebene Erklärungen, wie z.B. eine Indiumkompositionsschwankung innerhalb des QWs [138], lassen sich auf die ER nicht übertragen und stellen damit keine Begründung einer polarisationsabhängigen Aufspaltung der Übergangsenergie dar. Untersuchungen zum Einfluss der Nichtparabolizität der Valenzbänder, als Ursache der gemessenen Aufspaltungsdifferenz, erklären nur einen geringfügigen Anteil (10 %) dieser Aufspaltung und lassen Raum für weitere Untersuchungen an Proben dieser Orientierung.

Durch die Anpassung der spannungs- und polarisationsabhängigen Absorptionsspektren der Elektreflexion wurden in einem großen Spannungsbereich (maximal von -10 V bis zu $+2.5$ V) die Übergangsenergien des QWs bestimmt. Diese konnten zu verschiedenen Valenzbändern zugeordnet werden und der zugehörige vergleichbare spannungsabhängige Verlauf der Übergangsenergien legt eine ähnliche effektive Masse der beteiligten Valenzbänder nahe. Unter Verwendung der ermittelten Übergangsenergien wurde die Flachbandspannung (für Probe A $U_{FB} = +1$ V) ermittelt. Bei der Probe B mit $(20\bar{2}1)$ Orientierung ist dies nicht gelungen, da die Flachbandspannung oberhalb der Durchlassspannung der Diode liegt. Die Flachbandspannung der Probe A ($+1$ V) wurde verwendet, um das Polarisationsfeld innerhalb des QWs zu ermitteln ($F_{pol} = -458$ kV/cm). Dieses stellt nach Wissen des Autors den ersten experimentell ermittelten Wert für das Polarisationsfeld einer $(20\bar{2}1)$ orientierten Probe dar. Beim Vergleich zu der nach Romanov *et al.* theoretisch erwarteten Polarisationsfeldstärke fällt auf, dass diese je nach verwendetem Parametersatz für die piezoelektrischen Konstanten gravierende Unterschiede aufweist. In dieser Arbeit wurde eine Vielzahl von in der Literatur verfügbaren experimentell ermittelten Polarisationsfeldstärken genutzt, um zusammen mit der Methode nach Romanov *et al.* einen Parametersatz von piezoelektrischen Konstanten auf Grundlage von experimentellen Ergebnissen abzuleiten. Es wurde gezeigt, dass der Einfluss des Tensorelements e_{33} nur einen untergeordneten Einfluss auf die Polarisationsfeldstärke aufweist. Die abgeleiteten Tensorelemente e_{31} und e_{15} wurden in Abhängigkeit von einem variablen Tensorelement e_{33} bestimmt. Beispielfhaft ergaben sich für den von Bykhovsky *et al.* ermittelten Wert von $e_{33} = 0.43$ C/cm² ein $e_{31} = -0.19$ C/cm² und ein $e_{15} = -0.16$ C/cm². Der von Bykhovsky *et al.* ermittelte Parametersatz [86], mit der Annahme der quasikubischen Näherung $e_{31} = e_{33}$, zeigt mit dem in dieser Arbeit experimentell bestimmten Polarisationsfeld für die $(20\bar{2}1)$ orientierte Probe die beste Übereinstimmung, wohingegen die Gesamtheit der aus der Literatur verwendeten Polarisationsfelder bestmöglichst mit dem Parametersatz von Shimada *et al.* [87] beschrieben werden kann. Zusätzlich zu dem Signal des QWs wurden die Franz-Keldyhs-Oszillationen oberhalb des GaN-Bandkantenbereichs analysiert. Deren Auswertung lieferte einen Wert für die spannungsabhängige elektrische Feldstärke in den Barrieren des QWs. Unter Verwendung des experimentell ermittelten Polarisationsfeldes des QWs wurde ebenfalls eine Barrierenfeldstärke spannungsabhängig abgeleitet. Im Vergleich zeigten die auf unterschiedliche Arten ermittelten Barrierenfeldstärken eine gute Übereinstimmung und untermauern damit die Genauigkeit der ermittelten Polarisationsfeldstärke.

Als eine weitere Messmethode wurden Photostrommessungen an den Proben durchgeführt und der verwendete Messplatz auf dessen polarisationsabhängige Eigenschaften untersucht. Für die beiden unterschiedlich orientierten Proben wurden die Photostromspektren spannungsabhängig im Bereich zwischen -7.5 V und $+2.0$ V dargestellt. Die Spektren wurden

auf Grundlage einer von Rigutti *et al.* [109] verwendeten Methode abgebildet. Hierbei wird die Absorption des QWs mit Hilfe von zwei Sigmoidalfunktionen modelliert. Das Modell ermöglicht eine außerordentlich gute Beschreibung der Linienform des Photostromsignals für alle gemessenen Spektren. Die sich ergebende polarisationsabhängige Aufspaltung zwischen den ermittelten Übergangsenergien in der ER und dem Photostrom ist vergleichbar. Ein Unterschied zeigte sich in der feldstärkeabhängigen Verschiebung der Übergangsenergie des Grundzustandes des QWs. Während dieser bei der ER deutlich und über dem gesamten Spannungsbereich zu beobachten ist, tritt dieser bei den Ergebnissen aus dem Photostrom nicht in vergleichbarem Umfang auf. Eine mögliche Ursache hierfür sind die beim Photostrom beteiligten Transportprozesse für die Ladungsträger, die eine Beobachtung dieses Effektes verhindern. Im Vergleich der beiden Messmethoden stellte sich die ER in dieser Arbeit als die geeignetere Methode für die Charakterisierung der semipolaren InGaN/GaN-MQW-Proben heraus.

Für die Charakterisierung der Emissionseigenschaften wurden die Photolumineszenz und die Elektrolumineszenz verwendet. Temperaturabhängige Messungen der Photolumineszenz an beiden Proben zeigten ein s-artiges Verhalten der Übergangsenergie des QWs. Dies weist auf vorhandene Potentialfluktuationen hin, deren Ursache z.B. in einer variablen Indiumkonzentration innerhalb des QWs liegen können. Im Anschluss wurden spannungsabhängige Photolumineszenzmessungen vorgestellt. Die spannungsabhängige integrierte Gesamtintensität der Photolumineszenz zeigt einen stufenförmigen Anstieg bei kontinuierlicher Erhöhung der Spannung. Dieses Verhalten ist konsistent mit ebenfalls durchgeführten Messungen der Kennlinie der Proben, bei gleichzeitiger Bestrahlung des Kontaktes mit einem 266 nm Laser. Hierbei konnten die konkurrierenden Prozesse wie der Transport der Ladungsträger zu den Kontakten und die Rekombination der Ladungsträger veranschaulicht werden. Zusätzlich weist der angesprochene stufenförmige Anstieg des Stroms bzw. die gleichzeitig stufenförmig abnehmende Photolumineszenzintensität auf ein resonantes Tunneln zwischen den aktiven Schichten über die zugehörigen Barrieren hin. Im Rahmen der Elektrolumineszenz zeigten die spannungsabhängigen Messungen deutliche Unterschiede für beide Proben. Während es bei der $(20\bar{2}\bar{1})$ orientierten Probe zu einer Verringerung der Übergangsenergie mit steigender Spannung kam, war dies bei der Probe mit $(20\bar{2}\bar{1})$ Orientierung entgegengesetzt. Dieses Verhalten liefert einen Hinweis auf die unterschiedliche Richtung des elektrischen Feldes innerhalb der Probe.

8 Anhang

8.1 Piezoelektrische Tensorelemente

Im Folgenden werden die bei der Parameterisierung des Polarisationsfeldes im QW verwendeten piezoelektrischen Tensorelemente explizit aufgeführt.

$$\begin{aligned} K_{31} &= \cos(\theta)\epsilon_{xsxs} \\ &\quad + \cos(\theta)^3\epsilon_{ysys} \\ &\quad + \cos(\theta)\sin(2\theta)\epsilon_{yszs} \end{aligned} \tag{8.1}$$

$$\begin{aligned} K_{33} &= \frac{1}{2}\sin(\theta)\sin(2\theta)\epsilon_{ysys} \\ &\quad + \frac{1}{2}\sin(\theta)\sin(2\theta)\epsilon_{zszs} \\ &\quad + \cos(\theta)^3\epsilon_{zszs} - \cos(\theta)\sin(\theta)\epsilon_{yszs} \end{aligned} \tag{8.2}$$

$$\begin{aligned} K_{15} &= -\sin(\theta)\sin(2\theta)\epsilon_{ysys} \\ &\quad + \sin(\theta)\sin(2\theta)\epsilon_{zszs} \\ &\quad + 2\sin(\theta)\cos(2\theta)\epsilon_{yszs} \end{aligned} \tag{8.3}$$

8.2 Charakterisierung durch Photolumineszenz nahe der Bandkante

In diesem Kapitel wird eine PL-Messung bei einer Temperatur von $T = 8$ K im Bereich der Bandkante des GaN und die Interpretation der zugehörigen Messsignale vorgestellt. In einem Halbleiter gibt es, je nach Materialzusammensetzung, verschiedene Energieniveaus von denen aus ein strahlender Übergang stattfinden kann. Hierbei handelt es sich z.B. um die Bandkanten, Störstellen oder die zu den Exzitonen gehörenden Energieniveaus. Einige mögliche Rekombinationsmöglichkeiten sind in Abbildung 8.1 dargestellt. Eine ausführliche Beschreibung der Übergänge ist z.B. in der Arbeit von Yu und Cardona [69] zu finden. Bei den markierten Übergängen handelt es sich um die freien Exzitonen (E_{ex}) und die gebundenen Exzitonen.

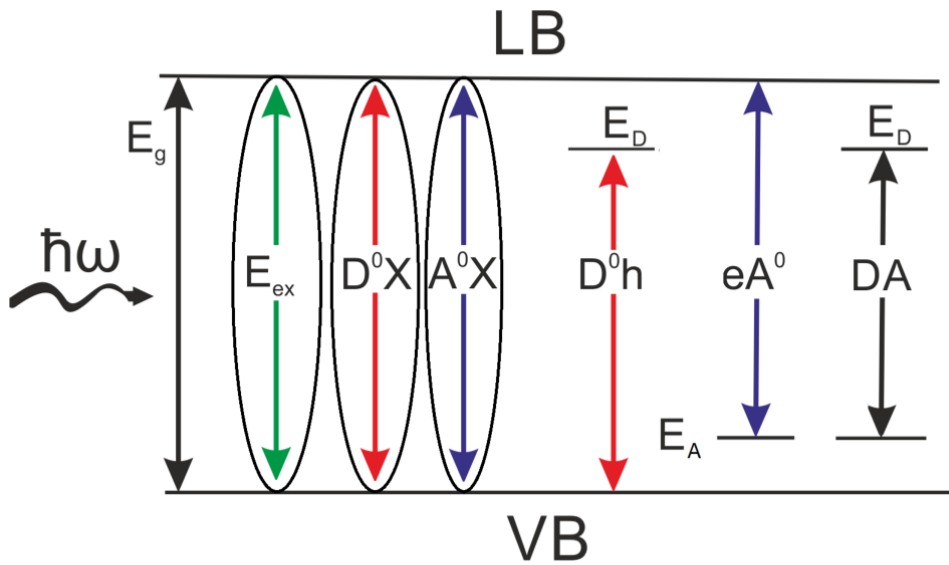


Abb. 8.1: Übersicht über verschiedene bandkantennahe Rekombinationskanäle [153].

Die gebundenen Zustände werden in Akzeptor und Donator gebundene Exzitonen (D^0X , A^0X) unterschieden. Zusätzlich sind noch weitere Übergänge zwischen dem Leitungsband bzw. Valenzband zum Donator bzw. Akzeptor (D^0h , eA^0) und zwischen Donator und Akzeptor (DA) möglich. Außerdem gibt es sogenannte Zwei-Elektronen-Satelliten (2-ES). Diese bezeichnen Übergänge, bei denen ein an einen neutralen Donator gebundenes Exziton rekombiniert und einen Donator im angeregten Zustand hinterlässt. Eine detaillierte Ausführung zu den verschiedenen Zwei-Elektronen-Satelliten von Silizium und Sauerstoff ist in der Arbeit von Paskov *et al.* zu finden [154].

Für die Charakterisierung des GaN wurde die bandkantennahe PL des GaN für die beiden semipolaren Proben gemessen. Diese Messungen entstanden vor dem Aufbringen der für die ER und EL notwendigen Kontakte und ermöglichen damit einen unverfälschten Einblick in die optischen Eigenschaften des GaN. Exemplarisch ist das PL-Spektrum für die Probe mit $x_{In} = 0.18$ bei einer Temperatur von 8 K in Abbildung 8.2 dargestellt.

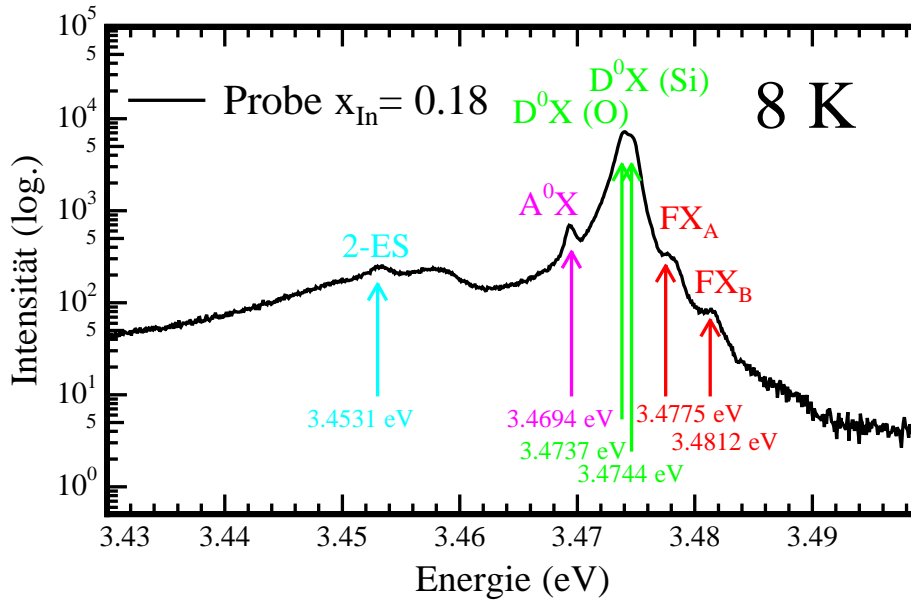


Abb. 8.2: Photolumineszenz im Bereich der GaN-Bandkante für die Probe A.

Im Spektrum lassen sich die Signale der Donator gebundenen Exzitonen an Sauerstoff (O) ($D^0X = 3.4737$ eV) und Si (Si) ($D^0X = 3.4744$ eV) als stärkste Signale erkennen. Ferner sind die freien Exzitonen FX_A und FX_B bei $E_{FX_A} = 3.4775$ eV und $E_{FX_B} = 3.4812$ eV sichtbar. Außerdem tritt ein Zwei-Elektronen-Satellit bei einer Energie von $E = 3.4531$ eV auf. Zusätzlich ist ein Akzeptor gebundenes Exziton bei $E = 3.4694$ eV zu erkennen, welches dem Magnesium zugeschrieben wird [155]. Werden die Energiepositionen mit aus der Literatur bekannten Werten für unverzerrtes GaN verglichen, so tritt lediglich eine Energieverschiebung zu höheren Energien von < 3 meV auf [155]. Das GaN kann damit als näherungsweise unverspannt angesehen werden. Vermutlich handelt es sich aufgrund der sichtbaren optischen Qualität (hochaufgelösten D_x^0) um ein Signal des undotierten GaN bzw. des Substrates.

9 Literatur

Literaturverzeichnis

- [1] H. Morkoç, S. Strite, G. B. Gao, M. E. Lin, B. Sverdlov und M. Burns, Large-band-gap SiC, III-V nitride, and II-VI ZnSe-based semiconductor device technologies, *J. Appl. Phys.* **76**, 1363 (1994).
- [2] E. N. Mokhov und A. A. Wolfson, *Single Crystals of Electronic Materials*, Elsevier, Vol. **1**, 401 (2019).
- [3] S. Nakamura und G. Fasol, *The Blue Laser Diodes*, Springer Berlin Heidelberg, Vol. **1** (1997).
- [4] S. Nakamura, M. Senoh, S.-I. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, H. Kiyoku und Y. Sugimoto, InGaN-Based Multi-Quantum-Well-Structure Laser Diodes, *Jpn. J. Appl. Phys.* **35**, L74 (1996).
- [5] C. J. Neufeld, N. G. Toledo, S. C. Cruz, M. Iza, S. P. DenBaars und U. K. Mishra, High quantum efficiency InGaN/GaN solar cells with 2.95 eV band gap, *Appl. Phys. Lett.* **93**, 143502 (2008).
- [6] M.-F. Romero, F. A. Jiménez, S. G.-P. Flores, S. M.-Horcajo, F. Calle und E. Muñoz, Impact of N₂ plasma power discharge on AlGaN/GAN HEMT performance, *IEEE Trans. Electron Devices* **59**, 374 (2012).
- [7] H. Masui, A. Chakraborty, B. A. Haskell, U. K. Mishra, J. S. Speck, S. Nakamura und S. P. DenBaars, Polarized light emission from nonpolar InGaN light-emitting diodes grown on a bulk m-plane GaN substrate, *Japan. J. Appl. Phys.* **44**, L1329 (2005).
- [8] A. E. Romanov, T. J. Baker, S. Nakamura und J. S. Speck, Strain-induced polarization in wurtzite III-nitride semipolar layers, *J. Appl. Phys.* **100**, 023522 (2006).
- [9] A. J. Shields, P. C. Klipstein und N. Apsley, Lineshape broadening and polarisation dependence of electroreflectance spectra of single quantum wells, *Semicond. Sci. Technol.* **4**, 476 (1989).
- [10] A. J. Shields und P. C. Klipstein, Line-shape model for the modulated reflectance of multiple quantum wells, *Phys. Rev. B* **43**, 9118 (1991).
- [11] S. C. Ling, T. C. Lu, S. P. Chang, J. R. Chen, H. C. Kuo und S. C. Wang, Low efficiency droop in blue-green m-plane InGaN/GaN light emitting diodes, *Appl. Phys. Lett.* **96**, 231101 (2010).

- [12] E. Kioupakis, P. Rinke, K. T. Delaney und C. G. Van de Walle, Indirect Auger recombination as a cause of efficiency droop in nitride light-emitting diodes, *Appl. Phys. Lett.* **98**, 161107 (2011).
- [13] D. F. Feezell, J. S. Speck, S. P. DenBaars und S. Nakamura, Semipolar ($20\bar{2}\bar{1}$) InGaN/GaN Light-Emitting Diodes for High-Efficiency Solid-State Lighting, *J. Display Technol.* **9**, 190 (2013).
- [14] Y. Kawaguchi, C.-Y. Huang, Y.-R. Wu, Q. Yan, C.-C. Pan, Y. Zhao, S. Tanaka, K. Fujito, D. Feezell, C. G. Van de Walle, S. P. DenBaars und S. Nakamura, Influence of polarity on carrier transport in semipolar ($20\bar{2}\bar{1}$) and ($20\bar{2}1$) multiple-quantum-well light-emitting diodes, *Appl. Phys. Lett.* **100**, 231110 (2012).
- [15] Y. Zhao, Q. Yan, C.-Y. Huang, S.-C. Huang, P. S. Hsu, S. Tanaka, C.-C. Pan, Y. Kawaguchi, K. Fujito, C. G. Van de Walle, J. S. Speck, S. P. DenBaars, S. Nakamura und D. Feezell, Indium incorporation and emission properties of nonpolar and semipolar InGaN quantum wells, *Appl. Phys. Lett.* **100**, 201108 (2012).
- [16] C. C. Pan, T. Gilbert, N. Pfaff, S. Tanaka, Y. Zhao, D. F. Feezell, J. S. Speck, S. Nakamura und S. P. DenBaars, Reduction in Thermal Droop Using Thick Single-Quantum-Well Structure in Semipolar ($20\bar{2}\bar{1}$) Blue Light-Emitting Diodes, *Appl. Phys. Express* **5**, 102103 (2012).
- [17] H. Fu, Z. Lu, X.-H. Zhao, Y.-H. Zhang, S. P. DenBaars, S. Nakamura und Y. Zhao, Study of Low-Efficiency Droop in Semipolar ($20\bar{2}\bar{1}$) InGaN Light-Emitting Diodes by Time-Resolved Photoluminescence, *J. Display Technol.* **12**, 736 (2016).
- [18] W.-S. Han, S. O. Kang und I.-H. Suh, An Easier Way to Calculate the Crystallographic Interplanar Angles, *Korean J. Crystallography* **18**, 7 (2007).
- [19] J. W. Matthews, *Dislocations in Solids*, North-Holland, Vol. **2** (1979).
- [20] G. Ju, M. Tabuchi, Y. Takeda und H. Amano, Role of threading dislocations in strain relaxation during GaInN growth monitored by real-time X-ray reflectivity, *Appl. Phys. Lett.* **110**, 262105 (2017).
- [21] A. F. Wright, Elastic properties of zinc-blende and wurtzite AlN, GaN, and InN, *J. Appl. Phys.* **82**, 2833 (1997).
- [22] M. Yamaguchi, T. Yagi, T. Sota, T. Deguchi, K. Shimada und S. Nakamura, Brillouin scattering study of bulk GaN, *J. Appl. Phys.* **85**, 8502 (1999).
- [23] A. Polian, M. Grimsditch und I. Grzegory, Elastic constants of gallium nitride, *J. Appl. Phys.* **79**, 3343 (1996).

- [24] R. B. Schwarz, K. Khachatryan und E. R. Weber, Elastic moduli of gallium nitride, *Appl. Phys. Lett.* **70**, 1122 (1997).
- [25] N. Nakamura, H. Ogi und M. Hiraio, Elastic, anelastic, and piezoelectric coefficients of GaN, *J. Appl. Phys.* **111**, 013509 (2012).
- [26] Y. Takagi, M. Ahart, T. Azuhata, T. Sota, K. Suzuki und S. Nakamura, Brillouin scattering study in the GaN epitaxial layer, *Physica B* **219**, 547 (1996).
- [27] M. Winkler, Bachelorarbeit, Institut für experimentelle Physik Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Anwendung von kp-Störungstheorie zur Beschreibung von Wurtzit-Halbleitern (2013).
- [28] L. Pauling, The nature of the chemical bond. IV. The energy of single bonds and the relative electronegativity of atoms, *J. Amer. Chem. Soc.* **54**, 3570 (1932).
- [29] L. Pauling, The Nature of the chemical bond, Cornell Univ. Press, Vol. **3** (1939).
- [30] A. L. Allred, Electronegativity values from thermochemical data, *J. Inorg. Nucl. Chem.* **17**, 215 (1961).
- [31] C. Buchheim, Dissertation, Institut für Physik Technische Universität Ilmenau, Dielektrische Funktion und elektrooptische Eigenschaften von (Al,Ga)N/GaN-Heterostrukturen (2010).
- [32] F. Bernardini, V. Fiorentini und D. Vanderbilt, Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides, *Phys. Rev. B* **56**, R10024 (1997).
- [33] F. Bernardini, V. Fiorentini und D. Vanderbilt, Accurate calculation of polarization-related quantities in semiconductors, *Phys. Rev. B* **63**, 193201 (2001).
- [34] S. Y. Karpov, Spontaneous polarization in III-nitride materials: crystallographic revision, *Phys. Status Solidi C* **7**, 1841 (2010).
- [35] J. Lähnemann, O. Brandt, U. Jahn, C. Pfüller, C. Roder, P. Dogan, F. Grosse, A. Belabbes, F. Bechstedt, A. Trampert und L. Geelhaar, Direct experimental determination of the spontaneous polarization of GaN, *Phys. Rev B* **86**, 081302(R) (2012).
- [36] S. Y. Davydov, Estimates of the spontaneous polarization and permittivities of AlN, GaN, InN, and SiC crystals, *Phys. Solid State*, **51**, 1231 (2009).
- [37] C. Wood und D. Jena, *Polarization Effects in Semiconductors: From Ab Initio Theory to Device Applications*, Springer, Vol. **1**, 44 (2007).
- [38] J. F. Nye, *Physical Properties of Crystals*, Clarendon Press, Vol. **2** (1985).

- [39] D. A. B. Miller, D. S. Chemla, T. C. Damen, A. C. Gossard, W. Wiegmann, T. H. Wood und C. A. Burrus, Band-Edge Electroabsorption in Quantum Well Structures: The Quantum-Confined Stark Effect, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2173 (1984).
- [40] A. Hangleiter, Recombination dynamics in GaInN/GaN quantum well, *Semicond. Sci. Technol.* **34**, 073002 (2019).
- [41] I. Brown, I. Pope, P. Smowton, P. Blood, J. Thomson, W. Chow, D. Bour und M. Kneissl, Determination of the piezoelectric field in InGaN quantum wells, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 131108 (2005), Neuinterpretation der Daten aus T. Takeuchi, C. Wetzel, S. Yamaguchi, H. Sakai, H. Amano und I. Akasaki, Determination of piezoelectric fields in strained GaInN quantum wells using the quantum-confined Stark effect, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 1691 (1998).
- [42] Y. D. Jho, J. S. Yahng, E. Oh und D. S. Kim, Field-dependent carrier decay dynamics in strained $\text{In}_x\text{GaN}_{1-x}/\text{GaN}$ quantum wells, *Phys. Rev B* **66**, 035334 (2002).
- [43] S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, John Wiley & Sons, Vol. **3** (1981).
- [44] M. Feneberg, Dissertation, Universität Ulm, Spektroskopie von piezoelektrischen Halbleitermaterialien für optoelektronische Anwendungen (2006).
- [45] I. Koslow, Persönliche Nachricht (2016).
- [46] L. V. Hove, The Occurrence of Singularities in the Elastic Frequency Distribution of a Crystal, *Phys. Rev.* **89**, 1189 (1953).
- [47] H. R. Phillip und H. Ehrenreich, Optical Properties of Semiconductors, *Phys. Rev.* **129**, 1550 (1963).
- [48] S. Freytag, M. Feneberg, C. Berger, J. Bläsing, A. Dadgar, G. Callsen, F. Nippert, A. Hoffmann, P. Bokov und R. Goldhahn, Unintentional indium incorporation into barriers of InGaN/GaN multiple quantum wells studied by photoreflectance and photoluminescence excitation spectroscopy, *J. Appl. Phys.* **120**, 015703 (2016).
- [49] R. de L. Kronig, On the Theory of Dispersion of X-Rays, *J. Opt. Soc. Am.* **12**, 6 (1926).
- [50] H. A. Kramers, La diffusion de la lumiere par les atome, *Atti Cong. Intern. Fisica (Transactions of Volta Centenary Congress, Como)* **2**, 545 (1927), zitiert nach C. F. Bohren, *Eur. J. Phys.* **31**, 573 (2010).
- [51] M. Sharnoff, Validity Conditions for the Kramers-Kronig Relations, *Am. J. Phys.* **32**, 40 (1964).

- [52] Jan Kierfeld, Computational Physics, Lecture notes, TU Dortmund (2016).
- [53] W. Franz, Einfluß eines elektrischen Feldes auf eine optische Absorptionskante, Z. Naturforsch. **13a**, 484 (1958).
- [54] L. V. Keldysh, Ionization in the field of a strong electromagnetic wave, Exptl. Theoret. Phys. **47**, 1945 (1964).
- [55] K. W. Böer, H. J. Hänsch und U. Kümmel, Anwendung elektro-optischer Effekte zur Analyse des elektrischen Leitungsvorganges in CdS-Einkristallen, Z. Phys. **155**, 170 (1959).
- [56] K. W. Böer, H. J. Hänsch und U. Kümmel, Methode zum Sichtbarmachen von Leitfähigkeitsinhomogenitäten von Halbleitern, Naturwiss. **45**, 460 (1958).
- [57] S. Yu. Kruchinin, F. Krausz und V. S. Yakovlev, Colloquium: Strong-field phenomena in periodic systems, Rev. Mod. Phys. **90**, 021002 (2018).
- [58] J. Hader, N. Linder und G. H. Döhler, $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ theory of the Franz-Keldysh effect, Phys. Rev. B **55**, 6960 (1997).
- [59] D. E. Aspnes, Band nonparabolicities, broadening, and internal field distributions: The spectroscopy of Franz-Keldysh oscillations, Phys. Rev. B **10**, 4228 (1974).
- [60] J. D. Dow und D. Redfield, Electroabsorption in Semiconductors: The Excitonic Absorption Edge, Phys. Rev. B **1**, 3358 (1970).
- [61] F. Duque-Gomez und J. Sipe, The Franz–Keldysh effect revisited: Electroabsorption including interband coupling and excitonic effects, Journal of Physics and Chemistry of Solids **76**, 138 (2015).
- [62] T. G. Pedersen, Analytical models of optical response in one-dimensional semiconductors, Phys. Lett. A **379**, 1785 (2015).
- [63] J. E. Rowe und D. E. Aspnes, Approximate Treatment of Exciton Effects in Electric Field Modulation Via the Slater-Koster Interaction, Phys. Rev. Lett. **25**, 162 (1970).
- [64] F. Hache, D. Ricard und C. Flytzanis, Quantum-confined Stark effect in very small semiconductor crystallites, Appl. Phys. Lett. **55**, 1504 (1989).
- [65] S. Hughes und D. S. Citrin, High-Field Franz-Keldysh Effect and Exciton Ionization in Semiconductor Quantum Wires, Phys. Rev. Lett. **84**, 4228 (2000).
- [66] D. A. B. Miller, D. S. Chemla und S. Schmitt-Rink, Relation between electroabsorption in bulk semiconductors and in quantum wells: The quantum-confined Franz-Keldysh effect, Phys. Rev. B **33**, 6976 (1986).

- [67] T. Otake, Y. Shinohara, S. A. Sato und K. Yabana, Femtosecond time-resolved dynamical Franz-Keldysh effect, *Phys. Rev. B* **93**, 045124 (2016).
- [68] C. Schmidt, Dissertation, Universität Konstanz, Transiente Hochfeldeffekte im Volumenhalbleiter Galliumarsenid: Von der Franz-Keldysh-Absorption zur Wannier-Stark-Lokalisierung (2016).
- [69] P. Y. Yu und M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors. Physics and Materials Properties*. Springer-Verlag, Vol. **4** (2010).
- [70] D. E. Aspnes, Third-derivative modulation spectroscopy with low-field electroreflectance, *Surface Sci.* **37**, 418 (1973).
- [71] A. T. Winzer, Dissertation, Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften Technische Universität Ilmenau, Optische und elektronische Eigenschaften von AlGaIn/GaN-Heterostrukturen (2007).
- [72] K. O'Donnell, R. Martin und P. Middleton, Origin of Luminescence from InGaIn Diodes, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 237 (1999).
- [73] B. Damilano, N. Grandjean, J. Massies, L. Siozade und J. Leymarie, InGaIn/GaN quantum wells grown by molecular-beam epitaxy emitting from blue to red at 300 K, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 1268 (2000).
- [74] J. A. Woollam, "Guide to using WVase32."(2002).
- [75] H. Shen, M. Wraback, H. Zhong, A. Tyagi, S. P. DenBaars, S. Nakamura und J. S. Speck, Determination of polarization field in a semipolar (11 $\bar{2}2$) InGaIn/GaN single quantum well using Franz-Keldysh oscillations in electroreflectance, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 241906 (2009).
- [76] H. Shen, M. Wraback, H. Zhong, A. Tyagi, S. P. DenBaars, S. Nakamura und J. S. Speck, Unambiguous evidence of the existence of polarization field crossover in a semipolar InGaIn/GaN single quantum well, *Appl. Phys. Lett.* **95**, 033503 (2009).
- [77] T. Tanikawa, K. Shojiki, R. Katayama, S. Kuboya, T. Matsuoka, Y. Honda und H. Amano, Absolute technique for measuring internal electric fields in InGaIn/GaN light-emitting diodes by electroreflectance applicable to all crystal orientations, *Appl. Phys. Express* **10**, 082101 (2017).
- [78] C. Y. Lai, T. M. Hsu, W. H. Chang, K. U. Tseng, C. M. Lee, C. C. Chuo und J. I. Chyi, Direct measurement of piezoelectric field in In_{0.23}Ga_{0.77}N/GaN multiple quantum wells by electrotransmission spectroscopy, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 531 (2002).

- [79] T. M. Hsu, C. Y. Lai, W. H. Chang, C.-C. Pan, C. C. Chuo und J. I. Chyi, Electroreflectance study on the polarization field in InGaN/AlInGaN multiple quantum wells, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 1114 (2004).
- [80] M. Feneberg, F. Lipski, R. Sauer, K. Thonke, T. Wunderer, B. Neubert, P. Brückner und F. Scholz, Piezoelectric fields in GaInN/GaN quantum wells on different crystal facets, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 242112 (2006).
- [81] K. Adachi, H. Ogi, A. Nagakubo, N. Nakamura, M. Hirao, M. Imade, M. Yoshimura und Y. Mori, Piezoelectric coefficients of GaN determined by hopping conduction of carriers, *Appl. Phys. Lett.* **109**, 182108 (2016).
- [82] R. Bechmann, Elastic and Piezoelectric Constants of Alpha-Quartz, *Phys. Rev.* **110**, 1060 (1958).
- [83] I. Koga, M. Aruga und Y. Yoshinaka, Theory of Plane Elastic Waves in a Piezoelectric Crystalline Medium and Determination of Elastic and Piezoelectric Constants of Quartz, *Phys. Rev.* **109**, 1467 (1958).
- [84] R. Smith und F. Welsh, Temperature Dependence of the Elastic, Piezoelectric, and Dielectric Constants of Lithium Tantalate and Lithium Niobate, *J. Appl. Phys.* **42**, 2219 (1971).
- [85] A. Ilyaev, B. Umarov, L. Shabanova und M. Dubovik, Temperature Dependence of Electromechanical Properties of LGS Crystals, *Phys. Status Solidi A* **98**, K109 (1986).
- [86] A. D. Bykhovski, V. V. Kaminski, S. Shur, C. Chen und M. A. Khan, Piezoresistive effect in wurtzite n-type GaN, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 818 (1996).
- [87] K. Shimada, T. Sota und K. Suzuki, First-principles study on electronic and elastic properties of BN, AlN, and GaN, *J. Appl. Phys.* **84**, 4951 (1998).
- [88] A. E. Romanov, P. Waltereit und J. S. Speck, Buried stressors in nitride semiconductors: Influence on electronic properties, *J. Appl. Phys.* **97**, 043708 (2005).
- [89] K. Shimada, First-Principles Determination of Piezoelectric Stress and Strain Constants of Wurtzite III–V Nitrides, *Jpn. J. Appl. Phys. Teil 2* **45**, L358 (2006).
- [90] I. L. Guy, S. Muensit und E. M. Goldys, Extensional piezoelectric coefficients of gallium nitride and aluminum nitride, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 4133 (1999).
- [91] K. Tsubouchi und N. Mikoshiba, Zero-Temperature-Coefficient SAW Devices on AlN Epitaxial Films, *IEEE Trans. Sonics Ultrason. SU* **32**, 634 (1985).

- [92] C. Wetzel, S. Nitta, T. Takeuchi, S. Yamaguchi, H. Amano und I. Akasaki, On the Bandstructure in GaInN/GaN Heterostructures - Strain, Band Gap and Piezoelectric Effect, MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. **3**, 31 (1998).
- [93] H. Ogi, M. Fukunaga, M. Hirao und H. Ledbetter, Elastic constants, internal friction, and piezoelectric coefficient of α -TeO₂ Phys. Rev. B **69**, 024104 (2004).
- [94] H. Ogi, T. Ohmori, N. Nakamura und M. Hirao, Elastic, anelastic, and piezoelectric coefficients of α -quartz determined by resonance ultrasound spectroscopy, J. Appl. Phys. **100**, 053511 (2006).
- [95] H. Y. Ryu, K. S. Jeon, M. G. Kang, H. K. Yuh, Y. H. Choi und J. S. Lee, A comparative study of efficiency droop and internal electric field for InGaN blue lighting-emitting diodes on silicon and sapphire substrates, Sci. Rep. **7**, 44814 (2017).
- [96] M. Rychetsky, I. Koslow, B. Avinc, J. Rass, T. Wernicke, K. Bellmann, L. Sulmoni, V. Hoffmann, M. Weyers, J. Wild, J. Zweck, B. Witzigmann und M. Kneissl, Determination of polarization fields in group III-nitride heterostructures by capacitance-voltage-measurements, J. Appl. Phys. **119**, 095713 (2016).
- [97] S. M. Kim, H. S. Oh, J. H. Baek, K. H. Lee, G. Y. Jung, J. H. Song, H. J. Kim, B. J. Ahn, D. Yanqun und J. H. Song, Effects of patterned sapphire substrates on piezoelectric field in blue-emitting InGaN multiple quantum well, IEEE Electron Device Lett. **31**, 810 (2010).
- [98] G. Franssen, P. Perlin und T. Suski, Photocurrent spectroscopy as a tool for determining piezoelectric fields in In_xGaN_{1-x}/GaN multiple quantum well light emitting diodes Phys. Rev. B **69**, 045310 (2004).
- [99] J. Cai und F. A. Ponce, Study of charge distribution across interfaces in GaN/InGaN/GaN single quantum wells using electron holography, J. Appl. Phys. **91**, 9856 (2002).
- [100] F. Renner, P. Kiesel, G. H. Döhler, M. Kneissl, C. G. Van de Walle und N. M. Johnson, Quantitative analysis of the polarization fields and absorption changes in InGaN/GaN quantum wells with electroabsorption spectroscopy, Appl. Phys. Lett. **81**, 490 (2002).
- [101] Y. Jho, J. S. Yahng, E. Oh und D. Kim, Measurement of piezoelectric field and tunneling times in strongly biased InGaN/GaN quantum wells, Appl. Phys. Lett. **79**, 1130 (2001).
- [102] S. F. Chichibu, T. Azuhata, T. Sota, T. Mukai und S. Nakamura, Localized quantum well excitons in InGaN single-quantum-well amber light-emitting diodes, J. Appl. Phys. **88**, 5153 (2000).

- [103] T. Takeuchi, C. Wetzel, S. Yamaguchi, H. Sakai, H. Amano, I. Akasaki, Y. Kaneko, S. Nakagawa, Y. Yamaoka und N. Yamada, Determination of piezoelectric fields in strained GaInN quantum wells using the quantum-confined Stark effect, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 1691 (1998).
- [104] H. Shen, G. A. Garrett, M. Wraback, H. Zhong, A. Tyagi, S. P. DenBaars, S. Nakamura und J. S. Speck, Polarization field crossover in semi-polar InGaN/GaN single quantum wells *Phys. Status Solidi C* **7**, 2378 (2010).
- [105] T. Klein, Diplomarbeit, Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften Institut für Physik Technische Universität Ilmenau, Modulationsspektroskopie an GaN und AlGaN/GaN-Heterostrukturen (2006).
- [106] M. Greve, Institut für Technische Physik Technische Universität Carolo-Wilhelmina Braunschweig, Diplomarbeit, Optische Spektroskopie an ultraviolett-emittierenden GaN/AlGaN-Heterostrukturen (2003).
- [107] Y. Zhao, S. Tanaka, Q. Yan, C.-Y. Huang, R. B. Chung, C.-C. Pan, K. Fujito, D. Feezell, C. G. Van de Walle, J. S. Speck, S. P. DenBaars und S. Nakamura, *Appl. Phys. Lett.* **99**, 051109 (2011).
- [108] F. Tang, T. Zhu, W.-Y. Fu, F. Oehler, S. Zhang, J. T. Griffiths, C. Humphreys, T. L. Martin, P. A. J. Bagot, M. P. Moody, S. K. Patra, S. Schulz, P. Dawson, S. Church, J. Jacobs und R. A. Oliver, Insight into the impact of atomic- and nano-scale indium distributions on the optical properties of InGaN/GaN quantum well structures grown on m-plane freestanding GaN substrates, *J. Appl. Phys.* **125**, 225704 (2019).
- [109] L. Rigutti, A. Castaldini, M. Meneghini und A. Cavallini, Photocurrent spectroscopy evidence for stress-induced recombination centres in quantum wells of InGaN/GaN-based light-emitting diodes, *Semicond. Sci. Technol.* **23**, 025004 (2008).
- [110] D.-S. Shin, J.-I. Lee und J.-I. Shim, Systematic Analysis of the Photocurrent Spectroscopy on InGaN/GaN Blue Light-Emitting Diodes, *IEEE J. Quantum Electron.* **49**, 1062 (2013).
- [111] S.-B. Choi, J.-P. Shim, D.-M. Kim, H.-I. Jeong, Y.-D. Jho, Y.-H. Song und D.-S. Lee, Effect of indium composition on carrier escape in InGaN/GaN multiple quantum well solar cells, *Appl. Phys. Lett.* **103**, 033901 (2013).
- [112] C. Vierheilig, U. T. Schwarz, N. Gmeinwieser, A. Laubsch und B. Hahn, Bias dependent spatially resolved photoluminescence spectroscopy and photocurrent measurements of InGaN/GaN LED structures, *Phys. Status Solidi C* **6**, S755 (2009).

- [113] E. L. Malus, Théorie de la double réfraction de la lumière dans les substances cristallines, 303 (1810), zitiert nach J. Wilsing, *Astronomische Nachrichten*, **16**, 257 (1914).
- [114] L. C. de Carvalho, A. Schleife, F. Fuchs und F. Bechstedt, Valence-band splittings in cubic and hexagonal AlN, GaN, and InN, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 232101 (2010).
- [115] P. Misra, O. Brandt, H. T. Grahn, H. Teisseyre, M. Siekacz, C. Skierbiszewski und B. Lucznik, Complete in-plane polarization anisotropy of the A exciton in unstrained A-plane GaN films, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 141903 (2007).
- [116] B. Gil, O. Briot und R.-L. Aulombard, Valence-band physics and the optical properties of GaN epilayers grown onto sapphire with wurtzite symmetry, *Phys. Rev. B* **52**, R17028 (1995).
- [117] S.-I. Park, J.-I. Lee, D.-H. Jang, H.-S. Kim, D.-S. Shin, H.-Y. Ryu und J.-I. Shim, Measurement of Internal Electric Field in GaN-Based Light-Emitting Diodes, *IEEE J. Quantum Electron.* **48**, 4 (2012).
- [118] C. S. Kim, J. H. Kim, K. J. Yee, H. K. Kwon, H. S. Lee, J. S. Park und K. J. Yee, Temperature- and Bias-dependent Study of Photocurrent Spectroscopy in an InGaN Light-emitting Diode Operating near 400 nm, *J. Korean Phys. Soc.* **57**, 793 (2010).
- [119] A. B. M. H. Islam, D.-S. Shin und J.-I. Shim, Interactive study of electroreflectance and photocurrent spectra in InGaN/GaN-based blue LEDs, *IEEE J. Quantum Electron.* **53**, 5 (2017).
- [120] Y.-H. Kwon, G. H. Gainer, Y.-H. Cho, J. J. Song, M. Hansen und S. P. DenBaars, Structural and optical characteristics of $\text{In}_x\text{GaN}_{1-x}$ /GaN multiple quantum wells with different In compositions, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 2545 (1999).
- [121] S. Shokhovets, L. Kirste, J. H. Leach, S. Krischok und M. Himmerlich, Anisotropic optical constants, birefringence, and dichroism of wurtzite GaN between 0.6 eV and 6 eV, *J. Appl. Phys.* **122**, 045706 (2017).
- [122] I. Hwang, C. R. McNeill und N. C. Greenhama, Drift-diffusion modeling of photocurrent transients in bulk heterojunction solar cells, *J. Appl. Phys.* **106**, 094506 (2009).
- [123] M. Ershov, H. C. Liu und L. M. Schmitt, Image transformation in integrated quantum well infrared photodetector-light emitting diode, *J. Appl. Phys.* **82**, 1446 (1997).
- [124] M. Ershov, Lateral photocurrent spreading in single quantum well infrared photodetectors, *Appl. Phys. Lett.* **72**, 2865 (1998).

- [125] P. Paskov, P. O. Holtz, B. Monemar, S. Kamiyama, M. Iwaya, H. Amano und I. Akasaki, Phonon-Assisted Photoluminescence in InGaN/GaN Multiple Quantum Wells, *Phys. Status Solidi B* **234**, 755 (2002).
- [126] L. T. Tan, R. W. Martin, K. P. O'Donnell und I. M. Watson, Photoluminescence and phonon satellites of single InGaN/GaN quantum wells with varying GaN cap thickness, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 101910 (2006).
- [127] S. Kalliakos, X. B. Zhang, T. Taliercio, P. Lefebvre, B. Gil, N. Grandjean, B. Damilano und J. Massies, Large size dependence of exciton-longitudinal-optical-phonon coupling in nitride-based quantum wells and quantum boxes, *Appl. Phys. Lett.* **80**, 428 (2002).
- [128] D. M. Graham, A. Soltani-Vala, P. Dawson, M. J. Godfrey, T. M. Smeeton, J. S. Barnard, M. J. Kappers, C. J. Humphreys und E. J. Thrush, Optical and microstructural studies of InGaN/GaN single-quantum-well structures, *J. Appl. Phys.* **97**, 103508 (2005).
- [129] S. Ardali, E. Tiras, M. Gunes, N. Balkan, A. O. Ajagunna, E. Iliopoulos und A. Georgakilas, Longitudinal polar optical phonons in InN/GaN single and double heterostructures, *Phys. Status Solidi C* **5**, 1620 (2011).
- [130] Y.-H. Cho, G. H. Gainer, A. J. Fischer, J. J. Song, S. Keller, U. K. Mishra und S. P. DenBaars, "S-shaped" temperature-dependent emission shift and carrier dynamics in InGaN/GaN multiple quantum wells, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 1370 (1998).
- [131] S.-W. Feng, Y.-C. Cheng, Y.-Y. Chung, C. C. Yang, Y.-S. Lin, C. Hsu, K.-J. Ma und J.-I. Chy, Impact of localized states on the recombination dynamics in InGaN/GaN quantum well structures, *J. Appl. Phys.* **92**, 4441 (2002).
- [132] H. Yang, Z. Ma, Y. Jiang, H. Wu, P. Zuo, B. Zhao, H. Jia und H. Che, The enhanced photo absorption and carrier transportation of InGaN/GaN Quantum Wells for photodiode detector applications, *Sci. Rep.* **7**, 43357 (2017).
- [133] M. V. Baranovskiy, G. F. Glinskii und M. S. Mironova, Photoelectric diagnostics method for InGaN/GaN multiple-quantum-well heterostructures, *Semiconductors* **47**, 58 (2013).
- [134] H. M. Khalila, S. Mazzucatoa, S. Ardalib, O. Celikb, S. Mutlub, B. Royalla, E. Tirasb, N. Balkana, J. Puustinenc, V.-M. Korpijärvic und M. Guina, Temperature and magnetic field effect on oscillations observed in GaInNAs/GaAs multiple quantum wells structures, *Mater. Sci. Eng. B* **177**, 729 (2006).

- [135] S. Marcinkevičius, R. Ivanov, Y. Zhao, S. Nakamura, S. P. DenBaars und J. S. Speck, Highly polarized photoluminescence and its dynamics in semipolar $(20\bar{2}1)$ InGaN/GaN quantum well, *Appl. Phys. Lett.* **104**, 111113 (2014).
- [136] A. Yamaguchi, Anisotropic Optical Matrix Elements in Strained GaN Quantum Wells on Semipolar and Nonpolar Substrates, *Jpn. J. Appl. Phys.* **46**, L789 (2007).
- [137] H.-H. Huang und Y.-R. Wu, Light emission polarization properties of semipolar InGaN/GaN quantum well, *J. Appl. Phys.* **107**, 053112 (2010).
- [138] Y. Zhao, S. Tanaka, C. C. Pan, K. Fujito, D. Feezell, J. S. Speck, S. P. DenBaars und S. Nakamura, High-Power Blue-Violet Semipolar $(20\bar{2}1)$ InGaN/GaN Light-Emitting Diodes with Low Efficiency Droop at 200 A/cm², *Appl. Phys. Express* **4**, 082104 (2011).
- [139] C. Mounir, U. T. Schwarz, I. L. Koslow, M. Kneissl, T. Wernicke, T. Schimpke und M. Strassburg, Impact of inhomogeneous broadening on optical polarization of high-inclination semipolar and nonpolar In_xGa_{1-x}N/GaN quantum wells, *Phys. Rev. B* **93**, 235314 (2016).
- [140] L. Schade, U. T. Schwarz, T. Wernicke, J. Rass, S. Ploch, M. Weyers und M. Kneissl, On the optical polarization properties of semipolar InGaN quantum wells, *Appl. Phys. Lett.* **99**, 051103 (2011).
- [141] T. Kyono, Y. Yoshizumi, Y. Enya, M. Adachi, S. Tokuyama, M. Ueno, K. Katayama und T. Nakamura, Optical Polarization Characteristics of InGaN Quantum Wells for Green Laser Diodes on Semi-Polar $(20\bar{2}1)$ GaN Substrates, *Appl. Phys. Express* **3**, 011003 (2010).
- [142] R. B. Chung, Y.-D. Lin, I. Koslow, N. Pfaff, H. Ohta, J. Ha, S. P. DenBaars und S. Nakamura, Electroluminescence Characterization of $(20\bar{2}1)$ InGaN/GaN Light Emitting Diodes with Various Wavelengths *Jpn. J. Appl. Phys.* **49**, 070203 (2010).
- [143] C. Mounir, I. L. Koslow, T. Wernicke, M. Kneissl, L. Y. Kuritzky, N. L. Adamski, S. H. Oh, C. D. Pynn, S. P. DenBaars, S. Nakamura, J. S. Speck und U. T. Schwarz, On the optical polarization properties of semipolar $(20\bar{2}1)$ and $(20\bar{2}\bar{1})$ InGaN/GaN quantum wells, *J. Appl. Phys.* **123**, 085705 (2018).
- [144] F. A. Ketzner, P. Horenburg, P. Henning, E. R. Korn, H. Bremers, U. Rossow und A. Hangleiter, Control of optical polarization properties by manipulation of anisotropic strain in nonpolar m-plane GaInN/GaN quantum wells, *Appl. Phys. Lett.* **114**, 052101 (2019).
- [145] L. Schade, U. T. Schwarz, T. Wernicke, M. Weyers und M. Kneissl, *Phys. Status Solidi B* **248**, 638 (2011).

- [146] G. A. Garrett, H. Shen, M. Wraback, A. Tyagi, M. C. Schmidt, J. S. Speck, S. P. DenBaars und S. Nakamura, *Phys. Status Solidi C* **6**, 800 (2009).
- [147] S. Panda und D. Biswas, Effects of doping concentration on the transition energy of InGaN/GaN quantum well diodes, *Solid State Commun.* **168**, 60 (2013).
- [148] F. Zhang, M. Ikeda, K. Zhou, Z. Liu, J. Liu, S. Zhang und H. Yang, Injection current dependences of electroluminescence transition energy in InGaN/GaN multiple quantum wells light emitting diodes under pulsed current conditions, *J. Appl. Phys.* **118**, 033101 (2015).
- [149] R. Sharma, P. M. Pattison, H. Masui, R. M. Farrel, T. J. Baker, B. A. Haskell, F. Wu, S. P. DenBaars, J. S. Speck und S. Nakamura, Demonstration of semipolar (10 $\bar{1}\bar{3}$) InGaN/GaN green light emitting diode, *Appl. Phys. Lett.* **87**, 231110 (2005).
- [150] C.-F. Huang, C.-Y. Chen, C.-F. Lu und C. C. Yang, Reduced injection current induced blueshift in an InGaN/GaN quantum-well light-emitting diode of prestrained growth, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 051121 (2007).
- [151] H. Sato, A. Tyagi, H. Zhong, N. Fellows, R. B. Chung, M. Saito, K. Fujito, J. S. Speck, S. P. DenBaars und S. Nakamura, High power and high efficiency green light emitting diode on free-standing semipolar (11 $\bar{2}\bar{2}$) bulk GaN substrate, *Phys. Status Solidi RRL* **1**, 162 (2007).
- [152] S. Yamamoto, Y. Zhao, C.-C. Pan, R. B. Chung, K. Fujito, J. Sonoda, Steven P. DenBaars und S. Nakamura, High-Efficiency Single-Quantum-Well Green and Yellow-Green Light-Emitting Diodes on Semipolar (20 $\bar{2}\bar{1}$) GaN Substrates, *Appl. Phys. Express* **3**, 122102 (2010).
- [153] S. Freytag, Diplomarbeit, Otto-von-Guericke-Universität, Aufbau und Erprobung eines Messplatzes zur Modulationsspektroskopie an Gruppe-III-Nitriden (2014).
- [154] P. P. Paskov, B. Monemar, A. Toropov, J. P. Bergman und A. Usui, Two-electron transition spectroscopy of shallow donors in bulk GaN, *Phys. Status Solidi C* **4**, 2601 (2007).
- [155] B. Monemar, P. P. Paskov, J. P. Bergman, G. Pozina, A. A. Toropov, T. V. Shubina, T. Malinauskas und A. Usui, Transient photoluminescence of shallow donor bound excitons in GaN, *Phys. Rev. B* **82**, 235202 (2010).

Ehrenerklärung

Ich versichere hiermit, dass ich die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe; verwendete fremde und eigene Quellen sind als solche kenntlich gemacht. Ich habe insbesondere nicht wissentlich:

- Ergebnisse erfunden oder widersprüchliche Ergebnisse verschwiegen
- statistische Verfahren absichtlich missbraucht, um Daten in ungerechtfertigter Weise zu interpretieren,
- fremde Ergebnisse oder Veröffentlichungen plagiiert,
- fremde Forschungsergebnisse verzerrt wiedergegeben.

Mir ist bekannt, dass Verstöße gegen das Urheberrecht Unterlassungs- und Schadensersatzansprüche des Urhebers sowie eine strafrechtliche Ahndung durch die Strafverfolgungsbehörden begründen kann. Ich erkläre mich damit einverstanden, dass die Arbeit ggf. mit Mitteln der elektronischen Datenverarbeitung auf Plagiate überprüft werden kann. Die Arbeit wurde bisher weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form als Dissertation eingereicht und ist als Ganzes auch noch nicht veröffentlicht.

Magdeburg, 7. Juli 2020