

Defektinduzierte optische und elektronische Eigenschaften von II-VI Halbleiterheterostrukturen

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

vorgelegt der

Mathematisch-Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät
(Mathematisch-Naturwissenschaftlicher Bereich)
der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

von Uwe Hilpert
geb. am 20. September 1969 in Kitzingen

Gutachter:

1. Prof. Dr. G. Dräger
2. Dr. habil. H.S. Leipner
3. Prof. Dr. A. Waag

Halle (Saale), 24. April 2002

urn:nbn:de:gbv:3-000003688

[<http://nbn-resolving.de/urn/resolver.pl?urn=nbn%3Ade%3Agbv%3A3-000003688>]

INHALTSVERZEICHNIS

1 EINLEITUNG	1
2 KRISTALL- UND BANDSTRUKTUR VON II-VI HALBLEITERN	5
2.1 Kristallographische Eigenschaften	5
2.2 Energiedispersion der Bänder	6
2.3 Bandstruktur verspannter Halbleiterkristalle	8
2.4 Auswahlregeln der optischen Übergänge	11
3 EXZITONEN IN HALBLEITERN	13
3.1 Energiedispersion des dreidimensionalen Exzitons	13
3.2 Exzitonen in niederdimensionalen Halbleiterstrukturen	15
4 STRUKTURELLE EIGENSCHAFTEN VON VOLUMEN- UND SCHICHTKRISTALLEN MIT ZINKBLENDESTRUKTUR	19
4.1 Gleitversetzungen in der Zinkblendestruktur	19
4.2 Strukturelle Eigenschaften dünner Epitaxieschichten	26
5 EXPERIMENTELLE METHODEN	33
5.1 Signalentstehung in der Kathodolumineszenzspektroskopie	33
5.1.1 Besonderheiten der Anregung mittels Elektronenstrahl	33
5.1.2 Strahlende Rekombination von Ladungsträgern	37
5.1.3 Strahlungslose Rekombination von Ladungsträgern - das Shockley-Read-Hall-Modell	39
5.2 Angewandte Messtechniken	40
5.2.1 Der REM-KL Messplatz	41
5.2.2 Der Photolumineszenzmessplatz	42
6 ANALYSE DER PLASTISCHEN RELAXATION VON II-VI EPITAXIESCHICHTEN	43
6.1 <i>ZnSe</i> (001) und <i>CdTe</i> (001) Schichten auf <i>GaAs</i> (001) Substrat	43
6.1.1 Rekombinationswirksamkeit von Gleitversetzungen in <i>CdTe</i> und <i>ZnSe</i>	43
6.1.2 Kathodolumineszenzuntersuchung der plastischen Relaxation von <i>ZnSe</i> Epitaxieschichten	47
6.1.3 Elektronische und optische Eigenschaften von verspannten II-VI Epitaxieschichten	52
6.1.3.1 Theoretische Vorbetrachtungen	52
6.1.3.2 Lumineszenzcharakterisierung der <i>ZnSe</i> Epitaxieschichten	55
6.1.4 Plastische Relaxation von <i>ZnSe</i> (001) auf <i>GaAs</i> (001) Substrat	57

6.1.5 Spannungsgradienten innerhalb der Schicht und deren Beeinflussung durch unterschiedliche Dotierung.....	59
6.1.6 Untersuchung von $CdTe(001)$ auf $GaAs(001)$ Substrat	63
6.1.7 Strukturelles Relaxationsmodell für die (001) Wachstumsoberfläche von kompressiv verspannten II-VI Epitaxieschichten durch polare Gleitversetzungen.....	65
6.2 Defektstruktur in $CdTe(111)$ Epitaxieschichten auf As passiviertem $Si(111)$ Substrat	68
7 ELEKTRONISCHE UND STRUKTURELLE CHARAKTERISTIKEN VON α-VERSETZUNGEN IN II-VI HALBLEITERSCHICHTEN	75
7.1 Optische und elektronische Eigenschaften von α -Versetzungen	75
7.1.1 Optische Charakterisierung von Versetzungen	75
7.1.2 Wechselwirkung von Exzitonen mit α -Versetzungen	82
7.2 Exzitonen als Sonden für strukturelle Eigenschaften von α -Versetzungssegmenten in $ZnSe$	86
7.2.1 Geometrische Lage des Defekts im Kristall - Nukleation von Versetzungshalbschleifen an der Wachstumsoberfläche	86
7.2.2 Laterale Verteilung versetzungsgebundener Exzitonen - Ausbildung von Versetzungsbündeln im Bereich der kritischen Schichtdicke.....	89
8 ZUSAMMENFASSUNG	93
ANHANG	97
A.1 Deformationspotential eines geraden Versetzungssegments	97
A.2 Messergebnisse an der 165nm $ZnSe/GaAs(001)$ Epitaxieschicht	99
A.3 Literaturverzeichnis	100
A.4 Veröffentlichungsverzeichnis.....	106

1 EINLEITUNG

Die Fortschritte in der Halbleitertechnologie schreiten ungebrochen voran. Seit der Einführung von integrierten Schaltkreisen in den späten 50er Jahren durch J. S. Kilby, dessen bahnbrechenden Arbeiten mit dem Nobelpreis für Physik des Jahres 2000 honoriert wurden, hat sich die Integrationsdichte von Transistoren alle 18 Monate nahezu verdoppelt. Ein zentrales Interesse gilt der Kontrolle der optischen und elektrischen Eigenschaften von Halbleitern durch Dotierung und Strukturierung. Jedoch entstehen beim Herstellungsprozess von Halbleiterstrukturen und durch den Betrieb von Halbleiterbauelementen mitunter Defekte, die zu ungewollten Eigenschaften wie einer Abnahme der Dichte freier Ladungsträger bis hin zur Zerstörung des Bauelements führen. Mit der drastisch fortschreitenden Miniaturisierung von Bauelementen gewinnen Fluktuationen der Ladungsträgerdichte vermehrt an Einfluss. So ist bekannt, dass mit Sinken der Transistorgröße auch die Rauschschwelle abnimmt.¹ Um die Wechselwirkung von Ladungsträgern mit Defekten zu verstehen, ist es daher erforderlich, sowohl die mikroskopische als auch die elektronische Struktur lokaler Störungen im kristallinen Aufbau von Halbleitern möglichst genau zu entschlüsseln. Hier besteht vor allem Interesse an optischen Methoden, die es erlauben, zerstörungsfrei und ohne aufwendige Präparations-techniken, einzelne Defekte zu charakterisieren [i].

Ein perfekter Halbleiterkristall besitzt eine Bandlücke von bis zu mehreren Elektronenvolt, innerhalb der sich kein elektronischer Zustand befindet. Defekte führen dagegen häufig zu lokalisierten Zuständen in der Bandlücke. Ein besonderes Interesse hinsichtlich der Erforschung von Defekten gilt II-VI Halbleitern, da sie wegen der großen Bindungsenergien von Elektron-Loch-Paaren als Modellsystem betrachtet werden können, um die elektronische Struktur von lokalisierten Zuständen durch optische Untersuchungen zu studieren [ii]. II-VI Halbleiter sind Verbindungen von Metallen wie Zink, Cadmium, Mangan oder Magnesium mit Elementen aus der VI. Hauptgruppe des Periodensystems der Elemente. Das II-VI Materialsystem ist für Anwendungen in der Optoelektronik hervorragend geeignet [iii], da die Rekombinationsstrahlung ternärer und quaternärer II-VI Verbindungshalbleiter den gesamten, für das menschliche Auge spektral relevanten Bereich abdeckt [iv]. Unlängst ist es gelungen, dünne Schichten semimagnetischer II-VI Verbindungen [v] auf *AlGaAs/GaAs* Heterostrukturen herzustellen und im Bereich des nicht magnetischen III-V Halbleiters einen spin-polarisierten Strom nachzuweisen [vi]. Dieses Schlüsselexperiment initiierte intensive Forschungsaktivitäten auf dem Gebiet der Spintronik [vii,viii]. Zudem zeigen diese Experimente, dass die Güte der Grenzschicht zwischen unterschiedlichen Halbleitern von hoher Relevanz bezüglich der optischen und elektrischen Eigenschaften von Halbleiterheterostrukturen hat.

In vielen Fällen bedingt die Gitterfehlpassung zwischen unterschiedlichen Halbleitern ab einer kritischen Schichtdicke eine plastische Relaxation der auf einem Substrat aufgewachsenen

¹ Die Rauschschwelle bezeichnet die Spanne, innerhalb der eine Änderung der Spannung nicht den Zustand eines Transistors ändert.

Halbleiterschicht. Die Verspannung in der Halbleiterschicht wird maßgeblich durch den Einbau, die Ausbreitung und Multiplikationsprozesse von ausgedehnten, linienartigen Defekten, so genannten Versetzungen, abgebaut.

Es war daher Aufgabe der vorliegenden Arbeit, die elektronische Struktur von Versetzungen in ausgewählten II-VI Halbleitern durch optische Methoden zu untersuchen. Es wird gezeigt, dass mit Hilfe hochauflösender Kathodolumineszenzspektroskopie Unterschiede von Defekten auf atomarer Skala identifiziert werden können. Die Wechselwirkung von Versetzungen mit dem Kristallgitter und mit Punktdefekten sowie die optischen Eigenschaften von Versetzungen selbst können dazu herangezogen werden, Defekte als lokale Sonden von Halbleitereigenschaften zu betrachten. Durch optische Verfahren werden vertikale und laterale Spannungsgradienten ermittelt und deren Relevanz bei der analytischen Beschreibung der plastischen Relaxation von II-VI Halbleiterschichten diskutiert.

Die Arbeit ist wie folgt gegliedert. Im sich anschließenden KAPITEL 2 werden zunächst allgemeine kristallographische und elektronische Eigenschaften von II-VI Halbleitern vorgestellt. Im KAPITEL 3 werden ausführlich die für die Lumineszenzspektroskopie relevanten, elektronischen Anregungen von Halbleiterkristallen behandelt. Das KAPITEL 4 beschäftigt sich mit den für diese Arbeit wichtigen Kristalldefekten. Es wird dargelegt, warum Versetzungen in Halbleiterheterostrukturen mit unterschiedlichen Gitterkonstanten entstehen. Es wird das in der Literatur weitgehend akzeptierte Modell vorgestellt, das analytische Betrachtungen zur Relaxation von Halbleiterschichten erlaubt. KAPITEL 5 ist den unterschiedlichen experimentellen Methoden gewidmet, die im Rahmen dieser Arbeit angewendet wurden. Dabei wird insbesondere auf die Signalentstehung in der Kathodolumineszenzspektroskopie eingegangen und herausgestellt, welche unterschiedlichen Informationen zur Kristallqualität aus optischen Daten gewonnen werden können.

In KAPITEL 6 werden am Beispiel von *ZnSe* und *CdTe* auf *GaAs* kompressiv verspannte Kristallschichten und der damit verbundene Relaxationsprozess von II-VI Halbleiterschichten auf der (001) Wachstumsoberfläche analysiert. Ebenfalls wird die Heterogrenzfläche von kompressiv verspannten *CdTe*(111) Halbleiterschichten auf mit Arsen passiviertem *Si*(111) Substrat einer Analyse unterzogen. Im Gegensatz zu *ZnSe/GaAs*(001) Epitaxieschichten, die das Musterbeispiel eines leicht fehlangepassten Wachstums von II-VI Halbleiterschichten darstellen, besitzen *CdTe/GaAs*(001) und *CdTe/Si*(111) Heterostrukturen ungefähr die gleiche große Gitterfehlangepassung zum Substrat. Es wird jedoch gefunden, dass die Defektentstehung maßgeblich durch die kristallographische Orientierung der Wachstumsoberfläche der II-VI Halbleiterschichten beeinflusst wird und nicht durch die Größe der Gitterfehlangepassung mit dem jeweiligen Substrat. Die Entstehung von Defekten an Ober- und Grenzflächen wird hierfür verantwortlich gemacht. Im Mittelpunkt von KAPITEL 7 stehen Untersuchungen zur optischen Aktivität von Versetzungen. Die in der Literatur existierenden Modelle zur Versetzungslumineszenz werden am Beispiel der Y-Linie diskutiert. Informationen über die Hintergrundverspannung des Wirtsgitters, die geometrische Lage der Versetzung im Kristall und sogar

über strukturelle Konfigurationen des Versetzungskerns werden herausgestellt. Um die gewonnenen Ergebnisse zu erklären, wird ein Modell zur Entstehung von Versetzungen in dünnen $ZnSe(001)$ Epitaxieschichten vorgestellt. Die Ergebnisse der Arbeit werden im KAPITEL 8 zusammengefasst.

-
- [i] L. SAMUELSON, A. GUSTAFSSON, Phys. Rev. Lett. **74**, 2395 (1995).
 - [ii] N. PELEKANOS, J. DING, A. V. NURMIKKO, H. LUO, N. SAMARTH, J. K. FURDYNA, Phys. Rev. B **45**, 6037 (1992).
 - [iii] A. WAAG, F. FISCHER, K. SCHÜLL, T. BARON, H.-J. LUGAUER, TH. LITZ, U. ZEHNDER, W. OSSAU, T. GERHARD, M. KEIM, G. REUSCHER, G. LANDWEHR, Appl. Phys. Lett. **70**, 280 (1997).
 - [iv] “*Physics of II-VI and I-VII Compounds, Semimagnetic Semiconductors*”, Landolt-Börnstein III/17b, edited by O. MADELUNG (Springer, Berlin 1982).
 - [v] “*Semiconductors and Semimetals 25*”, edited by J. K. FURDYNA and J. KOSSUT (Academic Press, London, 1988).
 - [vi] R. FIEDERLING, M. KEIM, G. REUSCHER, W. OSSAU, G. SCHMIDT, A. WAAG, L. W. MOLENKAMP, Nature **402**, 787 (1999).
 - [vii] TH. GRUBER, M. KEIM, R. FIEDERLING, G. REUSCHER, W. OSSAU, G. SCHMIDT, and L. W. MOLENKAMP, Appl. Phys. Lett. **78**, 1101 (2001).
 - [viii] Y. GUO, H. WANG, B. L. GU, Y. KAWAZOE, J Appl. Phys. **88**, 6614 (2000).

2 KRISTALL UND BANDSTRUKTUR VON II-VI HALBLEITERN

In Halbleiterkristallen ist die Anzahl freier Ladungsträger in Leitungs- und Valenzband im Vergleich zur Anzahl der Atome sehr klein. Dies hat zur Folge, dass sich die Ladungsträger durch Relaxationsprozesse, wie Streuung an Phononen, in den Bandextrema ansammeln. Daher genügt in vielen Fällen die analytische Beschreibung von optischen und elektrischen Eigenschaften durch wenige Parameter. Unter Ausnutzung von Symmetrieeigenschaften, stellten Luttinger und Kohn [Lutt56] im Rahmen von k - p -Störungstheorien einen Satz gekoppelter Differentialgleichungen auf und konstruierten für Halbleiter der Diamantstruktur einen Hamiltonoperator, der die Effektive-Masse-Gleichung entarteter Bänder darstellt.

In den nachfolgenden Abschnitten werden daher zunächst die wesentlichen Symmetrieeigenschaften von kubischen Halbleitern vorgestellt. Diese werden dann dazu herangezogen, um Spinoperatoren zur analytischen Beschreibung von Deformationen des Halbleiters zu konstruieren. Diese erlauben es schließlich, die Wechselwirkung von Ladungsträgern mit statischen oder dynamischen Gitterverzerrungen in Abhängigkeit des Spannungszustands zu beschreiben.

2.1 Kristallographische Eigenschaften

Binäre Verbindungshalbleiter, die aus Atomsorten der II. und VI. Hauptgruppe des Periodensystems aufgebaut sind, wie z.B. Cadmiumtellurid ($CdTe$) und Zinkselenid ($ZnSe$), kristallisieren in der Zinkblende- oder der Wurtzitstruktur (polymorphe Modifikationen). Diese Strukturen unterscheiden sich kristallographisch nur durch die Stapelfolge der Netzebenen entlang der ausgezeichneten $\langle 111 \rangle$ Hauptrichtung. Für $CdTe$ und $ZnSe$ ist die Zinkblende- (oder Sphalerit-)struktur die thermodynamisch günstigere.

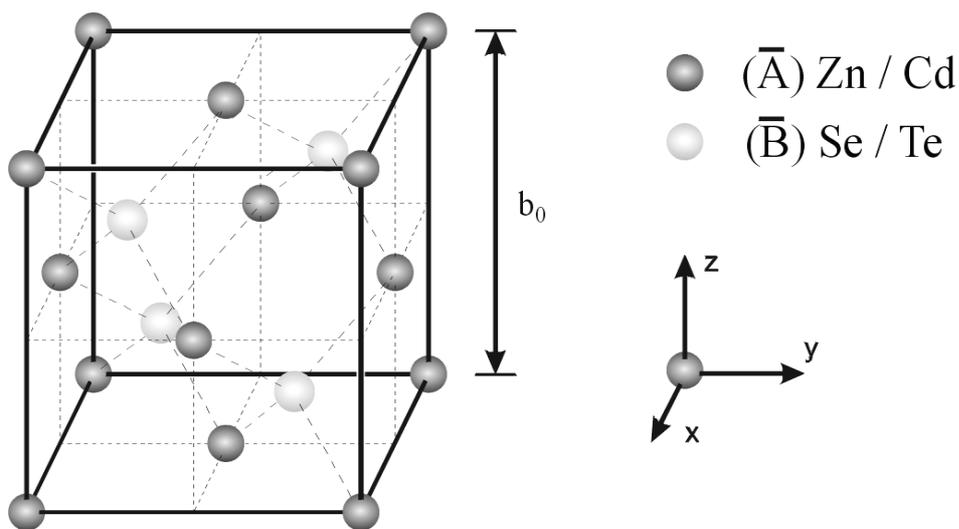


Abbildung 1 : Elementarzelle der Zinkblendestruktur. Die Kristallstruktur wird aus zwei unterschiedlichen Atomsorten gebildet, die jede für sich ein kubisch flächenzentriertes Untergitter aufspannen. Der Koordinatenursprung liegt in einem Anion (\bar{A}). Die kubischen Gitterkonstanten sind $b_0^{ZnSe} = 5.668\text{\AA}$ für $ZnSe$ [Wyc63] und $b_0^{CdTe} = 6.483\text{\AA}$ [Bel77] für $CdTe$, jeweils bei einer Temperatur von 300K.

In der nicht primitiven Elementarzelle der Zinkblendestruktur (Abb. 1) liegt jedes Anion (\bar{A}) in tetraedrischer Koordination umgeben von vier Kationen (\bar{B}). Jede Atomsorte spannt für sich genommen ein kubisch flächenzentriertes (*fcc*) Untergitter auf. Beide *fcc* Untergitter sind gegeneinander um den Gittervektor $\vec{b}_0 = b_0/4\langle 111 \rangle$ in Richtung der Raumdiagonalen verschoben. Aus diesem Grund sind manche Netzebenen \vec{E} auf verschiedenen Seiten mit Atomen unterschiedlichen Typs terminiert und werden daher auch als polar bezeichnet. Als Beispiel wären hier die $\{100\}$ und die $\{111\}$ Ebenen zu nennen, im Gegensatz dazu sind die $\{110\}$ Ebenen unpolar. Die Zinkblendestruktur besitzt als ausgezeichnete Richtungen die Vektoren der trigonalen $\langle 111 \rangle$ Achsen. Ausgezeichnet sind ebenfalls die $\langle 110 \rangle$ Richtungen, in welchen sich jeweils zwei der $\{111\}$ Netzebenen schneiden. Die Zinkblendestruktur unterscheidet sich von der Diamantstruktur durch das Fehlen einer Inversionssymmetrie. Bei der Diamantstruktur existiert in der Mitte der Atombindungen ein Punktinversionszentrum. Die Wechselwirkung zwischen Atomen in II-VI Halbleitern besitzt sowohl ionischen als auch kovalenten Charakter, wobei der ionische Anteil im Vergleich zu III-V Verbindungshalbleitern dominiert (Ionizität $f_{ZnSe}=0.630$ und $f_{CdTe}=0.717$ [Tak84] im Vergleich zu $f_{GaAs}=0.310$ [Geo87]).

2.2 Energiedispersion der Bänder

Der kovalente Anteil der Bindungen wird durch eine sp^3 Hybridisierung der atomaren *s*- und *p*-Orbitale bestimmt. Das bezüglich des Fermi-niveaus energetisch tiefste Leitungsband von Kristallen mit Zinkblendestruktur wird aus antibindenden molekularen σ -Orbitalen gebildet. Im Gegensatz dazu spiegelt das energetisch höchste Valenzbandniveau die bindungstragenden π -Molekularorbitalen wider, die hauptsächlich aus den atomaren *p*-artigen Orbitalen herrühren. Der Überlapp der Orbitale ist hier zwischen den Kristallatomen erhöht [Eng85, Car94]. Energetisch ergibt sich zwischen dem Leitungs- und Valenzbandextremum bei 1.6K eine experimentell ermittelte direkte Bandlücke von $E_g^{ZnSe} = 2.8201\text{eV}$ für *ZnSe* und $E_g^{CdTe} = 1.6063\text{eV}$ für *CdTe* [Ven79, Naw80].

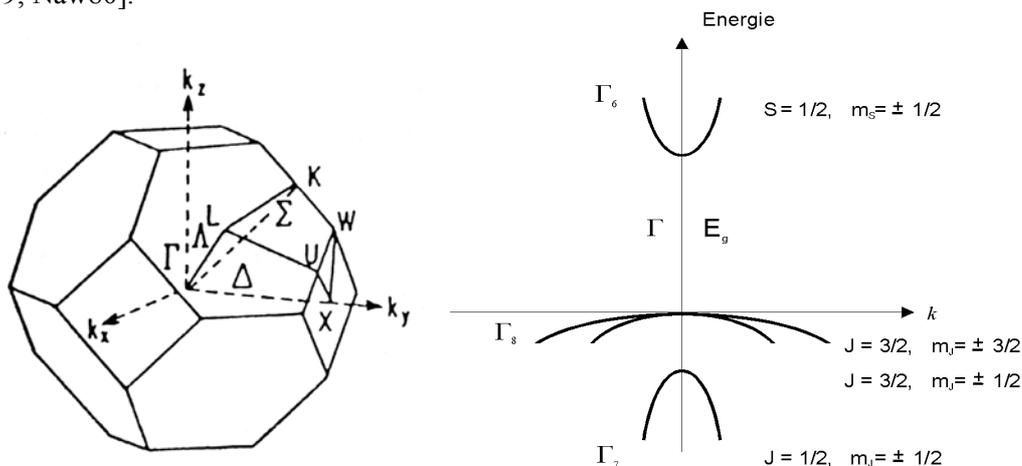


Abbildung 2.1 : Schematische Darstellung der Bandstruktur der direkten Halbleiter *CdTe* und *ZnSe*. Zonenschema der ersten Brillouinzone (links) und Energiedispersion der Bänder am Γ -Punkt (rechts). Die Krümmung des Γ_8 Bandes ist für die $\Delta=\langle 010 \rangle$, $\Lambda=\langle 111 \rangle$ und $\Sigma=\langle 011 \rangle$ Richtungen verschieden.

Für die s -artigen Elektronenwellenfunktionen kann die Energiedispersion des Γ_6 -Leitungsbandes in der Umgebung des Γ -Punktes bei $\vec{k}=0$ näherungsweise durch eine isotrope parabolische Beziehung

$$E^{CB} = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} \quad (2.1)$$

beschrieben werden, in der m_e^* die effektive Masse des Kristallelektrons ist. Der Spin des Leitungsbandelektrons ist $s=1/2$. Das Leitungsband ist zweifach entartet.

Die bindungstragenden π -Orbitale besitzen den Drehimpuls $L=1$. Die Spin-Bahn-Wechselwirkung koppelt den $s=1/2$ Spin der Elektronenwellenfunktionen mit dem Drehimpuls der Orbitale einerseits zu einem vierfach entarteten Band mit Gesamtdrehimpuls $J=3/2$. In der Nomenklatur der kubischen Punktgruppe wird es daher als Γ_8 -Band bezeichnet. Das durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung erzeugte zweifach entartete Band mit $J=1/2$ hat Γ_7 Symmetrie. Das Γ_8 -Band ist dabei das energetisch höhere Valenzbandniveau, welches im Folgenden näher betrachtet wird. Das s -artige Γ_7 -Band wird oft auch als Split-off Band bezeichnet. Es befindet sich für $ZnSe$ 0.43eV [Twa80], für $CdTe$ 0.95eV [Wör97] unterhalb der Γ_8 -Valenzbandkante. Aufgrund des relativ großen energetischen Abstandes zum benachbarten Γ_8 -Band wird es im Rahmen dieser Arbeit für die analytische Beschreibung der experimentellen Ergebnisse vernachlässigt (Luttinger-Modell).

Der Energie-Impuls-Operator eines Lochs im Γ_8 -Band wurde erstmals 1956 von LUTTINGER [Lut56] unter Anwendung der Gruppentheorie ermittelt:

$$H^{VB} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2 \right) \vec{\nabla}^2 - 2\gamma_3 (\vec{J}\vec{\nabla})^2 + 2(\gamma_3 - \gamma_2) (\nabla_x^2 J_x^2 + \nabla_y^2 J_y^2 + \nabla_z^2 J_z^2) \right] \quad (2.2)$$

mit $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$: Kohn-Luttinger-Parameter
 J_x, J_y, J_z : 4x4 Drehimpulsmatrizen.

Während die ersten Terme in Gleichung 2.2 sphärische Symmetrie besitzen, spiegelt der „Warping“-Term proportional $\mu = (\gamma_3 - \gamma_2)$ die kubische Symmetrie des Kristalls wider. Im Rahmen der entarteten Störungstheorie lässt sich der vierfach entartete Zustand des Valenzbandes durch die von LUTTINGER [Lut56] eingeführten Darstellungen der Drehimpulskomponenten als 4x4 Matrizen beschreiben.

$$J_x = \begin{pmatrix} 0 & i\sqrt{3}/2 & 0 & 0 \\ -i\sqrt{3}/2 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & i\sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & -i\sqrt{3}/2 & 0 \end{pmatrix} \quad J_y = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3}/2 & 0 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 0 & 1 & 2\sqrt{3} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3}/2 & 0 \end{pmatrix} \quad J_z = \begin{pmatrix} 3/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3/2 \end{pmatrix}$$

Die ausgezeichnete Achse ist hierbei die $z = \langle 001 \rangle$ Koordinatenachse. J_x , J_y , und J_z erfüllen die Vertauschungsrelationen der Drehimpulskomponenten $[J_x, J_y] = iJ_z$.

Charakteristische Werte für die effektiven Elektronenmassen und die Kohn-Luttinger-Parameter für $ZnSe$ und $CdTe$ sind in folgender Tabelle 2.1 zusammengefasst.

	m_e^*/m_0	γ_1	γ_2	γ_3
$ZnSe$	0.16	4.30	1.14	1.84
$CdTe$	0.096	5.30	1.62	2.10

Tabelle 2.1 : Effektive Elektronenmassen in Einheiten der Ruhemasse [Dea81, Law71] und Kohn-Luttinger-Parameter [Ser81, Sai90] von $ZnSe$ und $CdTe$.

2.3 Bandstruktur verspannter Halbleiterkristalle

Es existieren 24 Symmetrieoperationen der kubischen Punktgruppe T_d , die einen Kristall mit Zinkblendestruktur in sich überführen [Kos63]. Aufgrund der Symmetrieoperationen können im Rahmen der Darstellungstheorie Spinoperatoren zur Beschreibung von Störungen durch äußere elektrische und magnetische Felder aber auch durch Deformationen des Gitters konstruiert werden. Dies wird nun am Beispiel von elastischen Deformationen eines Halbleiters demonstriert.

Eine Verspannung eines Festkörpers führt zu einer Deformation. Für hinreichend kleine Verspannungen kann jedem Punkt \vec{x} eine Verschiebung

$$\vec{v}(\vec{x}) = \varepsilon \cdot \vec{x} \quad (2.3.1)$$

zugeordnet werden. Diese Veränderungen werden durch den Deformationstensor ε charakterisiert. Der Deformationstensor ist symmetrisch und transformiert wie ein Tenor zweiter Stufe.

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (2.3.2)$$

Der Deformationstensor lässt sich in seine irreduzible Darstellungen mit den Charakteren Γ_1 , Γ_3 und Γ_5 zerlegen, die den Darstellungen der Punktgruppe T_d zugeordnet werden können:

Γ_n	$\varepsilon(\Gamma_n)$
Γ_1	$Tr(\varepsilon) = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}$
Γ_3	$\sqrt{3}(\varepsilon_{zz} - 1/3 Tr(\varepsilon)), \varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}$
Γ_5	$\varepsilon_{yz}, \varepsilon_{zx}, \varepsilon_{xy}$

Tabelle 2.3.1 : Zuordnung der irreduziblen Darstellungen des Deformationstensors ε zu den Charakteren (Γ_n , $n=1-5$) der kubischen Punktgruppe T_d .

Um einen geeigneten Spinoperator H_S zur Beschreibung von Verspannungen zu konstruieren, ist es gemäß der Invariantenmethode notwendig, alle direkten Produkte der irreduziblen Darstellungen von \bar{J} und ε zu bilden [Tre79]. Somit gilt:

$$H_S = \sum_{n=1,3,5} \varepsilon(\Gamma_n) \cdot \bar{J}(\Gamma_n) . \quad (2.3.3)$$

Aus den Drehimpulsmatrizen aus Abschnitt 2.2 lassen sich sechzehn linear unabhängige Basismatrizen konstruieren, die den folgenden irreduziblen Darstellungen der Punktgruppe T_d zugeordnet werden können [Bir74, Kar74, Ivc97]:

Γ_n	$\bar{J}(\Gamma_n)$
Γ_1	\hat{I} (4x4 Einheitsmatrix)
Γ_2	$J_x J_y J_z + J_z J_y J_x$
Γ_3	$2J_z^2 - J_x^2 - J_y^2$, $\sqrt{3}(J_x^2 - J_y^2)$
Γ_4	J_x, J_y, J_z und J_x^3, J_y^3, J_z^3
Γ_5	$\{J_y, J_z\}, \{J_z, J_x\}, \{J_x, J_y\}$ und $\{J_x, (J_y^2 - J_z^2)\}, \{J_x, (J_y^2 - J_z^2)\}, \{J_x, (J_y^2 - J_z^2)\}$.

Tabelle 2.3.2 : Zuordnung der irreduziblen Darstellungen des Drehimpulses \bar{J} zu den Charakteren (Γ_n , $n=1-5$) der kubischen Punktgruppe T_d .

Nach Einsetzen der entsprechenden irreduziblen Darstellung von \bar{J} und ε aus den Tabellen 2.3.1 und 2.3.2 in Gleichung 2.3.3 gilt für das Γ_8 -Valenzband folgender Spinoperator [Kar74, Kub96]:

$$H_S^{VB} = a_v \hat{I} \cdot Tr[\varepsilon] + b \cdot [(J_x^2 - J^2/3)\varepsilon_{xx} + zykl.] + 2d/\sqrt{3} \cdot [\{J_x, J_y\}\varepsilon_{xy} + zykl.] \quad (2.3.4)$$

wobei a_v : das hydrostatische Deformationspotential,
 b : das tetragonale Deformationspotential und
 d : das trigonale Deformationspotential des Valenzbandes darstellen.

Die Energieverschiebung für das s -artige Leitungsband ist proportional zur hydrostatischen Komponente der Deformation, nach der Beziehung [Mar88]

$$H_S^{CB} = a_c \cdot Tr[\varepsilon], \quad (2.3.5)$$

mit a_c : der hydrostatischen Deformationspotential des Leitungsbandes.

Im folgenden Schema wird der Einfluss einer hydrostatischen und einer biaxialen kompressiven Verspannung eines Halbleiters auf die Bandstruktur bzw. die optischen Übergänge veranschaulicht :

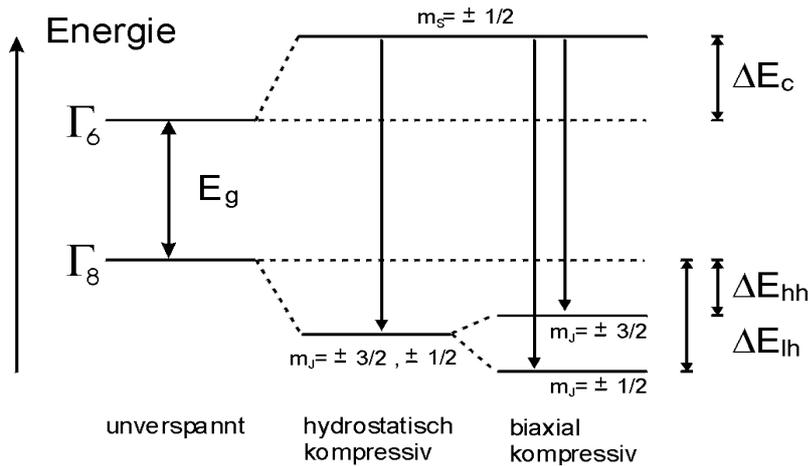


Abbildung 2.3.1 : Schematische Darstellung zum Einfluss einer biaxial kompressiven Verspannung auf die optischen Übergänge bei $\vec{k}=0$.

Während eine hydrostatische Kompression eines Kristalls nur eine Energieverschiebung der optischen Übergänge bzw. der Bandkantenlumineszenz zu höheren Energien bewirkt, führt eine überlagerte biaxiale Kompression in der Schichtebene zu einer Aufhebung der Entartung des $J=3/2$ Valenzbandzustandes in Zustände mit $m_j = \pm 3/2$ (heavy hole **hh**) und $m_j = \pm 1/2$ (light hole **lh**). Die Spinentartung bleibt für eine Verspannung jedoch erhalten. Eine symmetrische kompressive biaxiale Verspannung tritt zum Beispiel bei Epitaxieschichten auf [Loz91], solange die Schicht noch nicht vollständig plastisch relaxiert ist. Eine derartige Verspannung in der Schichtebene kann analog als uniaxiale Zugverspannung in Wachstumsrichtung interpretiert werden.

Die Deformationspotentialkonstanten können durch piezospektroskopische Experimente aus Veränderungen der optischen Übergangsenergien unter einer elastischen Deformation des Kristalls ermittelt werden [All90, Kur92]. Für die Verbindungshalbleiter *ZnSe* und *CdTe* werden für diese Konstanten in der Literatur folgende Werte angegeben:

	a_c [eV]	a_v [eV]	b [eV]	d [eV]	Autor
<i>ZnSe</i>	-3.35	-1.25	-1.17		[Dai94]
			-1.2	-4.3	[Roc91]
<i>CdTe</i>	-2.1	0.55	-1.14		[Pel95]
			-1.17	-3.20	[Gil91]

Tabelle 2.3.2 : Deformationspotentiale für *ZnSe* und *CdTe* bei $T \approx 4\text{K}$.

Für die Werte der Deformationspotentiale ist in der Literatur eine breite Streuung festzustellen. Dies liegt daran, dass durch experimentelle Methoden die absoluten Werte der hydrostatischen Deformationspotentialkonstanten a_c und a_v , nur ungenau bestimmen werden können und diese Parameter wiederum für die Bestimmung der anderen Größen b und d notwendig sind. Das Vorzeichen bei der Herleitung des Hamiltonoperators muss so gewählt werden, dass eine kompressive Verspannung immer zu einer Vergrößerung der Energielücke führt.

2.4 Auswahlregeln der optischen Übergänge

Neben den Übergangsenergien liefern spektroskopische Untersuchungen ebenfalls Informationen zu Übergangsraten für ausgezeichnete Polarisationsrichtungen. In der elektrischen Dipolnäherung folgt für die Übergangsrate W_Γ zwischen dem Leitungs- und Valenzband bei der Emission oder Absorption von Photonen der Energie $\hbar\omega$ nach Fermi's goldener Regel [Car96]:

$$W_\Gamma \propto \sum_{\vec{k}} |P^{CV}|^2 \delta(E^{CB}(\vec{k}) - E^{VB}(\vec{k}) - \hbar\omega), \quad (2.4.1)$$

mit $E^{CB}(\vec{k}), E^{VB}(\vec{k})$: Energiedispersionen von Leitungs- und Valenzband
 P^{CV} : Übergangsmatrixelement.

Die Dirac Notation $|\Psi_J\rangle = |J, m_J\rangle$ für die sphärischen Bandindizes J, m_J erlaubt eine bequeme Operatorschreibweise des Übergangsmatrixelements P^{CV} , mit dem Polarisationsvektor \hat{e} der elektromagnetischen Welle und dem Impulsvektor \vec{p} nach der Formel:

$$P^{CV} = \langle \Psi^C | \hat{e} \cdot \vec{p} | \Psi^V \rangle. \quad (2.4.2)$$

Analytisch werden die Wellenfunktionen der Elektronen und Löcher in den Bändern durch Blochfunktion $u(\vec{x})$ genähert [Bas88]. Handelt es sich um lokalisierte Zustände, werden diese zusätzlich mittels einer Envelope-Funktion $\chi(\vec{x})$ beschrieben. Ihr Ursprung ist das für die Ladungsträger bindende Potential. Sie ist im Gegensatz zu den auf atomarer Skala stark variierenden Bloch-Funktionen über viele Elementarzellen des Kristalls ausgedehnt. Unter Berücksichtigung der Envelope-Funktion folgt der Separationsansatz $|\Psi^{C,V}\rangle = |u^{C,V}\rangle |\chi^{C,V}\rangle$ für die Wellenfunktionen der Ladungsträger in den Bändern. Allgemein gilt für das Übergangsmatrixelement:

$$P^{CV} = \langle u^C | \hat{e} \cdot \vec{p} | u^V \rangle \langle \chi^C | \chi^V \rangle. \quad (2.4.3)$$

Das Skalarprodukt der Envelope-Funktionen der Ladungsträger ist, solange keine Ladungsträgerlokalisierung an Defekten stattfindet, also für freie Teilchen im Volumenhalbleiter, gleich Eins. Die Matrixelemente $\langle u^C | \hat{e} \cdot \vec{p} | u^V \rangle$ lassen sich unter Verwendung der Bloch-Funktionen für das Γ_6 -Leitungsband und das Γ_8 -Valenzband berechnen und sind bekannt [Kön01]. Somit sind die Matrixelemente:

$\langle u^c \hat{e} \cdot \vec{p} u^v \rangle$	$ 3/2, +3/2\rangle$	$ 3/2, +1/2\rangle$	$ 3/2, -1/2\rangle$	$ 3/2, -3/2\rangle$
$\langle 1/2, +1/2 $	$1/\sqrt{2} (\hat{e}_x + i\hat{e}_y)$	$-\sqrt{2/3}\hat{e}_z$	$-1/\sqrt{6} (\hat{e}_x - i\hat{e}_y)$	0
$\langle 1/2, -1/2 $	0	$1/\sqrt{6} (\hat{e}_x + i\hat{e}_y)$	$-\sqrt{2/3}\hat{e}_z$	$-1/\sqrt{2} (\hat{e}_x - i\hat{e}_y)$

Tabelle 3.1 : Übergangsmatrixelemente für Valenz und Leitungsbandzustände. \hat{e}_i sind die Einheitsvektoren parallel zum elektrischen Feldvektor der emittierten Strahlung.

Die mit Null identischen Matrixelemente repräsentieren die dipolverbotenen Übergänge. Für dipol erlaubte Übergänge sind die Matrixelemente ungleich Null, was mit einer linearen beziehungsweise zirkularen Polarisation der optischen Übergängen verbunden ist. Aus der Anwendung von Gleichung 2.4.1 und Tabelle 3.1 geht hervor, dass sich die Strahlungsintensität des (e, hh) -Übergangs zum (e, lh) -Übergang für eine Emission parallel zu einer uniaxialen Störung der Kristallsymmetrie in $z = \langle 001 \rangle$ wie 3:1 verhält. Detaillierte Betrachtungen zur linearen Polarisation strahlender Übergänge werden im KAPITEL 6, Abschnitt 6.1.3 zu verspannungsinduzierenden Defekten diskutiert und interpretiert.

3 EXZITONEN IN HALBLEITERN

Ein Exziton entsteht dadurch, dass ein Elektron aus dem Valenzband ins Leitungsband angeregt wird. Es hinterlässt eine positive Raumladung, das so genannte Loch. Relaxieren die Ladungsträger in die Nähe der Bandkanten, so dass ihre kinetische Energie kleiner wird als die Exzitonenbindungsenergie, bildet sich ein wasserstoff- oder positroniumartiger gebundener Zustand. Verantwortlich hierfür ist die attraktive Coulombwechselwirkung zwischen den beiden Ladungsträgern. Ein freies Exziton ist ein Quasiteilchen, das im Grundzustand einen Drehimpuls $\vec{J}_{\text{Exz}} = \vec{J} + \vec{s}$, mit \vec{J} dem Drehimpuls des Lochs und \vec{s} dem Spin des Elektrons besitzt. Gemäß der Drehimpulsalgebra gilt daher für die im Rahmen dieser Arbeit untersuchten freien Exzitonen $J_{\text{Exz}} = 2, 1$. Die optischen Übergänge von Exzitonen mit $J_{\text{Exz}} = 2$ sind dipolverboten und werden in der Literatur als dunkle Exzitonen bezeichnet.

Die Eigenschaften von Exzitonen in niederdimensionalen Halbleiterstrukturen, insbesondere den eindimensionalen Strukturen, werden im zweiten Abschnitt skizziert. Um die Wechselwirkung einer Versetzung mit einem Exziton theoretisch zu beschreiben, wird eine Versetzung als eindimensionale Störungen des kristallperiodischen Potentials vorgestellt. In den II-VI Halbleitern resultieren hieraus für einen spezifischen Versetzungstyp besondere optische und elektronische Eigenschaften [4,6,12]².

3.1 Energiedispersion des dreidimensionalen Exzitons

In Volumenkristallen lautet die Schrödinger Gleichung für das freie Exziton im Zweiteilchenbild mit den aus KAPITEL 2 vorgestellten Hamiltonoperatoren 2.1 und 2.2 durch Berücksichtigung der Coulombwechselwirkung:

$$\left(E^{CB} + H^{VB} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0|r_e - r_h|} \right) \Psi(r_e, r_h) = E \cdot \Psi(r_e, r_h) \quad (3.1.1)$$

ϵ_0 : Vakuumdielektrizitätskonstante

ϵ_r : relative statische Dielektrizitätskonstante

Um eine Abschätzung für die Exzitonenbindungsenergie im Rahmen des Wasserstoffmodells zu erhalten, ist von BALDERESCHI *et al.* [Bal73] der Hamiltonoperator H^{VB} in einen rein sphärischen und einen rein kubischen Anteil transformiert worden,

$$H^{VB} = H_0 + \delta H_{LS} + \mu H_{\text{warping}} \quad (3.1.2)$$

so dass der Grenzübergang $\delta \rightarrow 0$ und $\mu \rightarrow 0$ für das Valenzband zu einer isotropen parabolischen Energiedispersion führt. Damit lautet der Hamiltonoperator aus Gleichung 3.1.1:

² Bezieht sich auf das Veröffentlichungsverzeichnis im Anhang.

$$H_{ges}^{3D} = E_g - \left(\frac{\hbar^2 \nabla_e^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2 \nabla_h^2}{2m_h^*} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r \epsilon_0 |\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \right). \quad (3.1.3)$$

Dies ermöglicht einen Separationsansatz durch die Einführung von Relativ- \vec{r} und Schwerpunktskoordinaten \vec{R} wie beim zentralkraft-symmetrischen Wasserstoffproblem. Für die Ortskoordinaten der Ladungsträger gilt:

$$\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_h \quad \text{und} \quad \vec{R} = \frac{m_e^* \vec{r}_e - m_h^* \vec{r}_h}{m_e^* + m_h^*}$$

Dadurch ist die Gleichung für die Relativ- von den Schwerpunktskoordinaten entkoppelt und es gelten folgende Gleichungen:

$$\frac{\hbar^2 \nabla_R^2}{2M} \Psi(\vec{R}) = E_R \Psi(\vec{R}) \quad (3.1.4)$$

$$\left(\frac{\hbar^2 \nabla_r^2}{2\mu} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r \epsilon_0 |\vec{r}|} \right) \Phi(\vec{r}) = E_r \Phi(\vec{r}), \quad (3.1.5)$$

mit $\mu = \frac{m_e^* + m_h^*}{m_e^* \cdot m_h^*}$ und $M = m_e^* + m_h^*$.

Gleichung 3.1.4 ist die Bewegungsgleichung eines freien Teilchens der Masse M . Die Eigenfunktionen und Energien sind :

$$\Psi(\vec{R}) = (N)^{-1/2} \exp(i\vec{K}\vec{R}) \quad \text{und} \quad E_R = \frac{\hbar^2 \vec{K}^2}{2M}. \quad (3.1.6)$$

Gleichung 3.1.5 ist die Bewegungsgleichung eines wasserstoffähnlich gebundenen Systems. Die Eigenfunktionen (Exziton-Wellenfunktionen) und die Energie sind dementsprechend äquivalent gegeben durch :

$$\phi_{nlm}(r) = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\varphi, \vartheta) \quad \text{und} \quad E_r = E_g - \frac{R^*}{n^2}. \quad (3.1.7)$$

Mit den Energieeigenwerten aus 3.1.4 und 3.1.5 lässt sich nun die Energie-Impuls-Beziehung eines freien Exzitons im Rahmen des Wasserstoffmodells angeben,

$$h\nu = E_g - \frac{R^*}{n^2} + \frac{\hbar^2 \vec{K}^2}{2M} \quad (3.1.8)$$

mit $R^* = \frac{\mu \cdot e^4}{2\hbar^2 \epsilon_0^2}$: effektive Rydbergkonstante (Bindungsenergie des Exzitons) und

n : Quantenzahl des angeregten Zustandes des freien Exzitons.

Die experimentell bestimmten Bindungsenergien für ein Exziton im $1s$ -Grundzustand sind die wohlbekanntesten Zahlenwerte 19.0meV für $ZnSe$ (4.2K) [Dea81] und 10.5meV für $CdTe$ (1.6K) [Naw80].

3.2 Exzitonen in niederdimensionalen Halbleiterstrukturen

Ein „Quanten-Draht“ ist ein System, in dem die Bewegung der Ladungsträger in zwei Bewegungsrichtungen eingeschränkt ist („confinement“). Wird zudem der letzte Freiheitsgrad der Bewegung reduziert liegt ein „Quanten-Punkt“ vor. Bei einer auf die Ebene reduzierten Bewegung der Elektronen und Löcher spricht man hingegen von einem „Quanten-Trog“. Die geometrische Einschränkung der Beweglichkeit bedeutet, dass die räumliche Ausdehnung eines attraktiven Potentials in mindestens einer Richtung mit der mittleren freien Weglänge der Ladungsträger vergleichbar wird oder diese unterschreitet.

Daraus folgt eine zusätzliche Quantisierung der exzitonischen Energieniveaus in niederdimensionalen Halbleiterstrukturen, die analog zum dreidimensionalen Fall durch die Schrödingergleichung

$$\left(E^{CB} + H^{VB} + V_e(x, y) + V_h(x, y) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \right) \Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = E \cdot \Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) \quad (3.2.1)$$

in Form eines Eigenwertproblems beschrieben werden kann. Hierbei sind $V_h(x, y)$ und $V_e(x, y)$ die für die Lokalisierung der Ladungsträger verantwortlichen Potentiale. Da die Potentiale in Gleichung 3.2.1 jeweils nur Funktionen der zwei kartesischen Koordinaten x und y sind, ist dies die Schrödingergleichung eines Exzitons in einem eindimensionalen ($1D$) Quanten-Draht. Die ausgezeichnete Potentialachse ist die z -Koordinatenachse. Aufgrund des Coulomb-Terms, der nicht nur die Kopplung zwischen Elektron und Loch in z -Richtung beinhaltet, sondern auch den Anteil in der x - y -Ebene, kann die Schrödingergleichung 3.2.1 nicht exakt gelöst werden. In der Literatur werden daher mehrere Approximationsmethoden vorgestellt [Bar91]. Es lassen sich prinzipiell nur für die geometrisch einfachen kasten- oder zylindersymmetrischen Potentialformen analytische Lösungen formulieren [Gar88, Jia91]³.

In sphärischer Näherung und in Vernachlässigung einer $\hbar\hbar/lh$ Aufspaltung des Γ_8 -Valenzbandes, besitzt der Effektive-Masse-Hamiltonoperator aus Gleichung 3.2.1 für einen zylindersymmetrischen Quanten-Draht die Form [Jia91]:

³ Für den komplizierten Fall der Wechselwirkung der Ladungsträger mit Versetzungen über ein versetzungsinduziertes Deformationspotential sind erst in jüngster Zeit Versuche unternommen worden, Gleichung 3.2.1 numerisch zu lösen [Far99, Far01]. Im ANHANG A.1 sind hierzu Symmetriebetrachtungen zum versetzungsinduzierten Deformationspotential angestellt.

$$H_{ges}^{1D} = E_g + \sum_{i=1,2} \left[-\frac{\hbar^2}{2} \nabla_i \left(\frac{1}{m_i^*} \nabla_i \right) + V_i(x, y) \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 |\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \quad (3.2.2)$$

Wobei der Index $i = 1, 2$ die unterschiedlichen Ladungsträger bezeichnet. Die effektive Masse der Ladungsträger ist hier im Gegensatz zu einem 2D Quanten-Trog-System keine Funktion der z -Koordinate. Zur Lösung des quantenmechanischen Eigenwertproblems muss eine geeignete Wellenfunktion gefunden werden. Eine Funktion, die sich in die Einteilchenwellenfunktionen für das Elektron und das Loch und die der Wechselwirkung $\phi(r_{\perp}, r_{\parallel})$ separieren lässt, ist hierfür geeignet

$$\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = (N)^{-1/2} \exp(ik_e z_e) \exp(ik_h z_h) \phi(r_{\parallel}, r_{\perp}). \quad (3.2.3)$$

Hierbei sind $r_{\parallel} = (z_e - z_h)$ und $r_{\perp} = \sqrt{(x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2} >^{1/2}$ die Relativkoordinaten parallel und senkrecht zur Drahtachse.

Ein Problem ist die Bestimmung der Exziton-Wellenfunktion. Eine Möglichkeit ist die unbekannte Funktion $\phi(r_{\parallel}, r_{\perp})$ in ebene Wellen, oder in Gauss-Funktionen zu entwickeln [Ser90, Jia91, Boc92]. Die Entwicklungskoeffizienten können durch Lösung der Schrödingergleichung mit dem Hamiltonoperator 3.2.2 bestimmt werden. Dieses Verfahren ist insbesondere auf Gleichung 3.2.1 bei komplizierten Potentialformen anwendbar [Far01]. Bei einer hinreichenden Anzahl von Entwicklungsgliedern wird eine entsprechend genaue Approximation der Exziton-Wellenfunktion erreicht. Dabei konvergiert die aus der Eigenwertgleichung ermittelte Energie gegen die Bindungsenergie des Exzitongrundzustandes, der die niedrigste Energie besitzt.

Gerade diese Tatsache wird bei der so genannten Variationsmethode ausgenutzt. Hier wird die Wellenfunktion für den Grundzustand des Exzitons in Anlehnung an das Wasserstoffproblem mit

$$\phi(\lambda) = C \chi_e(x, y) \chi_h(x, y) \exp\left(-\frac{r_{\parallel}}{\lambda}\right) \quad (3.2.4)$$

aus der bereits bekannten Radialwellenfunktion abgeleitet. Hierbei ist C eine Normierungskonstante, $\chi_i(x, y)$ die Envelope-Funktionen der ungekoppelten Ladungsträger in den 1D Bändern und λ der Variationsparameter. In 3.2.4 charakterisiert dieser die Ausdehnung des Exzitons in Richtung der Potentialachse und wird so bestimmt, dass die Bindungsenergie des Grundzustandes ein Minimum annimmt,

$$E_{Exz}^{1D} = \min_{\lambda} \langle \phi_{1s}(\lambda) | H_{ges}^{1D} | \phi_{1s}(\lambda) \rangle. \quad (3.2.5)$$

Der Ansatz 3.2.5 mittels der Exziton-Wellenfunktion 3.2.4 ist gerechtfertigt, solange die Coulombwechselwirkung der Ladungsträger im Verhältnis zur Potentialtiefe als kleine Störung betrachtet werden kann. In diesem Fall werden die Envelope-Funktionen infolge der Coulombwechselwirkung nicht oder nur wenig beeinflusst, sondern nur durch die konkrete Form der 1D Potentiale. Resultieren aus konkreten 1D Potentialen jedoch Energieniveaus nahe der Band-

kanten, wird aufgrund des nun dominierenden Einflusses der Coulombwechselwirkung die Exziton-Wellenfunktion gegen den 3D Fall streben.

In der Umgebung des Γ -Punkts besitzt die entsprechende Lösung der Schrödingergleichung mit genähertem Operator für die Gesamtenergie 3.2.2 und der Wellenfunktion 3.2.3 mit 3.2.4 für den Grundzustand die Form,

$$h\nu = E_g - E_e - E_h - E_{Exz}^{1D} + \frac{\hbar^2 K_z^2}{2M_{Exz}}. \quad (3.2.4)$$

Die eindimensionalen Energieniveaus der Ladungsträger sind hierbei mit E_e und E_h bezeichnet und können in Summe als „Lokalisierungsenergie des Exzitons“ aufgefasst werden. M_{Exz} ist die effektive Gesamtmasse des Exzitons in Richtung der freien Dispersion K_z , bestehend aus den Massen des eindimensionalen Elektrons und Lochs $M_{Exz} = m_e + m_h$.

Im Hinblick auf den experimentellen Teil dieser Arbeit sind Polarisierungseffekte der Lumineszenz von Exzitonen in niederdimensionalen Halbleiterstrukturen von besonderem Interesse. Für ein eindimensionales Potential errechneten BOCKELMANN und BASTARD [Boc92] aus einem k - p -Hamiltonoperator, die Polarisationsabhängigkeit des Interbandübergangsmatrixelements P^{CV} in Abhängigkeit vom Polarisationsvektor $\hat{e} = (\cos\varphi \cdot \sin\vartheta, \sin\varphi \cdot \sin\vartheta, \cos\vartheta)$ in Kugelkoordinaten:

$$\left| P^{CV} \right|^2 \propto \left(\chi_{hh}^2 + \frac{1}{3} \chi_{lh}^2 - \frac{2}{\sqrt{3}} \chi_{hh} \chi_{lh} \cos(2\varphi) \right) \cdot \sin^2(\vartheta) + \frac{4}{3} \chi_{lh}^2 \cos^2(\vartheta), \quad (3.2.5)$$

Wobei: $\chi_{hh} = \langle \chi^C | \chi_{hh}^V \rangle = \int \chi_{hh}^x(x) \chi_e^x(x) dx \cdot \int \chi_{hh}^y(y) \chi_e^y(y) dy$
 $\chi_{lh} = \langle \chi^C | \chi_{lh}^V \rangle = \int \chi_{lh}^x(x) \chi_e^x(x) dx \cdot \int \chi_{lh}^y(y) \chi_e^y(y) dy,$

die Skalarprodukte über die Envelope-Funktionen der **hh**- bzw. **lh**-artigen Ladungsträger im Grundzustand in der Ebene senkrecht zur Versetzungslinie sind. Es wird hierbei davon ausgegangen, dass das 1D Potential wie folgt separiert werden kann: $V_i(x, y) = V_i^x(x) + V_i^y(y)$.

Konsequenter Weise kann die lineare Polarisierung der mit der Rekombination von Ladungsträgern innerhalb eines eindimensionalen Potentials assoziierten Lumineszenz als Sonde für die ausgezeichnete Potentialachse herangezogen werden. Die Vorzugsrichtung des elektrischen Feldvektors der Lumineszenz liegt parallel zur ausgezeichneten Achse des Potentials [McI92]. Im KAPITEL 7 wird die Versetzungslumineszenz auf Polarisierungseffekte experimentell überprüft und die erhaltenen Ergebnisse diskutiert.

4 STRUKTURELLE EIGENSCHAFTEN VON VOLUMEN- UND SCHICHTKRISTALLEN MIT ZINKBLENDESTUKTUR

Bei heteroepitaktischem Wachstum von Halbleiterkristallen kommt es aufgrund unterschiedlicher Gitterkonstanten („lattice misfit“ : Gitterfehlanpassung) zur Verspannung in den Grenzflächenbereichen. Die in dieser Arbeit untersuchten II-VI Halbleiter wurden vorzugsweise durch Molekularstrahlepitaxie (MBE : Molecular Beam Epitaxy) auf GaAs Substrat hergestellt. Bei der MBE werden Halbleiterschichten im Ultrahochvakuum gewachsen. Hierbei wird aus Effusionszellen geeignetes Ausgangsmaterial verdampft und auf einem Substrat aufgebracht. Dort finden Oberflächenprozesse, wie z.B. Desorption, Adsorption, Interdiffusion, Aggregation und Gittereinbau statt. Die MBE erlaubt es, mit einer Präzision von weniger als einer Monolage (ML) Bedeckung der Oberfläche, hochreine kristalline Schichten zu wachsen (Frank und van der Merwe Wachstum). Von der Gitterfehlanpassung mit dem Substrat rührt eine biaxiale Verspannung der Schicht her. Solange die Schicht auf die Grenzfläche zum Substrat noch rein elastisch verspannt, also mit dessen Gitterkonstante aufwächst, spricht man von pseudomorphem Wachstum. Die elastische Verspannung wird ab einer kritischen Schichtdicke (h_c) durch plastische Relaxation, d.h. eine Änderung der Kristallstruktur der Schicht, abgebaut. Ein Beispiel hierfür ist die Entstehung von ausgedehnten linienartigen Defekten, den so genannten Versetzungen. Die plastische Relaxation und die damit einhergehenden strukturellen Eigenschaften verspannter Halbleiterschichten während des Wachstumsprozesses werden in der Literatur durch ein kontinuumsmechanisches Modell beschrieben, das im Wesentlichen von J.H. van der Merwe [Mer82] entwickelt wurde.

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels werden die wesentlichen strukturellen Eigenschaften von Versetzungen vorgestellt. Anschließend wird das von van der Merwe entwickelte Modell auf die (001) Wachstumsrichtung von Schichten mit Zinkblendestruktur übertragen.

4.1 Gleitversetzungen in der Zinkblendestruktur

Defekte erniedrigen die Symmetrie des Wirtskristalls. In vielen Fällen besitzen die Defekte jedoch selbst einen gewissen Symmetriecharakter: Als erstes sind Punktdefekte und aus Punktdefekten bestehende Komplexe zu nennen. Sie werden als intrinsisch bezeichnet, wenn sie im thermodynamischen Gleichgewicht vorliegen. Die Punktdefekte besitzen sehr große Relevanz, da sie durch ihre Art und Konzentration die Lage des Fermi-niveaus und somit die elektrische Leitfähigkeit des Materials beeinflussen. Des Weiteren gibt es quasi dreidimensionale Defekte wie Präzipitate und Leerstellenkluster. Hinzu kommen ausgedehnte dreidimensionale Störungen der Kristallperiodizität wie z.B. Zwillinge. Diese werden von Stapelfehlern und Korngrenzflächen begrenzt, die wiederum eine Änderung der Kristallphase in zwei Dimensionen darstellen.

Die technologische Kontrolle von Versetzungen und Stapelfehler, als ein- bzw. zweidimensionale Kristallbaufehler, spielt aufgrund der komplexen Beziehungen zwischen ihren strukturellen und dynamischen Eigenschaften einerseits und ihrer elektronischen Wirksamkeit andererseits in

der Heteroepitaxie eine besonders wichtige Rolle. Versetzungen definieren sich durch ihre topologischen Eigenschaften [hir82, hul84]:

- Der Burgersvektor \vec{b} ist ein „Geschlossenheitsfehler“ im Kristall, der sich bei einem Umlauf im Gitter bei Präsenz eines Defekts ergibt. Er ist längs einer unverzweigten Versetzung eine Erhaltungsgröße.
- Eine Versetzung mit tangentialem Linienvektor \vec{s} beginnt oder endet niemals im Inneren eines Kristalls, sondern immer nur in sich selbst (Versetzungsschleife) oder an einer inneren oder äußeren Oberfläche (Durchstoßversetzung).
- Gleitebenen mit Ebenenvektor \vec{E} sind die bevorzugten Netzebenen der höchsten Packungsdichte einer Gitterstruktur. Sie sind definiert durch $\vec{E} = \vec{b} \times \vec{s}$, d.h., in ihnen liegen die Versetzungslinien und können sich durch Gleitbewegung ausbreiten (Peierls-Mechanismus) [Pei40].
- Nur Versetzungen mit dem kürzesten oder zweitkürzesten Burgersvektor sind stabil (Frank'sches Energiekriterium [Fra88]).

Von einer vollständigen Versetzung spricht man, wenn der Burgersvektor gleich einem Translationsvektor des Gitters ist. Der kristallographische Typ einer Versetzung ist aufgrund obiger Definitionskriterien durch den Winkel zwischen Versetzungslinienrichtung \vec{s} und Burgersvektor \vec{b} bestimmt. Das ermöglicht die Unterscheidung von verschiedenen Versetzungstypen. Liegt der Burgersvektor parallel zur Versetzungslinie, handelt es sich um eine vollständige Schraubenversetzung, liegt er senkrecht dazu, um eine vollständige Stufenversetzung. Das dritte Kriterium definiert für die *fcc* Basisstruktur alle $\{111\}$ Ebenen als Gleitebenen. Ein Gleitsystem von Versetzungen wird durch den Burgersvektor und den Gleitebenenvektor vollständig charakterisiert. Die Richtung des Burgersvektors gibt dabei die Bewegungsrichtung der Versetzung in der Gleitebene an.

Da die Zinkblendstruktur aus zwei um ein Viertel der Raumdiagonale verschobenen und zudem bei den II-VI Halbleitern noch relativ stark ionischen *fcc* Untergittern besteht, handelt es sich bei den $\{111\}$ Gleitebenen um polare „Doppelebenen“. So sind zum Beispiel alle Ebenen in der $[111]$ Richtung \vec{A} terminiert und in der antiparallelen $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ Richtung \vec{B} terminiert. Die Richtungen sind eindeutig festgelegt durch die Wahl der Lage des Koordinatenursprungs in einem Anion (\vec{A} -Atom). Aufgrund dieser Tatsache treten in der Zinkblendstruktur auch verschieden polare Versetzungen auf, die je nach Besetzung der letzten Atomreihe im Versetzungskern [Abr72] unterschiedliche Eigenschaften besitzen.

Im Jahre 1953 wurde von THOMPSON [Tho53] vorgeschlagen, sich die Lage der Burgersvektoren von Versetzungen im *fcc* Gitter an einem Tetraeder zu verdeutlichen, dessen vier Oberflächen die $\{111\}$ Netzebenen repräsentieren. Diese Modellvorstellung kann ebenfalls auf die Diamantstruktur übertragen werden. In der Zinkblendstruktur ist es jedoch wegen der fehlen-

den Inversionssymmetrie konsequent, die Burgersvektoren der polaren Versetzungen mittels zweier Tetraeder darzustellen [Bro89].

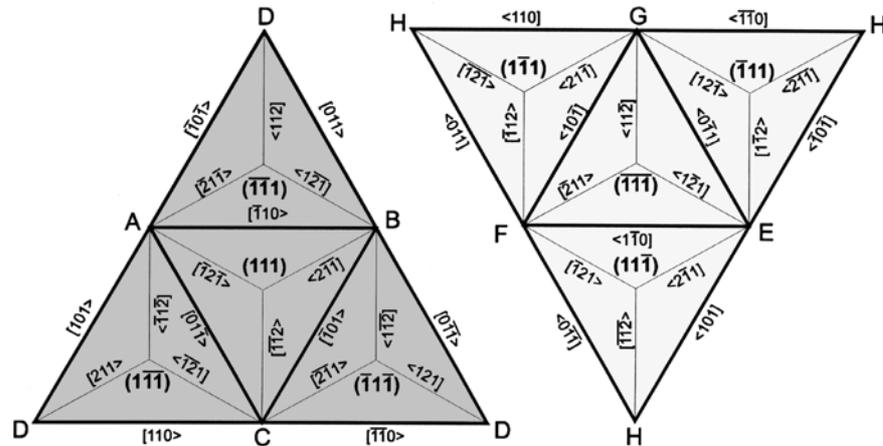


Abbildung 4.1.1 : Aufgeklappte polare Thompson-tetraeder als Modell der polaren Gleitsysteme. Die Notation der Richtungen bezieht sich bei beiden Tetraedern auf die Außenflächen. Die Versetzungen gleiten jedoch auf den Innenflächen der Tetraeder.

Es handelt sich hierbei um jeweils einen Tetraeder für eine Seite der polaren $\{111\}$ Doppelseiten. Die Abbildungen stellen die aufgeklappten \bar{A} bzw. \bar{B} terminierten Oberflächen der Tetraeder dar, wie sie jeweils aus vier $\{111\}$ Ebenen gebildet werden. Die Spitze D des linken \bar{A} -Tetraeders liegt unterhalb der Zeichenebene (internal Apex), die Spitze H des rechten \bar{B} -Tetraeders liegt oberhalb der Zeichenebene (external Apex). Die Notation der Richtungen bezieht sich bei beiden Tetraedern auf die Außenflächen.

Versetzungen in $\{111\}\langle 110 \rangle$ Gleitsystemen, können durch Einschub oder Herausnahme von $\{111\}$ Halbebenen gebildet werden. Diese werden als vollständige 60° -Versetzungen bezeichnet. Diese besitzen den Burgersvektor $\bar{b}_{60^\circ} = b_0/2 \langle 110 \rangle$. Die Linienrichtungen und die zugehörigen Burgersvektoren aller 60° -Versetzungen lassen sich leicht aus dem Thompson-tetraedermodell in Abbildung 4.1.1 entnehmen. Es sind alle Linien, unter denen sich zwei $\{111\}$ Netzebenen schneiden, also die $\langle 110 \rangle$ Kanten der Thompson-tetraeder.

Atomistisch betrachtet ist allerdings darauf zu achten, auf welche Weise eine $\{111\}$ Halbebenen auf einer $\{111\}$ Netzebene im Kristall endet. Formal existieren Versetzungen mit gleicher Linienrichtung \bar{s} und gleichem Burgersvektor \bar{b} , die jedoch eine unterschiedliche Kernstruktur besitzen können. In Abbildung 4.1.2 wird dieser Sachverhalt veranschaulicht.

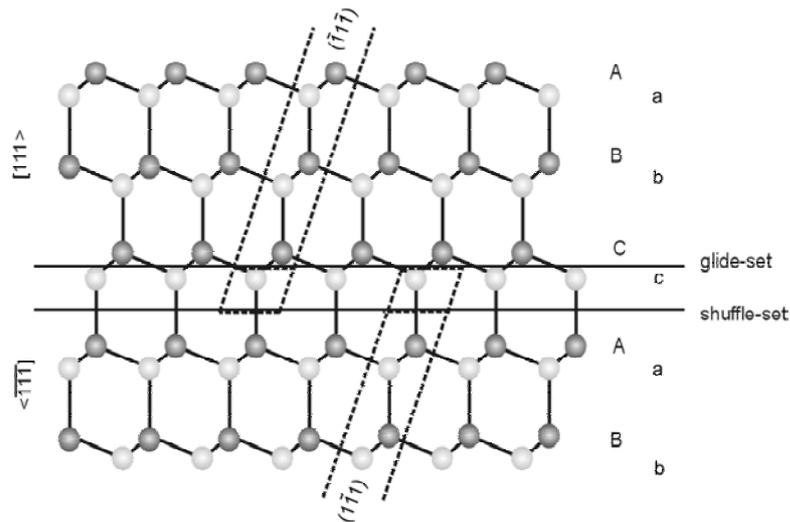


Abbildung 4.1.2 : Schematische Darstellung zur Bildung von polaren Stufenversetzungen. Die markierten $\{111\}$ Halbebenen können auf unterschiedliche Weise auf einer Gleitebene enden. Abhängig davon, ob die Halbebenen im *glide*- oder *shuffle*-set enden, werden unterschiedliche Versetzungen gebildet.

Die in Abbildung 4.1.2 durchgezogene Linie spezifiziert durch „*glide*-set“ repräsentiert den Schnitt senkrecht zur Zeichenebene durch eine waagrechte (111) Netzebene. Diese unterteilt den Raum in einen oberen und einen unteren Halbraum. Die mit Punkten umrahmten Atome in Abbildung 4.1.2 stellen zwei $\{111\}$ Halbebenen dar, die jeweils auf unterschiedlichen Seiten der (111) Netzebene enden. Die einfachste Vorstellung zur Bildung von polaren Stufenversetzungen ist nun die folgende:

Zwei Versetzungen mit unterschiedlicher Kernstruktur können gebildet werden, wenn in der Abbildung zum Beispiel die obere umrahmte $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ Halbebene aus dem Kristall herausgenommen wird. Abhängig davon, ob die *glide*- oder die *shuffle*-Konfiguration (Abb. 4.1.2 waagrechte Linie spezifiziert durch „*shuffle*-set“) realisiert wird, werden dabei eine unterschiedliche Anzahl von Bindungen pro Atom gebrochen. In der *glide*-Konfiguration werden jeweils drei Bindungen gebrochen, in der *shuffle*-Konfiguration muss pro Atom nur eine Bindung aufgebrochen werden. Die Polarität der Versetzungslinie invertiert sich jeweils beim Übergang von der *glide*- in die *shuffle*-Konfiguration.

Es folgt nun eine kurze Bemerkung zur Nomenklatur der Versetzungen. In der Literatur wird ebenso häufig der Ausdruck $\bar{A}(g)$ und $\bar{B}(g)$ für Versetzungen in der *glide*-Konfiguration verwendet, beziehungsweise $\bar{A}(s)$ und $\bar{B}(s)$ für Versetzungen in der *shuffle*-Konfiguration (spielt im Weiteren eine untergeordnete Rolle). Die Großbuchstaben \bar{A} und \bar{B} bezeichnen dabei die Atomsorte der letzten Atomreihe im Versetzungskern. Folgende Bezeichnungen sind daher äquivalent:

$\alpha / \bar{B}(g)$	$\beta / \bar{A}(g)$
<i>Se</i> (g)	<i>Zn</i> (g)
<i>Te</i> (g)	<i>Cd</i> (g)

Tabelle 4.1 : Zur Nomenklatur von Gleitversetzungen.

In dieser Arbeit bezeichnen α und β den Gleitversetzungstyp in II-VI Zinkblendestrukturhalbleitern. Die Bezeichnung $\bar{B}(g)$ bzw. $\bar{A}(g)$ findet überall dort Verwendung, wo von einem Versetzungstyp in einem speziellen Halbleitermaterial die Rede ist.

Trotz der geringeren Anzahl der gebrochenen Bindungen pro Versetzungslänge ist jedoch die *shuffle*-Konfiguration nicht diejenige, welche am wahrscheinlichsten realisiert wird. Aufgrund von geringeren Gitterverzerrungen und zugehörigen Bildungsenergien werden Versetzungen mit kleinerem Betrag des Burgersvektors favorisiert (Frank'sches Energiekriterium). Nur in der *glide*-Konfiguration ist es für eine vollständige 60° -Versetzung möglich, in zwei Shockley-Partialversetzungen mit jeweils kleinerem Betrag der Burgersvektoren zu dissoziieren. Eine Dissoziation von vollständigen Versetzungen in zwei Shockley-Partialversetzungen wird durch die Reaktionsgleichung

$$b_0/2 \langle 110 \rangle \leftrightarrow b_0/6 \langle 211 \rangle + b_0/6 \langle 12\bar{1} \rangle \quad (4.1)$$

ausgedrückt. Die Partialversetzungen besitzen unterschiedliche Burgersvektoren. Eine 90° -Partialversetzung besitzt den Burgersvektor $\bar{b}_{90^\circ} = b_0/6 \langle 211 \rangle$ und eine 30° -Partialversetzung den Burgersvektor $\bar{b}_{30^\circ} = b_0/6 \langle 12\bar{1} \rangle$. Beide Partialversetzungen sind durch einen Stapelfehler voneinander getrennt. Die Formation des Stapelfehlers ist energetisch günstig. Für eine vollständige 60° -Versetzung ist es nur in der *glide*-Konfiguration möglich, den Kern einer 60° -Versetzung durch Aufbrechen und Rekonstruktion von Atombindungen umzukonfigurieren und einen Stapelfehler zu bilden. Analog dazu kann eine vollständige Schraubenversetzung in zwei 30° -Partialversetzungen unterschiedlicher Polarität dissoziieren.

Die geometrische Darstellung von Gleichung 4.1 ist in Abbildung 4.1.3 zu finden. Abgebildet ist eine dissoziierte hexagonale Versetzungsschleife, die durch eine ausreichend große Scherkraft $\bar{\sigma}$ in einer (111) Gleitebene entstanden sei. Die hexagonale Versetzungsschleife umrandet den abgeglittenen Bereich. Außerhalb der beiden Shockley-Partialversetzungsschleifen ist die Deformation rein elastisch. Der Stapelfehler, der sich zwischen den beiden Shockley-Partialversetzungsschleifen befindet, ist für sich genommen ein eigenständiger elektrisch neutraler zweidimensionaler Kristalldefekt. Eine wichtige Tatsache ist, dass der Stapelfehler für die gesamte dissoziierte hexagonale Versetzungsschleife die selbe atomare Struktur besitzt.

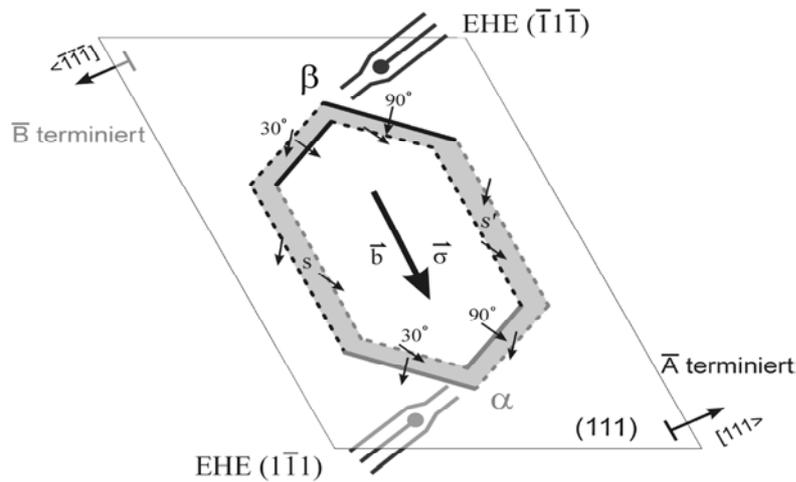


Abbildung 4.1.3 : Modell einer hexagonalen Versetzungsschleife in der *glide*-Konfiguration in einer (111) Gleitebene. Alle Versetzungssegmente sind gemäß Gleichung 4.1 in Shockley-Partialversetzungen dissoziiert. Die beiden Partialversetzungsschleifen beranden ein Stapelfehlerband (grau hinterlegt). Dieses stellt einen zweidimensionalen Kristalldefekt dar. Die Abkürzungen EHE bezeichnen zwei eingeschobene Halbebenen, die auf den beiden Seiten der polaren (111) Netzebene enden und sollen das Abgleiten verdeutlichen.

Die verschiedenen Segmente der Schleife entsprechen unterschiedlichen Versetzungstypen. Die Segmente besitzen ebenfalls unterschiedliche Mobilität. In den Verbindungshalbleitern mit Zinkblendestruktur sind die 90°- α -Partialversetzungen diejenigen mit der größten Mobilität. Zwischen α - und β -Versetzungen besteht in *ZnSe* ein Mobilitätsunterschied von ungefähr 100:1 und in *CdTe* von rund 2:1 [Osi86, Rab00].

Die Kernstruktur für ein Versetzungssegment, exemplarisch eine dissoziierte 60°- α -Gleitversetzung, ist in der folgenden Abbildung 4.1.4 wiedergegeben.

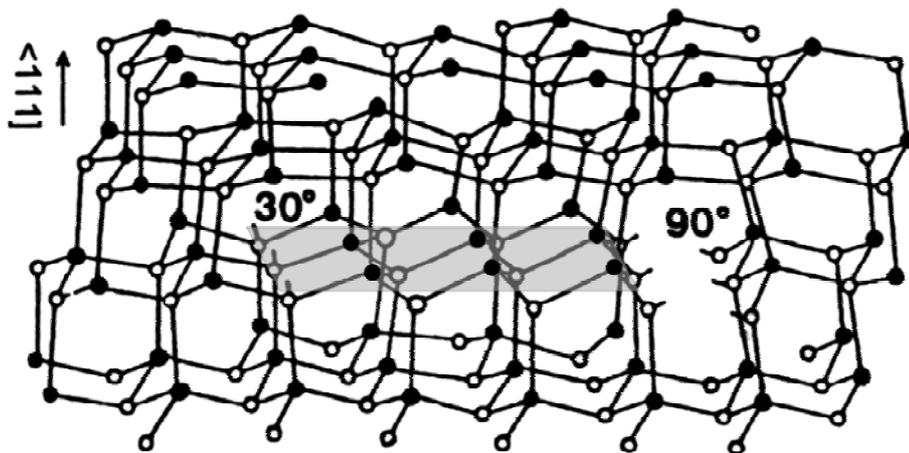


Abbildung 4.1.4 : Atomistisches Modell einer dissoziierten 60°- α -Versetzung in der Zinkblendestruktur. Eine 90°- und eine 30°-Shockley-Partialversetzung beranden einen Stapelfehler. Es wird davon ausgegangen, dass die atomaren Bindungen in den Versetzungskernen rekonstruiert sind.

Für Elementhalbleiter wird angenommen, dass die Bindungen im Kern der 90°- und 30°-Partialversetzungen rekonstruiert sind und nicht unabgesättigt als so genannte „dangling bonds“ existieren [Heg91]. Für III-V Halbleiter wie *GaAs* existieren theoretische Abschätzungen unter

Berücksichtigung von Bindungs-, elastischen und elektronischen Anteilen. Eine Rekonstruktion führt zu Verzerrungen der atomaren Bindungen, das bedeutet eine Änderung der Bindungswinkel und Bindungslängen. Dies muss energetisch durch die Absättigung der Bindungen überkompensiert werden. Es wird davon ausgegangen, dass die Rekonstruktion bei den 90° -*Ga*-Partialen aufgrund eines geringeren *Ga-Ga* Bindungsabstandes stärker ist als bei den 90° -*As*-Partialen. Diese Tatsache wird mit einer erhöhten Gleitbeweglichkeit der *As*-Partiale korreliert [Mae85, Jon93, Sit94]. Bei den II-VI Halbleitern liegen bisher noch keine gesicherten Ergebnisse zur Rekonstruktion der Bindungen in den Partialversetzungskernen vor.

4.2 Strukturelle Eigenschaften dünner Epitaxieschichten

Beim Zusammenschluss zweier *fcc* Kristalle A und B mit Gitterkonstanten a_0 und b_0 an einer beliebigen, jedoch glatten Grenzfläche [Pon88, Bil55] tritt ein Geschlossenheitsfehler \vec{B} als Summe von diskreten Burgersvektoren auf für den Fall, dass bei einem Burgersumlauf die Grenzfläche (=„Interface“) durchstoßen wird.

Bezüglich eines beliebigen in der Grenzfläche gelegenen Vektors \vec{V} besitzt \vec{B} je eine Komponente parallel und senkrecht zu \vec{V} im Interface und eine dritte Komponente senkrecht zur Grenzfläche. Die Größe f proportional zum Produkt $\vec{B} \cdot \hat{v}$ (mit \hat{v} Einheitsvektor parallel \vec{V}) ist die natürliche Gitterfehlpassung⁴

$$f = \frac{\vec{B} \cdot \hat{v}}{|\vec{V}|} = \frac{b'}{|\vec{V}|} \quad (4.2)$$

b' ist die Projektion der Stufenkomponente des Burgersvektors auf die Grenzflächenebene parallel zum Vektor \vec{V} . Die Komponente senkrecht zu \vec{V} ist die Scherkomponente. Wird nun \vec{V} repräsentativ für einen Gittervektor in der Grenzfläche des als halbinendlich zu betrachtenden Substratkristalls A gewählt, dann erhält man nach JESSER *und* VAN DER MERWE [Jes89] mit der Substratgitterkonstanten a_0 entlang einer Einheitsrichtung \hat{a} für die Gitterfehlpassung

$$f \rightarrow f_0 = \frac{b_0 - a_0}{1/2(b_0 + a_0)} \hat{a} \quad (4.3)$$

mit b_0 , der natürlichen Gitterkonstante des Schichtkristalls B. Die Wahl des Substratkristalls A als halbinendlichen Referenzkristall, d.h. der Übergang von $f \rightarrow f_0$ in Gleichung 4.3, ist kontinuumsmechanisch (in der Ableitung der auftretenden Verspannungskräfte aus den harmonisch approximierten Atombindungspotentialen) äquivalent mit der Bedingung homogen nahezu unverspannter Substrate [Ball83]. Es folgt hieraus der wesentliche Punkt :

⁴ Die gewählte Definition der Gitterfehlpassung [Jes89] ist bezüglich der Wahl der Orientierungen von Substratkristall und Schicht nicht auf kubische Achsen beschränkt.

- Die gesamte mechanische Energie $W^{mech.} \sim f_0$ wird in der Epitaxieschicht gespeichert.

Um die mechanische Energie aus einer mikroskopischen Betrachtungsweise heraus analytisch zu beschreiben, sind sowohl die energetischen Beiträge aufgrund der Verzerrungen von Bindungen in der Schicht als auch im Bereich der Grenz- und Oberfläche zu berücksichtigen. Daher ist dies im Allgemeinen nicht möglich. Aus diesem Grund wird für die Beschreibung struktureller Eigenschaften von Epitaxieschichten in der Literatur ein kontinuumsmechanisches Modell herangezogen.

In vielen Fällen wird technologisch das geometrisch einfache A(001)/B(001) Wachstum, d.h. der Spezialfall einer gleichen Orientierung von Schicht und Substrat entlang einer Kristallachse mit kubischer Symmetrie realisiert. Beispiele dafür sind das heteroepitaktische Wachstum von kompressiv verspannten II-VI auf III-V Verbindungen wie $ZnSe(001)/GaAs(001)$ oder $CdTe(001)/GaAs(001)$. In beiden Fällen erhält die natürliche Gitterfehlpassung wegen $b_0 > a_0$ ein positives Vorzeichen⁵. Die Fehlanpassung zwischen zwei Halbleiterkristallen hängt von der Substrattemperatur ab. Für die Materialkombination $ZnSe$ auf $GaAs$ sind in Abbildung 4.2.1 die thermischen Ausdehnungskoeffizienten der Halbleiter in Abhängigkeit der Temperatur aufgetragen. Die thermisch induzierte Gitterfehlpassung besitzt bei der genannten Materialverbindung das gleiche Vorzeichen wie f_0 . Dies bedeutet, dass bei einer Abkühlung des Systems unter die Wachstumstemperatur (ca. 300°C) die mechanisch gespeicherte Energie der Schicht abnimmt.

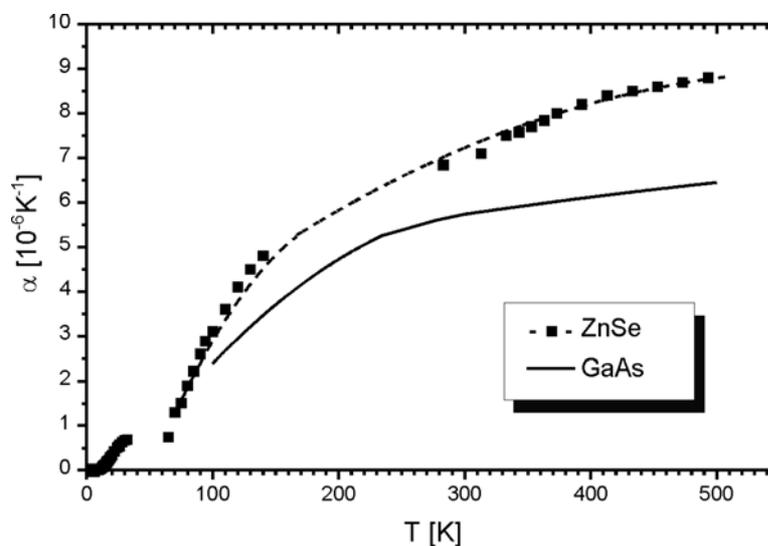


Abbildung 4.2.1: Thermischer Ausdehnungskoeffizient von $ZnSe$ und $GaAs$ in Abhängigkeit von der Temperatur [LanBör]. Bei der Verwendung von $GaAs$ als Substrat- und $ZnSe$ als Schichtmaterial sinkt die kompressive Verspannung der Schicht bei Abkühlung unter die Wachstumstemperatur von ca. 300°C.

Verschiedene Arten der Relaxation der Gitterfehlpassung können auftreten, falls die Voraussetzung eines halbunendlichen Substratkristalls nicht erfüllt ist. Für dünne Substrate und

⁵ Die Schichtverzerrung ε , definiert unter 4.4 erhält bei einer Verkleinerung der Gitterkonstanten in konsistenter Weise ein negatives Vorzeichen.

Schichten ist es möglich, dass sich die Schichtsysteme infolge der mechanischen Spannung krümmen, für dicke Substrate und vergleichbare Schichten kann ein Verspannungsgradient im Bereich der Grenzfläche die Gitterkonstante des Substrates kontinuierlich auf die Gitterkonstante der Schicht anpassen. Diese Fälle sind im Weiteren jedoch nicht von Interesse.

Solange die Schicht auf die Grenzfläche rein elastisch verspannt, also noch mit der gleichen Gitterkonstante wie das Substrat aufwächst, dieser Fall ist in Abbildung 4.2.2b dargestellt, spricht man von pseudomorphem Wachstum. Der in der Literatur anzutreffende Ausdruck kohärentes Wachstum ist ebenso gebräuchlich.

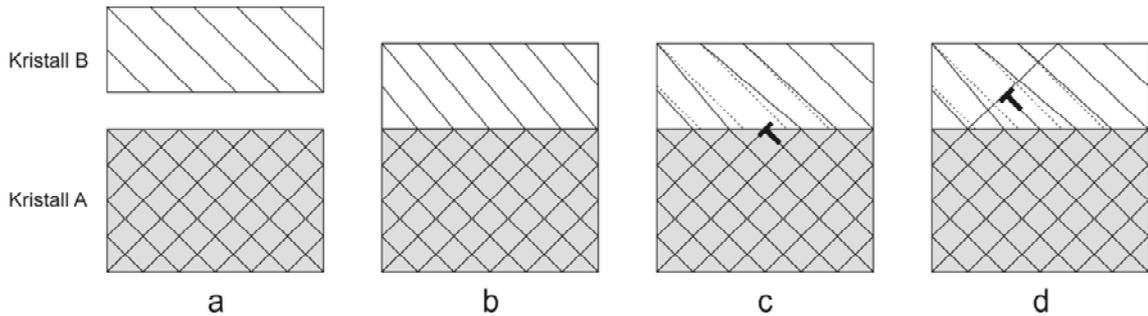


Abbildung 4.2.2: Schematische Darstellung zur plastischen Relaxation einer Halbleiterheterostruktur.

4.2.2a) Zwei als isoliert zu betrachtende Kristalle A und B

mit Gitterkonstanten a_0 (Referenz) und b_0 besitzen die natürliche Fehlanpassung f_0 .

4.2.2b) Kohärent aufgewachsene Schicht.

4.2.2c & d) Schicht nach plastischer Relaxation durch Misfit-Versetzungen.

Unter partieller Relaxation versteht man, dass trotz des Einbaus von Versetzungen die Schicht noch eine extrinsische Restverspannung besitzt. Es gilt dann :

$$f_0 = f + \varepsilon \quad (4.4)$$

Ausdruck 4.4 repräsentiert den Zusammenhang zwischen der natürlichen Fehlanpassung f_0 der Kristallgitter, der durch die Versetzungsdichte induzierten plastischen Relaxation f und der elastischen Restverspannung ε der Schicht. Weiterhin gilt:

$$f = D \cdot |\bar{b}| \cdot \sin \beta \cos \gamma \quad \text{und} \quad \varepsilon = \frac{b - b_0}{b_0} \quad (4.5)$$

mit D : homogen gemittelte Versetzungsdichte.

β : Winkel zwischen Versetzungslinie \bar{s} und Burgersvektor \bar{b} .

γ : Winkel zwischen Grenzfläche und Gleitebene.

Die Restverspannung ε ist während des gesamten Relaxationsprozesses eine Funktion der Gitterkonstante des undeformierten Schichtkristalls (b_0) und der realen mittleren Gitterkonstante b der Schicht. Die durch Versetzungen induzierte plastische Relaxation f ist proportional zur homogenen Versetzungsdichte D und zur Projektion des Burgersvektors auf die Grenzfläche ($b' = |\bar{b}| \cdot \sin \beta \cos \gamma$). Stufenversetzungen leisten hierbei wegen der günstigen Lage des Burger-

svektors senkrecht zur Versetzungslinie den effektivsten Spannungsabbau. Da die Scherkomponenten quasi bedeutungslos sind, ist der Beitrag einer Schraubenversetzung zum Spannungsabbau wegen der Lage des Burgersvektors parallel zur Versetzungslinie vernachlässigbar gering.

Wenn der elastische Anteil der Energie pro Fläche und die Energie einer Versetzung pro Einheitslänge bekannt sind, lässt sich ein Energiekriterium für Schichten mit der Dicke d formulieren. Die elastische Energie pro Einheitsfläche L^2 ist gegeben durch:

$$\frac{W^{elast.}}{L^2} = [\mu/(1-\nu)] \cdot d \cdot (\varepsilon_{xx}^2 + \varepsilon_{yy}^2 + 2\nu \cdot \varepsilon_{xx} \varepsilon_{yy}) \quad (4.7)$$

- ν : Poissonzahl
- μ : Schermodul
- d : Schichtdicke

Für die Linienenergie einer Versetzung gibt es in der Literatur zwei Ansätze, die für große Abstände zwischen Einzelversetzungen oder ausreichend große Schichtdicken immerhin die gleiche Aussage liefern: Das ausschließlich für isolierte Einzelversetzungen oder große Schichtdicken $d \ll b_0$ gültige VOLTERRA-Modell [Mat79] und das FRENKEL-KONTOROVA-Modell (FK-Modell) [Fre38], welches auch für wenige Monolagen dicke Schichten gültig ist.

Die schon nach einer Monolage entstandene Versetzung in Abbildung 4.2.2c muss wegen ihrer Lage in der Grenzfläche zwischen Schicht und Substrat nach dem FK-Modell behandelt werden. Im Gegensatz dazu kann die Linienenergie der Misfit-Versetzung, die wie in Abbildung 4.2.2d dargestellt durch einen Gleitprozess entstanden ist, nach dem Volterra-Modell erhalten werden. Hierbei ist es nicht relevant, ob die dargestellte Misfit-Versetzung in Abbildung 4.2.2c durch einen Gleitprozess aus der Richtung vom Substrat oder von der Oberfläche oder aber durch einen Quergleitprozess in die Lage parallel Heterogrenzfläche gelangt ist.

Im Rahmen der Elastizitätstheorie (Volterra-Modell) lautet die Approximation der Energie pro Einheitslänge einer Versetzung mit Burgersvektor \vec{b} :

$$\frac{W^{Vers.}}{L} = \frac{\mu}{4\pi} |\vec{b}|^2 \left(\cos^2 \beta + \frac{\sin^2 \beta}{1-\nu} \right) \ln \left(\rho \frac{R}{|\vec{b}|} \right) \quad (4.8)$$

- R : äußerer Abschneideradius
- ρ : Phänomenologischer Faktor zur Berücksichtigung inelastischer Anteile zur Energie der Versetzung.

Nach BALL *und* VAN DER MERWE [Ball83] können die oben schon eingeführte Poissonzahl ν und der Schermodul μ als Interface-Poissonzahl bzw. Interface-Schermodul betrachtet werden für den Fall, dass eine Versetzung in der Substratgrenzfläche entstanden ist (s. Abb. 4.2.2c). Das

sind dann im konkreten Fall die aus den Werten für Substrat und Schicht gemittelten Werte. Ebenso findet man in der Literatur bei Berechnungen der Energie von Versetzungen immer einen äußeren Abschneiderradius. Dieser ist deswegen notwendig, da sonst die Linienenergie einer Versetzung aufgrund des Logarithmus für $R \rightarrow \infty$ über alle Grenzen steigen würde. Normalerweise wird dieser gleich dem halben mittleren Abstand p zwischen zwei Versetzungen gesetzt. Das entspricht einer homogenen Mittelung der Versetzungsdichte. Bei Epitaxieschichten jedoch bauen die Misfit-Versetzungen die elastische Energie der Schicht ab, daher setzt man den Abschneiderradius R bei dünnen Schichten gleich der Schichtdicke d , solange der mittlere Abstand zwischen zwei benachbarten Misfit-Versetzungen hinreichend groß gegen d ist. Gerade für dünne Schichten, also kurz vor dem Erreichen der kritischen Dicke h_c , ist die Versetzungsdichte noch so gering, dass Beiträge zur Energie, die aus einer Interaktion von Versetzungen herrühren, in guter Näherung vernachlässigt werden können.

Für ein orthogonales Versetzungsnetzwerk mit mittleren Abständen p_1 und p_2 zwischen den Versetzungen resultiert unter Verwendung von Gleichung 4.8 die Versetzungsenergie pro Einheitsfläche

$$\begin{aligned} \frac{W^{Vers.}}{L^2} &= \left(\frac{1}{p_1} \frac{W_1^{Vers.}}{L_1} + \frac{1}{p_2} \frac{W_2^{Vers.}}{L} \right) \\ &= \frac{\mu}{4\pi(1-\nu)} \left[\frac{|f_1 \bar{b}_1| (1-\nu \cos^2 \beta_1)}{\sin \beta_1 \cos \gamma_1} \ln \left(\rho \frac{R}{|\bar{b}_1|} \right) + \frac{|f_2 \bar{b}_2| (1-\nu \cos^2 \beta_2)}{\sin \beta_2 \cos \gamma_2} \ln \left(\rho \frac{R}{|\bar{b}_2|} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.9)$$

Alle Größen in Gleichung 4.9 sind indiziert, da sie für geometrisch nicht äquivalente (orthogonale) Versetzungssysteme richtungsabhängig sind. Durch Addieren der Gleichungen 4.7 und 4.9 lässt sich unter der Annahme, dass sich die Energiedichten wie die Verzerrungen in Beziehung 4.4 addieren lassen, ein Ausdruck für die Energie pro Fläche einer durch Versetzungen partiell relaxierten Schicht formulieren :

$$f_0 \sim \frac{W^{mech.}}{L^2} = [\mu/(1-\nu)] \cdot d \cdot (\varepsilon_{xx}^2 + \varepsilon_{yy}^2 + 2\nu \cdot \varepsilon_{xx} \varepsilon_{yy}) + \sum_{i=1,2} \frac{|f_i \bar{b}_i| (1-\nu \cos^2 \beta_i)}{\sin \beta_i \cos \gamma_i} \ln \left(\rho \frac{R_i}{|\bar{b}_i|} \right) \quad (4.10)$$

Die Gleichgewichtsbedingung, die nun an die aufgewachsene Schicht gestellt wird, lautet:

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon} f_0 \approx \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\frac{W^{mech.}}{L^2} \right) \Bigg|_{d=h_c} = 0 \quad (4.11)$$

Versetzungen können erstmals gebildet werden, wenn die elastisch gespeicherte Energie gleich der Energie eines Versetzungstyps ist. Mit dieser Beziehung wird aktuell in der Literatur [Pin98] die kritische Schichtdicke von (001) gewachsenen Schichten mit Zinkblendestruktur berechnet. Implizit wird dabei jedoch immer von der Annahme ausgegangen, dass die

Gleitsysteme für die α - und β -Versetzungen als äquivalent zu betrachten sind. Wird die Polarität der 60° -Versetzungen in der Zinkblendestruktur ignoriert, liefert die Gleichgewichtsbedingung 4.11 für beide Versetzungssysteme die implizite Relation:

$$h_c = \frac{|\bar{b}|(1 - \nu \cos^2 \beta)}{8\pi|f_0|(1 + \nu) \sin \beta \cos \gamma} \ln \left(\rho \frac{h_c}{|\bar{b}|} \right). \quad (4.12)$$

Gleichung 4.12 reproduziert für sehr viele leicht bis mittel gitterfehlangepasste II-VI Halbleiterschichten den qualitativen Verlauf der kritischen Schichtdicke in Abhängigkeit von der Gitterfehlanpassung [Pin98]. Quantitativ betrachtet liegt die experimentell ermittelte kritische Schichtdicke jedoch um eine Größenordnung höher, als durch Gleichung 4.12 vorhergesagt. Als Ursache dafür wird eine Energiebarriere für die Nukleation von Versetzungen angenommen [Jai94, Jai97]. Diskutiert wird in diesem Zusammenhang der Beitrag der inelastischen Anteile zur Energie der Versetzung, der bei einer Nukleation aufgebracht werden muss. Des Weiteren muss konsequenterweise in der Zinkblendestruktur, im Unterschied zur *fcc* Basisstruktur oder zur räumlich „verdoppelten“ Diamantstruktur mit nur einem $\{111\}\langle 110 \rangle$ Hauptgleitsystem, zwischen zwei polaren Versetzungsgleitsystemen durch das Vorzeichen des Gleitebenenvektors unterschieden werden, siehe Thompson-tetraeder Abbildung 4.1.1 :

- Dem α -Versetzungssystem mit den $\{111\}$ Gleitebenen und dem β -Versetzungssystem mit den $\{\bar{1}\bar{1}\bar{1}\}$ Gleitebenen.

Dies gilt, sobald die Versetzung eine von Null verschiedene Stufenkomponente besitzt [Abr72], also für Winkel $\beta > 0$. Unerwarteterweise findet man in der aktuellen Literatur für die (001) Wachstumsrichtung der II-VI Halbleiter keine solche differenzierte Betrachtung. Als wesentliche Ursache für die unterschiedlichen chemischen und physikalischen Eigenschaften der α - und β -Versetzungen in II-VI Verbindungshalbleitern wird eine elektrische Linienladungsdichte der polaren Versetzungstypen verantwortlich gemacht [Abr72, Pet80, Osi86]. Aufgrund des hohen Ionizitätsgrades dieser Halbleiterklasse sollten demnach deutliche Unterschiede in der plastischen Relaxation durch polare Versetzungen zu erwarten sein. Im experimentellen Teil dieser Arbeit wird auf Basis des Heteroepitaxiesystems *ZnSe/GaAs*(001) ein Strukturmodell für die plastische Relaxation von Halbleiterschichten vorgeschlagen, das möglicherweise für die Zinkblendestruktur allgemeine Bedeutung besitzt.

5 EXPERIMENTELLE METHODEN

Wie bereits geschildert wurde, sind Exzitonen gebundene Elektronen- und Lochzustände. Sie sind die niedrigsten elektronischen Elementaranregungen in Halbleitern bei tiefen Temperaturen. Typischerweise werden sie dadurch erzeugt, dass dem Kristall eine Energie gleich oder größer als die der Bandlücke zugeführt wird. Da sie neutrale Teilchenzustände sind, trägt ihre laterale Verteilung nicht zum Stromfluss bei. Jedoch sind sie wesentlich am Energietransport und der Energierelaxation der Halbleiter beteiligt. Schließlich ist es über ihre Rekombination möglich detaillierte Informationen über Defekte in Halbleitern zu gewinnen.

Dieses Kapitel gibt Aufschluss über die in dieser Arbeit verwendeten Methoden der Anregung von Elektron-Loch-Paaren. Es wird eine Kurzübersicht über elektronische Eigenschaften von Defekten gegeben. Zuletzt werden Detektionsverfahren vorgestellt, um die strahlende bzw. strahlungslose Rekombination von Elektron-Loch-Paaren mit einer Ortsauflösung in der Größenordnung von weniger als $1\mu\text{m}$ zu untersuchen.

5.1 Signalentstehung in der Kathodolumineszenzspektroskopie

5.1.1 Besonderheiten der Anregung mittels Elektronenstrahl

Die Entstehung von e/h -Paaren kann neben thermischer oder elektrischer Anregung durch Wechselwirkung der Ladungsträger mit elektromagnetischer oder Teilchenstrahlung erfolgen. In jedem Fall muss dem Kristall eine Energie ($h\nu$) größer als die der Bandlücke (E_g) zugeführt werden. Im Falle einer Anregung durch hochenergetische Elektronen in einem Rasterelektronenmikroskop (REM) besitzen die Elektronen typischerweise eine kinetische Energie zwischen 0.5keV und 50keV. Der bis auf ca. 10nm Durchmesser fokussierte Elektronenstrahl führt in der Probe zu einer „Elektronensonde“, ein örtlicher Bereich, innerhalb dessen die Primärelektronen durch inelastische Vielfachstreuung ihre kinetische Energie verlieren. Die dissipative Wechselwirkung der Elektronen mit den Atomen ist hierbei energieabhängig.

Im Bereich der Primäranregung der Elektronensonde werden hauptsächlich kernnahe Elektronen in energetisch hohe Leitungsbänder angeregt. Als Sekundäreffekt entstehen u.a. charakteristische Röntgenemissionslinien. Die heißen Exzessladungsträger relaxieren im weiteren Verlauf unter inelastischer Streuung mit anderen Quasiteilchenresonanzen, wie Plasmonen und Phononen in die Leitungs- und Valenzbandextrema. Es entstehen u.a. freie Exzitonen. Diese führen durch Lokalisierung an Defekten zu gebundenen Exzitonen. Je nach Konzentration und Art der Defekte im Halbleiter finden die in Abschnitt 5.1.1 vorgestellten Rekombinationsprozesse statt, auf sie wird jedoch nicht detaillierter eingegangen, da der Schwerpunkt in dieser Arbeit in der Untersuchung freier und versetzungsgebundener Exzitonen liegt.

Die totale Generationsrate G_0 der erzeugten Elektron-Loch-Paare ist proportional zur Energiedissipation der Primärelektronen und gegeben durch [Neu80] :

$$G_0 = \frac{U_b I_s}{E_i} (1 - k\eta) \quad (5.1)$$

Mit U_b, I_s : Beschleunigungsspannung, Strahlstrom,
 E_i : Ionisierungsenergie,
 k : Verhältnis von mittlerer Energie der zurückgestreuten zur Energie der Primärelektronen,
 $\eta(U_b)$: Rückstreuoeffizient (eine Funktion der Beschleunigungsspannung).

Die Ionisierungsenergie, die zur Generation eines Elektronen-Loch-Paares aufzubringen ist, entspricht ungefähr dem dreifachen Wert der Bandlücke [Kle68, Dru70]. Mit der Generation ist ebenfalls ein Transport von Ladungsträgern verbunden. Beim Ladungsträgertransport wird zwischen Drift- und Diffusionsphänomenen unterschieden. Driftphänomene, spielen in der folgenden Betrachtung keine Rolle. Die in der Elektronenode in hoher Konzentration erzeugten Ladungsträger diffundieren aufgrund eines Konzentrationsgradienten aus dem Generationsgebiet.

Die Diffusion beschreibende Größe ist die Diffusionskonstante der Ladungsträger D_e bzw. D_h , die mit ihrer Beweglichkeit $\mu_{e,h}$ über die Einsteinrelation zusammenhängen.

$$\frac{\mu_{e,h}}{D_{e,h}} = \frac{e}{kT} \quad (5.2)$$

Die Diffusion limitierende Prozesse sind Intradbandstreuungen durch Phononen oder Streuung an Störstellen. Bei tiefen Temperaturen dominiert die Streuung an Störstellen.

Neben der Diffusion aufgrund eines lokalen Konzentrationsgradienten kann auch Thermoeffusion auftreten, sie spielt aber für die Kathodolumineszenz nur eine untergeordnete Rolle. Die Diffusion von Ladungsträger aufgrund eines Temperaturgradienten im Bereich der Elektronenode wird im allgemeinen vernachlässigt. Diese Tatsache wurde experimentell dadurch überprüft, dass durch direkten Vergleich von Photolumineszenz- und Kathodolumineszenzspektren bei gleichen und ausreichend tiefen Temperaturen der Probe kein Unterschied hinsichtlich Heizeffekte festgestellt werden konnte.

Im stationären Fall kann der räumliche Anteil der Ladungsträgergenerationsverteilung $g(\vec{r})$ unter Berücksichtigung aller oben genannten Thermalisierungs- und Diffusionsphänomene sowie der Strahlfokussierung als Summe von drei Gaußfunktionen analytisch dargestellt werden [Hild98]. Von der Ladungsträgerverteilung lässt sich jetzt die Tiefengenerationsverteilung $g_z(z)$ separieren, welcher bei der Untersuchung von Heteroepitaxialsystemen bzw. ausgedehnten Defekten Bedeutung zukommt.

$$g(\vec{r}) = G_0 \cdot g_r(\vec{r}, z) \cdot g_z(z) \quad \text{mit} \quad g_z(z) = \int_0^{\infty} dr \cdot r g_r(\vec{r}, z) \quad (5.3)$$

Die Verteilungen sind jeweils über ihre Integrale normiert. Da die Verteilung $g_z(z)$ eine Funktion der Eindringtiefe z in die Probe ist, kann mit ihrer Hilfe zum Beispiel die Schichtdicke von Heterostrukturen abgeschätzt werden [Kat93] bzw. Aussagen zur Tiefenlage von Defekten getroffen werden. Die laterale Verteilung der Ladungsträgergeneration, die im Wesentlichen durch die Funktion $g_r(\vec{r}, z)$ beschrieben wird, kann zur analytischen Beschreibung der Halbwertsbreite von KL-Defektkontrasten herangezogen werden [Hild98, Hör01].

Zur Interpretation der in Kathodolumineszenzaufnahmen enthaltenen Informationen existiert für die numerische Lösung von $g_z(z)$ aus Gleichung 5.3 ein Computerprogramm, mit dessen Hilfe eine obere Grenze für die Tiefengeneration der Ladungsträgergenerationsverteilung bestimmt werden kann [Hild98]. Als Eingabeparameter sind hierfür die Ordnungszahl OZ der Kristallatome und die Beschleunigungsspannung U_b der Elektronen notwendig. In Abbildung 5.1 sind exemplarisch die Tiefengenerationsverteilungen über der Eindringtiefe für eine konstante Beschleunigungsspannung und für drei verschiedene Ordnungszahlen im Bereich der mittleren Ordnungszahl $OZ=32$ von Zn ($OZ=30$) und Se ($OZ=34$) dargestellt. Des Weiteren zeigt Abbildung 5.2 Simulationen für eine konstante Ordnungszahl $OZ=30$ und drei Variationen der Beschleunigungsspannung.

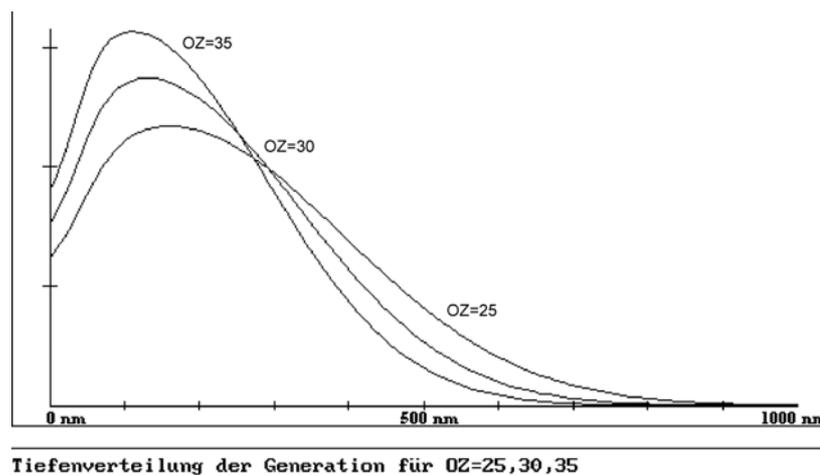


Abbildung 5.1 : Simulierte Tiefengenerationsverteilungen $g_z(z)$ der Ladungsträger über der Eindringtiefe in Nanometer. Die Abbildung zeigt drei Verteilungen für die Ordnungszahlen $OZ = 25, 30, 35$ (der exakte mittlere Wert für $ZnSe$ ist 32). Der Parameter für die Beschleunigungsspannung liegt wie unter typischen Messbedingungen bei $U_b = 10 \text{ kV}$.

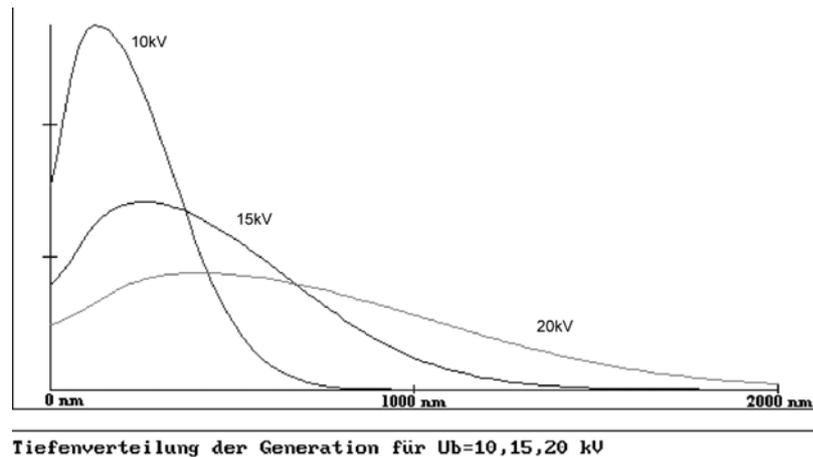


Abbildung 5.2 : Simulierte Tiefengenerationsverteilungen der Ladungsträger für eine mittlere Ordnungszahl von $OZ = 30$. In der Abbildung sind drei Verteilungen über der Eindringtiefe für die Beschleunigungsspannungen $U_b = 10\text{kV}$, 15kV und 20kV dargestellt.

Aus den in Abbildung 5.1 dargestellten Simulationen geht hervor, dass die Tiefengenerationsverteilung nur wenig mit der mittleren Ordnungszahl des Verbindungshalbleiters variiert. Offensichtlich dominiert die Abhängigkeit von der Beschleunigungsspannung U_b , wie aus Abbildung 5.2 ersichtlich ist. Deutlich ist zu erkennen, dass sich das Maximum der Verteilung mit abnehmender Beschleunigungsspannung immer mehr in Richtung $z = 0$, der Probenoberfläche, verschiebt.

Im Folgenden werden die Ergebnisse der hierzu durchgeführten Kathodolumineszenz-(KL)-Mikroskopie Experimente vorgestellt.

Die panchromatische KL-Mikroskopie ist eine Abbildungstechnik, bei der die zu untersuchende Probenoberfläche mit dem Elektronenstrahl lateral abgerastert wird. Simultan dazu wird zu jeder Position des Elektronenstrahls die von der Probe emittierte Lumineszenzintensität ohne spektrale Auflösung registriert. Hierdurch können lokal erhöhte Konzentrationen von strahlenden bzw. nichtstrahlenden Rekombinationszentren als Hell- bzw. Dunkelkontraste vor der homogenen Emission der ungestörten Kristallmatrix abgebildet werden. In Abbildung 5.3 sind drei panchromatische KL-Aufnahmen einer 165nm dicken $\text{ZnSe}/\text{GaAs}(001)$ Epitaxialschicht gezeigt. Abgebildet wurde jeweils derselbe Probenbereich auf einer Skala von ca. $200\mu\text{m}$, für die drei Beschleunigungsspannungen $U_b = 20\text{kV}$, $U_b = 10\text{kV}$ und $U_b = 5\text{kV}$. Der Strahlstrom betrug je nach Beschleunigungsspannung zwischen $I_s = 0.5\text{nA} - 2\text{nA}$, die Messtemperatur lag konstant bei $T = 72\text{K}$.

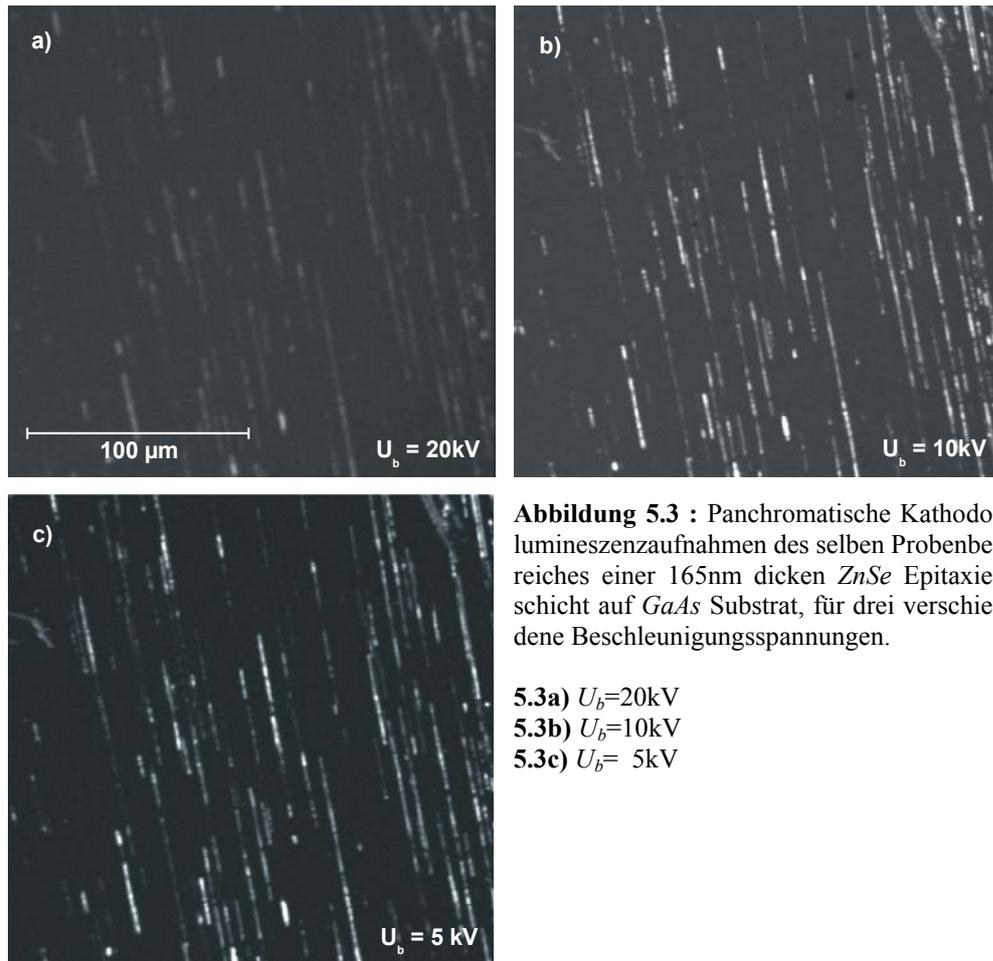


Abbildung 5.3 : Panchromatische Kathodolumineszenzaufnahmen des selben Probenbereiches einer 165nm dicken *ZnSe* Epitaxieschicht auf *GaAs* Substrat, für drei verschiedene Beschleunigungsspannungen.

- 5.3a) $U_b=20\text{kV}$
 5.3b) $U_b=10\text{kV}$
 5.3c) $U_b= 5\text{kV}$

In jeder der Abbildungen 5.3a-5.3c sind linienartige Hellkontraste zu erkennen, die durch Defekte gestörte Kristallbereiche darstellen. Mittels der dargestellten drei Aufnahmen lässt sich der Einfluss der Beschleunigungsspannung auf das Kontrastverhalten demonstrieren. Im vorgestellten Beispiel nimmt der Defektkontrast bei sinkender Beschleunigungsspannung zu. Das bedeutet, dass der Defekt nahe der Probenoberfläche liegt. Der Hellkontrast wird umso deutlicher, je näher das Maximum der Tiefengenerationsverteilungen an der Probenoberfläche liegt.

Durch den Einsatz von geeigneten optischen Kantenfiltern ist es möglich, die höher energetische Schichtemission der II-VI Halbleiter *ZnSe* und *CdTe* von der *GaAs* Substratlumineszenz getrennt abzubilden. Hierdurch lässt sich sogar zeigen, dass sich die gefundenen Defekte ausschließlich innerhalb der *ZnSe* Epitaxieschicht befinden [9].

5.1.2 Strahlende Rekombination von Ladungsträgern

Die elektronischen Eigenschaften von Defekten lassen sich grob in zwei Kategorien einteilen. Defekte deren Energieniveaus sich aus der Theorie der Effektiven-Masse ableiten lassen, sie werden flache Störstellen genannt und Defekte deren Energieniveaus sich nicht hieraus ableiten lassen, die so genannten „tiefen Zentren“. Handelt es sich um die Rekombination von freien oder an flachen Störstellen gebundenen Exzitonen, können diese als strahlende Prozesse

detektiert werden. Eine Übersicht über mögliche Prozesse W_{str} , die unter Emission von Strahlung stattfinden liefert Abbildung 5.4.

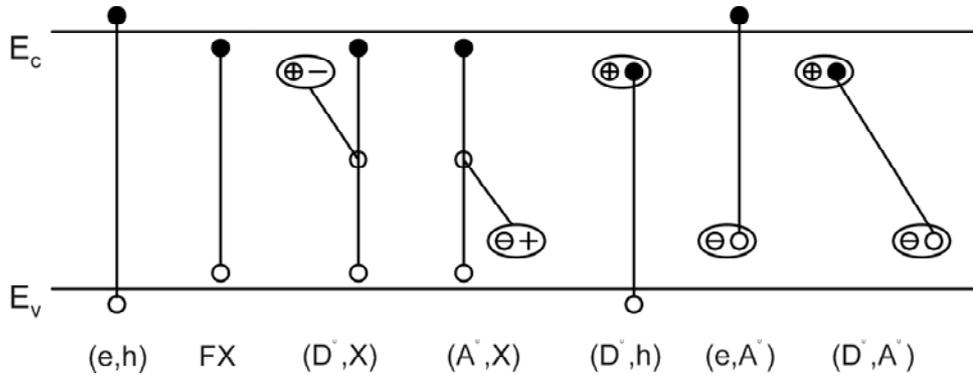


Abbildung 5.4 : Schematische Darstellung freier oder gebundener Interbandübergänge für $\vec{k}=0$.

Die Symbole haben folgende Bedeutung :

- (e,h) : Band-Band-Rekombination,
- FX : Rekombination des freien Exzitons,
- (D^0,X) : Rekombination eines donatorgebundenen Exzitons,
- (A^0,X) : Rekombination eines akzeptorgebundenen Exzitons,
- (D^0,h) : Donator-Loch Übergang,
- (e,A^0) : Elektron-Akzeptor-Übergang und
- (D^0,A^0) : Donator-Akzeptor-Übergang.

Prinzipiell können die Ladungsträger als freie oder lokalisierte Zustände rekombinieren. Je nach Stärke der Elektron-Loch-Kopplung treten exzitonische Effekte in den Vordergrund. Werden diese vernachlässigt spricht man von einem direkten Ladungsträgerübergang ohne Bildung eines Exzitonkomplexes. Zu den direkten Übergängen mit charakteristischen Übergangsenergien zählen :

$$\begin{aligned}
 E_{e-h} &= E_g \\
 E_{(D^0,h)} &= E_g - E_{D^0} \\
 E_{(e,A^0)} &= E_g - E_{A^0} \\
 E_{(D^0,A^0)} &= E_g - E_{D^0} - E_{A^0} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 R_{DA}}
 \end{aligned}$$

Wobei es sich bei den lokalisierten Übergängen um Rekombinationen aus und in den Grundzustand der beteiligten Störstellenniveaus handelt.

Im (D^0,A^0) Paarübergang (DAP) ist die Rekombinationswahrscheinlichkeit proportional zu dem näherungsweise exponentiell abfallenden Überlapp der an den Störstellen lokalisierten Wellenfunktionen der Ladungsträger. Die Rekombinationswahrscheinlichkeit ist damit eine

Funktion vom individuellen Paarabstand R_{DAP} ($\gg R_{Exz}$) und der Störstellendichte. In einem Lumineszenzspektrum ist wegen der statistischen Verteilung der Paarabstände im Halbleitervolumen eine breite Lumineszenzbande zu beobachten. Sie besitzt ein Intensitätsmaximum bei einer mittleren (D^0, A^0) Übergangsenergie, die über den Coulomb-Anteil durch einen mittleren Abstand \bar{R}_{DAP} aller Paarübergänge mitbestimmt wird. Die Position des Intensitätsmaximums auf der Energieskala ist letztendlich eine Funktion der Dotierungsdichte [Paa80].

Es wird erwartet, dass im stark inhomogenen Verzerrungsfeld von Stufenversetzungen eine räumlich inhomogene Verteilung von Punktdefekten (Vakanzen, Zwischengitteratome und substitutionelle Störstellen) vorliegt. In den II-VI Halbleitern werden substitutionelle Störstellen unter besonderen Umständen durch Vakanzen kompensiert. In einem inhomogenen Verzerrungsfeld sollte sich daher eine lokale Änderung der Kompensation einstellen. Dies wäre an der Versetzung mit einer Vorzugsrichtung des Paarübergangs in kompensierten II-VI Halbleitern verbunden und liesse sich aufgrund einer korrelierten linearen Polarisierung der DAP-Bande in sowohl lateral- wie auch polarisationsaufgelösten Lumineszenzspektren nachweisen (μ -pol-PL, \rightarrow KAPITEL 7, Abschnitt 7.1.1). Bisher konnte dieser Effekt jedoch nicht bestätigt werden. Eine Untersuchung von Versetzungen in unterschiedlich dotierten ZnSe Epitaxialschichten und eine Diskussion des Einflusses von Selbstkompensationsmechanismen auf die globale Relaxation der Schichtverspannung findet in KAPITEL 6, Abschnitt 6.1.5 statt.

5.1.3 Strahlungslose Rekombination von Ladungsträgern - das Shockley-Read-Hall-Modell

Bei höheren Temperaturen bestimmen insbesondere strahlungslose Übergänge die Lebensdauer von angeregten Zuständen. Nichtstrahlende Übergänge finden bevorzugt an tiefen Zentren statt, falls diese ein Energieniveau nahe der Mitte der Bandlücke besitzen. Zustände nahe der Bandmitte sind aufgrund der Nähe zum Fermi-niveau und der Temperaturabhängigkeit der Fermi-Verteilung stets stärker besetzt als die energetisch weit höher gelegenen flachen Störstellen und Bänder. Das SHOCKLEY-READ-HALL-Modell (SRH) [Sho52, Hal52] liefert eine Beschreibung für tiefe Rekombinationszentren als Ursache nichtstrahlender Übergänge.

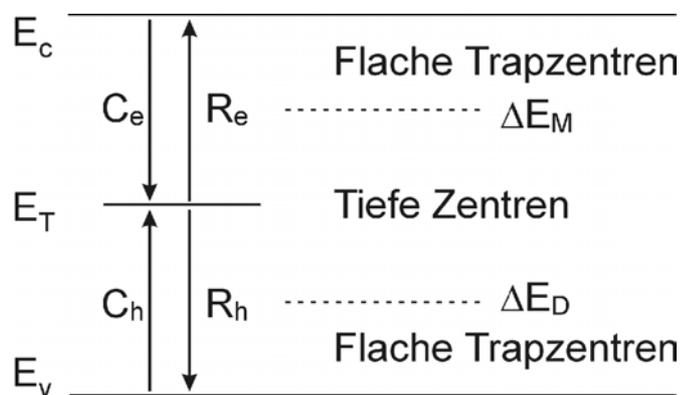


Abbildung 5.4 : Schematische Darstellung der SRH-Rekombination. Es finden strahlungslose Übergänge unter Phononenbeteiligung statt.

Die energetischen Lage und relevante Einfangs- (C_e, C_h) bzw. Reemissionsraten (R_e, R_h) des SRH-Modells sind schematisch in der Abbildung 5.4 dargestellt. E_T ist ein Energieniveau nahe der Bandmitte, das einer tiefen Störstelle zugeordnet wird. Es liegt in der Energielücke zwischen dem Fermi-niveau der Majoritätsladungsträger ΔE_M und dem an der Mitte der Bandlücke gespiegelten Quasi-Fermi-niveau, der so genannten Demarkationsenergie ΔE_D . Zustände außerhalb dieses Bereichs werden als flache Störstellen betrachtet. Die Einfangs- und Reemissionsraten $C_{e,h}$ und $R_{e,h}$ für die Ladungsträger sind proportional zu der Konzentration der vorhandenen Störzentren, zum Einfangsquerschnitt des Defekts für die entsprechenden Ladungsträgerarten e, h und zur Temperatur. Die Nettorekombinationsrate W_{nstr} der strahlungslosen Übergänge ist die Differenz der Einfangs- und Reemissionsraten der Ladungsträger unter der Bedingung der Ladungsneutralität :

$$W_{nstr} = C_e - R_e = C_h - R_h \quad (5.4)$$

Ein Prozess der zu einer Nettorekombinationsrate $W_{nstr} > 0$ führen kann, findet zum Beispiel bei der Emission (Einfang des Ladungsträgers) und Absorption (Reemission des Ladungsträgers) von multiplen Phononen statt.

Dieses Modell dient dazu, den Einfluss von Punktdefekten als tiefen Störzentren und als nicht-strahlende Rekombinationszentren analytisch zu beschreiben. Ebenso wird es zur Beschreibung der nichtstrahlenden Rekombination von Ladungsträgern an Versetzungen sowie Ober- und Grenzflächen herangezogen [Kit93, Asp83]. Da Versetzungen in Verbindungshalbleitern in vielen Fällen nichtstrahlende Rekombinationszentren darstellen, wird die Energie der Ladungsträgerrekombination bevorzugt an derartigen Zentren durch Phononen in das Kristallgitter überführt. Durch die Phononen erfolgt in einem externen Spannungsfeld eine Aktivierung der Versetzungsbewegung. Rekombinationsinduziertes Gleiten von Versetzungen tritt typischerweise bei Temperaturen auf, bei denen eine thermische Aktivierung der Versetzungsbewegung nicht festzustellen ist. Dies wird in der Literatur als REDG-Effekt⁶ bezeichnet. Eigene Beiträge zu dieser Thematik sind bereits publiziert [2,3,10].

5.2 Angewandte Messtechniken

5.2.1 Der REM-KL Messplatz

Die in dieser Arbeit vorgestellten Untersuchungen zu defektinduzierten optischen und elektronischen Eigenschaften von II-VI Halbleiterheterostrukturen wurden mit verschiedenen jedoch sich ergänzenden Messtechniken durchgeführt. Als aufschlussreiche spektroskopische und zerstörungsfreie Methode zur Untersuchung von ausgedehnten Kristalldefekten und niederdimensionalen Strukturen hat sich die Rasterelektronenmikroskopie mit Kathodolumineszenz-

⁶ Radiation-Enhanced-Dislocation-Glide [Mae83, Lev94]

Mode (REM-KL) entwickelt. Der Hauptvorteil bei der in dieser Arbeit durchgeführten Charakterisierung von Defekten liegt darin, dass die REM-KL simultan Informationen über die Defektdichte, die kristallographische Konfiguration und die elektronische Wirksamkeit liefert.

Die für die Anfertigung der vorliegenden Arbeit zur Verfügung stehende REM-KL-Technik wurde in Abstimmung mit anderen parallel laufenden Projekten zu einem leistungsfähigen KL-Mikroskopie- und KL-Mikrospektroskopiesystem ausgebaut. Die gegenwärtige Ausstattung, mit der die in den folgenden Kapiteln dargestellten Ergebnisse erzielt worden sind, zeigt schematisch Abbildung 5.5.

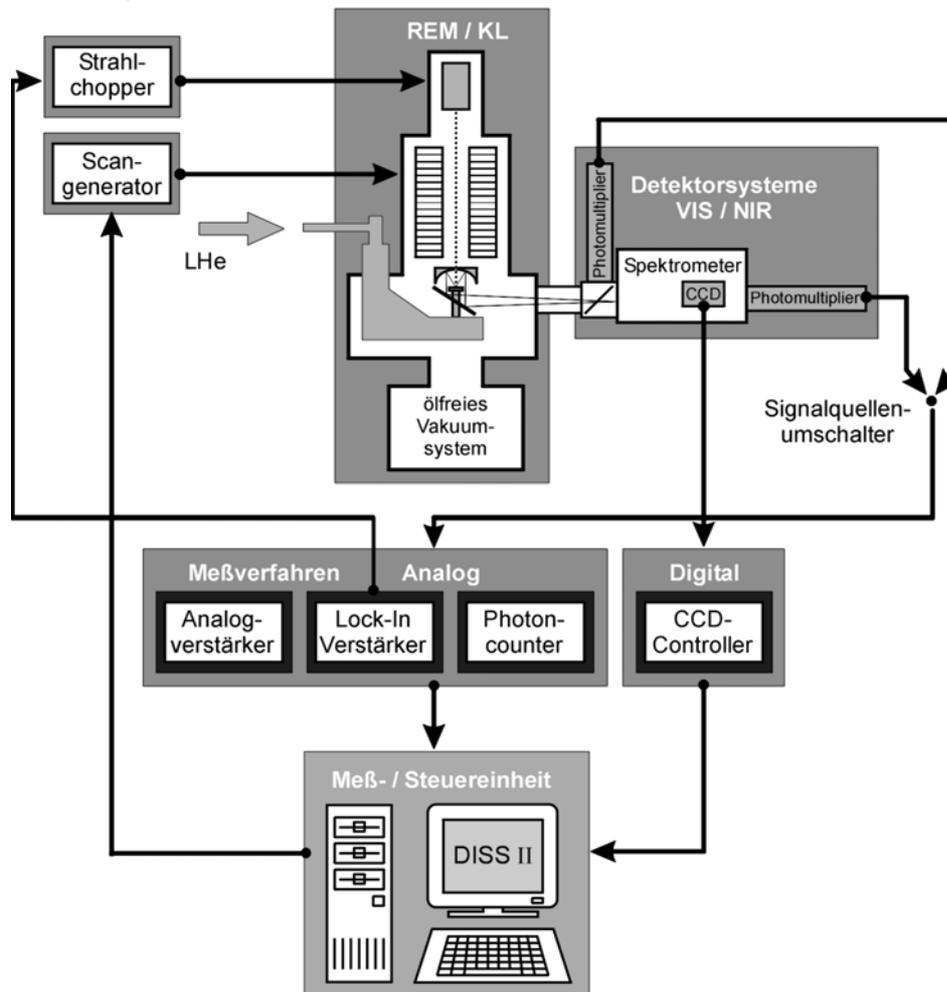


Abbildung 5.5 : Schematische Darstellung des Aufbaus des REM-KL-Systems BS300/JSM64000 mit dem Oxford-MonoCL Zusatz und der Messsoftware/hardware DISS II (Digital Imaging Scanning System)

Insgesamt stehen zwei speziell für KL ausgelegte REM-Messapparaturen zur Verfügung, das Rasterelektronenmikroskop System BS300 der Firma TESLA und das Rasterelektronenmikroskop JSM6400 der Firma JEOL. Beide Systeme sind für temperaturabhängige Lumineszenzuntersuchungen mit einem Tieftemperaturzusatz der Firma Oxford Instruments bestückt. Sie besitzen einen für die Kühlung mit LHe oder wahlweise LN₂ konstruierten Probenstisch. Der in der Mikroskopsäule erzeugte Elektronenstrahl erreicht die Probenoberfläche durch die Bohrung in sphärischen Hohlspiegel. Dieser ist für die Sammlung und Fokussierung der von der Probe

austretenden Lumineszenz verantwortlich. Die Lumineszenzstrahlung wird anschließend mit Hilfe eines planen Umlenkspiegels auf den Eingangsspalt eines Spektrometers fokussiert. Für spektral aufgelöste Untersuchungen kann an beide Systeme das KL-Spektrometer MONO-CL installiert werden. Die Signalregistrierung geschieht wahlweise mit Photomultipliern für die verschiedenen VIS oder IR Spektralbereiche oder digital mit dem VIS-CCD Detektor (Typ: ISA MTECCD1024x128-5). Zusätzlich ist der Dreifach-Gitterspektrograph ISA Triax 190 verfügbar.

Die Defektrekombinationswirksamkeit kann je nach Dynamikbereich des Messsignals quantitativ analysiert werden. Zum Einen unter Nutzung der Lock-In-Technik, welche gegenüber herkömmlicher Analogtechnik eine um zwei Größenordnungen höhere Detektionsempfindlichkeit besitzt, oder mittels Photon-Counting-Technik als Messverfahren mit maximaler Nachweisempfindlichkeit.

Aus der Paralleldetektion der Spektren mittels CCD resultiert eine wesentlich schnellere KL-Mikrospektroskopie. Ein essentieller Bestandteil der Geräteweiterentwicklung ist der Einsatz des dynamischen Mess- und Bildverarbeitungssystems DISS II der Firma Point Electronic. Die Messwerterfassung durch die Messsoft/hardware erlaubt eine maximale Scangeschwindigkeit von $1.6\mu\text{s}/\text{Pixel}$. Damit kann ein Rasterbild von 512×512 Pixel in weniger als einer halben Sekunde mit 12Bit Datentiefe eingelesen werden. Außerdem ist eine quasi TV Darstellung und Aufzeichnung der Bildsignale möglich, so dass eine dynamische Bilderfassung zur kinematischen Untersuchung der Defektmigration zur Verfügung steht.

5.2.2 Der Photolumineszenzmessplatz

Im Rahmen dieser Arbeit wurden zudem Photolumineszenzuntersuchungen durchgeführt, um den gerichteten Einbau von Defekten anhand von Polarisationsseigenschaften der Lumineszenz zu studieren. Hochaufgelöste Photolumineszenzspektren wurden in der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Ossau in Würzburg aufgenommen. Die Darstellung 5.6 zeigt den schematisierten Aufbau der Messapparatur zur Photolumineszenz.

Als Anregungsquelle dient ein Argon-Ionen-Laser (INNOVA 115) mit einer maximalen Ausgangsleistung von 20W im optischen Bereich bei einer Wellenlänge von 514.5nm. Durch austauschbare Laserresonatorspiegel kann der Laser auf UV Betrieb umgestellt werden, so dass er Licht der Wellenlänge 363.8nm emittiert. Der Laserstrahl wird über einige Umlenkspiegel (*U1-U3*) und ein Prisma *P* auf die Probe gelenkt, die sich auf einer Halterung in einem Helium-Bad-Kryostaten befindet.

Der Probenraum im Kryostaten kann durch Absenken des Druckes über dem Heliumbad auf eine Temperatur von 1.6 Kelvin abgekühlt werden. Im Probenhalter befindet sich eine elektrische Heizwendel, wodurch die Probe bei Bedarf bis zur Raumtemperatur definiert aufgeheizt werden kann.

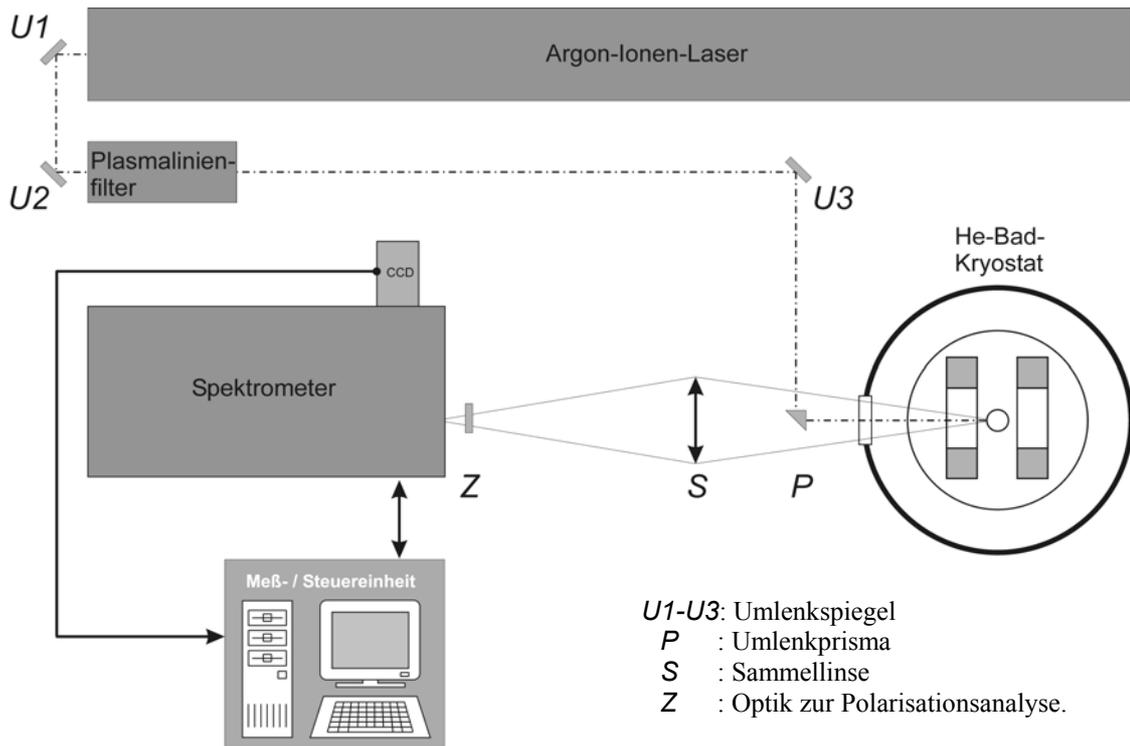


Abbildung 5.6 : Schematische Darstellung des Messplatzes für Photolumineszenz.

Das von der Probe emittierte Lumineszenzlicht wird durch eine Sammellinse S auf den Eingangsspalt des Spektrometers (JOBIN-YVON HR 1000, 1m Doppelmonochromator) fokussiert. Besonderer Aufmerksamkeit bedarf die Polarisationsanalyse der Lumineszenz. Konventionelle Gitterspektrometer besitzen eine wellenlängenabhängige Vorzugsrichtung in der Empfindlichkeit für polarisiertes Licht. Zur Vermeidung von apparaturbedingten Einflüssen ist es daher notwendig, eine lineare Polarisation des Lumineszenzlichts vor dem Eintritt ins Spektrometer auszulöschen.

In Abbildung 5.6 stellt Z den Teil der Optik dar, der zur Polarisationsanalyse dient. Dieser besteht am effektivsten aus einem Linearpolarisator, welcher vor einem rotierbaren Lamdaviertel-Plättchen montiert ist. Die Vorzugsachse des Linearpolarisators ist zur Vorzugsachse des Lamdaviertel-Plättchens um 45° gedreht. Damit wirkt das Lamdaviertel-Plättchen wie ein Zirkularpolarisator und das austretende Licht ist in jedem Fall nicht linear polarisiert. Für verschiedene Wellenlängenbereiche kamen speziell ausgelegte optische Komponenten zum Einsatz.

6 ANALYSE DER PLASTISCHEN RELAXATION VON II-VI EPITAXIESCHICHTEN

Zu Anfang dieses Kapitels werden die Ergebnisse von Untersuchungen zur Rekombinationswirksamkeit von Gleitversetzungen in II-VI Halbleitern mit Hilfe der REM-KL Technik vorgestellt. Darauf aufbauend wird im Abschnitt 6.1 mittels Photolumineszenzuntersuchungen die Auswirkung des Versetzungseinbaus in ZnSe(001) und CdTe(001) Epitaxieschichten analysiert. Dadurch ist es möglich, die Dynamik der plastischen Relaxation zerstörungsfrei in Abhängigkeit von der Schichtdicke quantitativ zu charakterisieren. Schließlich wird ein allgemeines Strukturmodell für die plastische Relaxation für die (001) Wachstumsoberfläche von kompressiv verspannten Epitaxieschichten mit Zinkblendestruktur durch polare Gleitversetzungen vorgestellt [9,11].

Im zweiten Abschnitt wird ein Beispiel für eine plastische Relaxation der Gitterfehl-anpassung von II-VI Epitaxieschichten präsentiert, das nicht zwangsläufig über die Bildung von Anpassungsversetzungen geht. CdTe(111) Epitaxieschichten auf mit Arsen passiviertem Si(111) Substrat relaxieren über die Bildung von ausgedehnten Zwillingsdomänen. Diese können durch eine Verkippung des Si-Substrates wirksam unterdrückt werden [8]. Es wird eine plausible Erklärung für die Wirkungsweise der Substratverkippung geliefert.

6.1 ZnSe(001) und CdTe(001) Schichten auf GaAs(001) Substrat

6.1.1 Rekombinationswirksamkeit von Gleitversetzungen in CdTe und ZnSe

In der Literatur existieren nur eine vergleichsweise geringe Anzahl von experimentellen Studien zur strahlenden Rekombinationen von Ladungsträgern, die direkt mit Versetzungen korreliert werden. So dominiert in Photolumineszenzspektren von ZnSe und weiteren kubischen II-VI Halbleitern, wie CdTe und ZnTe, die so genannte „Y-Lumineszenz“ [Dea84] häufig 100-250meV unterhalb der Bandkantenlumineszenz, wenn eine hohe Anzahl von strukturellen Defekten vorhanden ist [Shr96, Dea84, Wol94, Wol95]. Auch in den Elementhalbleitern Silizium bzw. Germanium existieren eine Reihe von Lumineszenzlinien, die so genannten D-Lumineszenzlinien, für deren Ursprung ebenfalls Versetzungen verantwortlich gemacht werden [Dro77, Lei89]. Jedoch ist die genaue Zuordnung der Lumineszenz zu einem Versetzungstyp seit über 20 Jahren ein Anlass zur Diskussion [Web94, Far99].

Die Zuordnung der Y-Lumineszenzbande bei 1.476eV in CdTe zu 60°-Te(g)-Gleitversetzungen konnte erstmals durch REM-KL-Mikroskopie- und Mikrospektroskopie-Untersuchungen an Defektkonfigurationen nach lokaler plastischer Deformation niedrigindizierter Kristalloberflächen vorgenommen werden [Uni96]. Aus der Anordnung von parallel zur Oberfläche gleitenden Versetzungen wurde nachgewiesen, dass ausschließlich die polaren 60°-Te(g)-Versetzungs-segmente als Zentren strahlender Rekombination für die Y-Lumineszenz verantwortlich sind (vgl. Abb. 6.1.1) Es ist ebenso erstmals ein differenziertes elektronisches Verhalten von polaren

α - und β -Versetzungen in der Zinkblendestruktur aufgezeigt worden, da die 60° - $Cd(g)$ Versetzungen als Zentren nichtstrahlender Rekombination identifiziert worden sind.

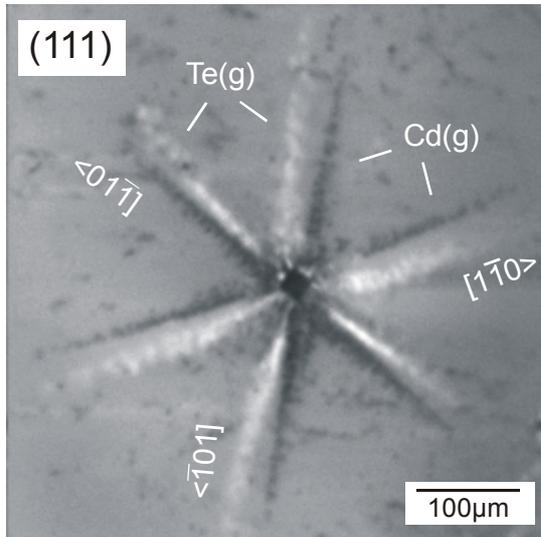


Abbildung 6.1.1 : Panchromatische KL-Abbildung polarer Gleitversetzungen nach einer plastischen Mikrodeformation auf einem $(111)\bar{B}$ orientierten $CdTe$ Volumenkristall.

KL-Untersuchung der Defektkonfiguration nach Mikrodeformation niedrigindizierter Oberflächen von $CdTe$, zur Darstellung der polaren 60° - $Se(g)$ - und 60° - $Te(g)$ -Versetzungssysteme durch ihre unterschiedliche Rekombinationswirksamkeit für die $(111)\bar{B}$ Wachstumsoberfläche.

Die polaren Versetzungen werden aufgrund ihrer unterschiedlichen strahlenden bzw. nichtstrahlenden Rekombinationswirksamkeit als helle bzw. dunkle Punktkontraste vor dem Hintergrund der homogenen Rekombination in der Kristallmatrix abgebildet. α -Versetzungen besitzen in $CdTe$ eine wesentlich höhere Quanteneffizienz als die umgebende Kristallmatrix und können deshalb in einer panchromatischen Abbildung als Hellkontraste aufgezeichnet werden. Die sechs geneigt zur (111) Oberfläche liegenden Gleitebenen werden durch die Gleitung von α - und β -Durchstoßsegmenten parallel zur Oberfläche angezeigt.

Für $ZnSe$ wurde die Y-Lumineszenz einerseits durch konventionelle PL-Untersuchungen nach makroskopischer plastischer Deformation von $ZnSe$ Volumeneinkristallen [Shr96] und andererseits in Epitaxieschichten, hier auch durch KL-Untersuchungen, gefunden [Lin94]. Eine Zuordnung zum Versetzungstyp konnte bisher jedoch nicht vorgenommen werden.

Hochreine $ZnSe$ Schichten zeigen in Photolumineszenzspektren nur wenige Rekombinationslinien im Energiebereich knapp unterhalb des freien Exzitons bei ungefähr 2.8eV. Diese mit der ungestörten oder nur durch substitutionelle Störstellen verunreinigten Kristallmatrix assoziierten Linien werden im folgenden als „Matrixlumineszenz“ bezeichnet. Die mit Versetzungen verbundene Y-Linie liegt in $ZnSe$ bei etwa 2.61eV. Monochromatische KL-Aufnahmen sind im Gegensatz zu panchromatischen KL-Aufnahmen Abbildungen der lateralen Verteilung der Rekombination von Ladungsträgern bei einer spezifischen Emissionswellenlänge. Durch separates Aufzeichnen von KL-Rasterbildern bei der Emissionswellenlänge der Matrix- und der Defektlumineszenz können die Defekte durch Hell- bzw. Dunkelkontraste abgebildet werden. Die strahlende Rekombination am Defekt, wie im Falle der Y-Lumineszenz, ergibt einen Hellkontrast, eine verminderte Rekombination einen Dunkelkontrast im Abbild der Matrixlumineszenz. Der große spektrale Unterschied der Linien von ca. 200meV erlaubt eine saubere Trennung der Rekombination der an den Defekten gebundenen Ladungsträger von der homogenen Rekombination in der Kristallmatrix.

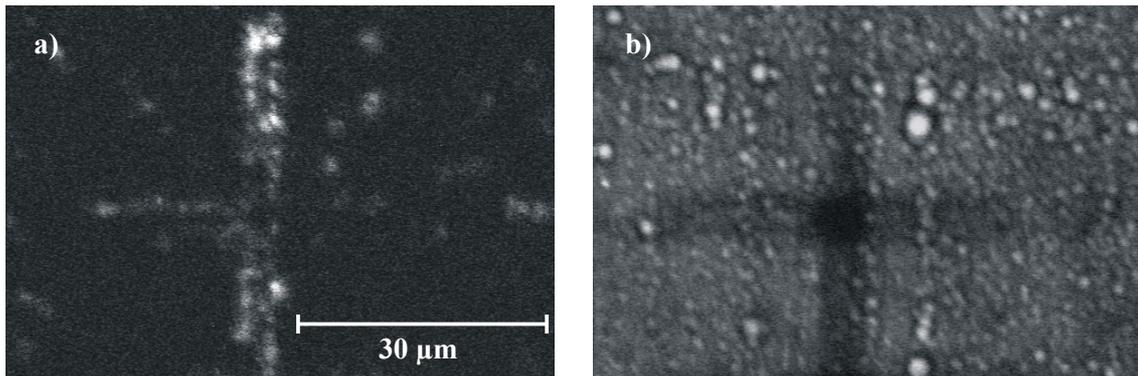


Abbildung 6.1.2a: Monochromatische KL-Aufnahme bei $\lambda=475\text{nm}$ eines Nano-Eindrucks auf einer $\text{ZnSe}(001)$ Epitaxieschicht mit $4.2\mu\text{m}$ Lagendicke. Anregungsbedingungen: $U_b=8\text{kV}$, $T=72\text{K}$ und Strahlstrom $I_s=300\text{pA}$, Integrationszeit $\Delta T=10\text{ms}$.

Abbildung 6.1.2b: Monochromatische KL-Aufnahme bei $\lambda=440\text{nm}$ desselben Nano-Eindrucks, identische Anregungsbedingungen.

Die Abbildungen 6.1.2a und 6.1.2b stellen monochromatische KL-Aufnahmen im Spektralbereich der Y- bzw. der Matrixlumineszenz im Gebiet der lokalen plastischen Deformation um einen Nanoindenter-Eindruck dar. Der Eindruck erfolgte mit einer maximalen Last von 10mN bei Raumtemperatur.

Während einer tiefensensitiven Nanoindentierung wird ein pyramidaler Diamantindenter unter kontinuierlicher Erhöhung der Kraft und Registrierung der Eindringtiefe in das Probenmaterial gefahren. Diese Messmethode ermöglicht es, die mechanischen Eigenschaften von Festkörpern unter hohem lokalem Druck auf Nanometerskala zu charakterisieren. Der in der KL-Abbildung dargestellte Eindruck wurde im möglichen Lastbereich des zur Indentierung verwendeten NanoindentersTMII mit einer schon relativ hohen maximalen Last durchgeführt. Zu Beginn der Indentierung, d.h. bei Kräften von wenigen Milli-Newton (mN) bzw. Eindringtiefen im Nanometerbereich, wird in lokal versetzungsfreien ZnSe Halbleitereinkristallen eine Diskontinuität in der Kraft-Eindringtiefe-Messkurve festgestellt [Lor99]⁷. Dieser als „Pop-In“ bekannte Effekt wird durch eine durch die Indentierung induzierte erste homogene Versetzungsloopnukleation [Lor99, Mic98] hervorgerufen. Die Bildung von Mikrorissen [Fel92] kann bei der großen Duktilität des hier benutzten Probenmaterials ausgeschlossen werden. Im gewählten Lastbereich weit jenseits des elasto-plastischen Übergangs sollte eine Aktivierung der Versetzungsgleitsysteme zu erwarten sein.

Tatsächlich ist in den Abbildungen 6.1.2a und 6.1.2b eine deutlich ausgeprägte Defektanordnung mit zweizähliger Symmetrie um das Indentationszentrum herum zu beobachten. Der Zinkblendekristall reagiert auf den Eindruck erwartungsgemäß durch plastisches Abgleiten in $\{111\}\langle 111\rangle$ Gleitsystemen.

Das Schema in Abbildung 6.1.3 veranschaulicht die Anordnung der $\{111\}$ Gleitebenen um das Zentrum der Indentation. In Bezug auf eine (001) orientierte Oberfläche sind die $\{111\}$ Ebenenvektoren der aktivierten Gleitsysteme um den Winkel $\gamma = 54.7^\circ$ geneigt. Die bezüglich der

⁷ Es handelt sich dabei um die hier untersuchte Epitaxieschicht.

Bereich der Y-Lumineszenz, dagegen hauptsächlich Defektdunkelkontraste in der Matrixlumineszenz auftreten, weist die 60° -Zn(g)-Versetzungen als Zentren nichtstrahlender Rekombination aus. (Präparationsbedingt sind in der Abbildung der Matrixlumineszenz aufgrund von Tröpfchenbildung an der Oberfläche nach Behandlung im Ultraschallbad Inhomogenitäten zu beobachten.)

- Aus den durchgeführten KL-Untersuchungen geht hervor, dass aufgrund des polaren Charakters der erzeugten Versetzungskonfigurationen um lokale plastische Deformationen, nur ein polarer Versetzungstyp als Zentrum der strahlenden Rekombination von Ladungsträgern und damit als Quelle der Y-Lumineszenz in den II-VI Halbleitern in Frage kommt.

Dieses Ergebnis hat eine wichtige Konsequenz: Somit kann der Stapelfehler zwischen zwei Shockley-Partialversetzungen als Ursache für die ausschließlich an α -Versetzungen beobachtete Lumineszenzerscheinung ausgeschlossen werden. Der elektrisch neutrale Stapelfehler besitzt in allen dissoziierten Gleitversetzungssegmenten die selbe atomare Struktur. Daher sollte jedes dissoziierte Segment einer hexagonalen Versetzungsschleife in einer monochromatischen KL-Aufnahme mehr oder minder als Hellkontrast abgebildet werden. Im Gegensatz hierzu wird eine deutlich ausgeprägte unterschiedliche Rekombinationswirksamkeit von α - und β -Versetzungen nachgewiesen.

6.1.2 Kathodolumineszenzuntersuchung der plastischen Relaxation von ZnSe Epitaxieschichten

In einer panchromatischen KL-Aufnahme, einer Abbildung ohne spektrale Auflösung, besteht aufgrund der unterschiedlichen Art der Ladungsträgerrekombination an 60° -Se(g)- und 60° -Zn(g)-Versetzungen die Möglichkeit der simultanen Identifikation beider Gleitversetzungstypen über ihre strahlende bzw. nichtstrahlende Rekombinationswirksamkeit. Bedingung hierfür ist, dass die lokale Quanteneffizienz der strahlenden Rekombination von Ladungsträgern an den 60° -Se(g)-Versetzungen die der panchromatischen Matrixlumineszenz übersteigt. Im Hinblick auf die Beteiligung der polaren Gleitsysteme erlaubt die panchromatische KL-Mikroskopie eine detaillierte Charakterisierung des Verlaufs der plastischen Relaxation von II-VI Epitaxieschichten, wie im Folgenden gezeigt wird.

In Abbildung 6.1.4 sind die Ergebnisse der KL-Untersuchung einer Serie von ZnSe Epitaxieschichten unterschiedlicher Schichtdicke zusammengestellt. Alle Schichten sind auf (001)GaAs Substrat aufgewachsen. Die natürliche Gitterfehlpassung beträgt $f_0 = 2.65 \cdot 10^{-3}$ bei Raumtemperatur. Die Linienrichtungen der 60° -Se(g)- und 60° -Zn(g)-Versetzungsanordnungen in (001) Epitaxieschichten kann wiederum mit Hilfe des Konzeptes der Thompsontetraeder festgestellt werden.

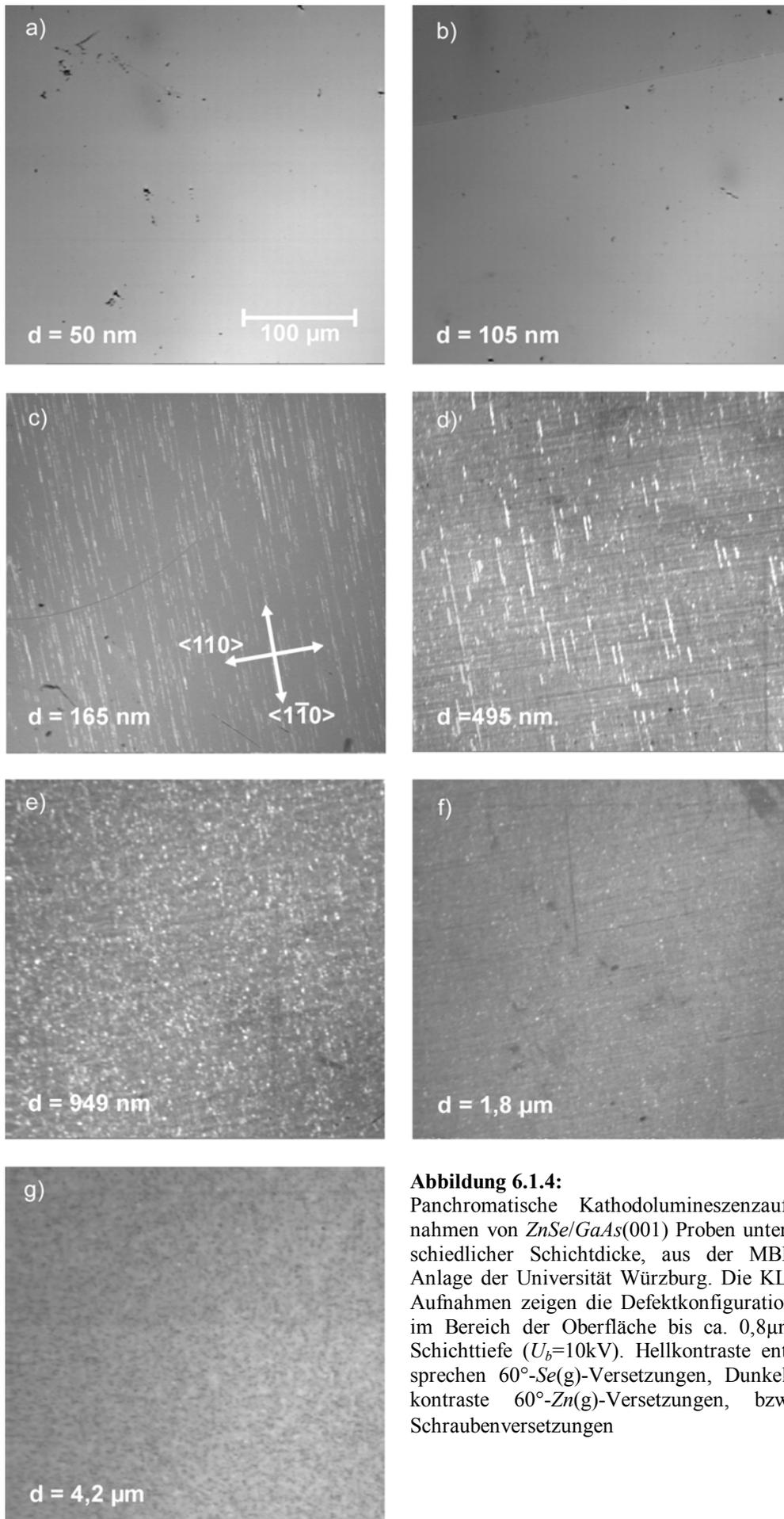


Abbildung 6.1.4:

Panchromatische Kathodolumineszenzaufnahmen von $ZnSe/GaAs(001)$ Proben unterschiedlicher Schichtdicke, aus der MBE Anlage der Universität Würzburg. Die KL-Aufnahmen zeigen die Defektkonfiguration im Bereich der Oberfläche bis ca. $0,8\mu m$ Schichttiefe ($U_b=10kV$). Hellkontraste entsprechen 60° - $Se(g)$ -Versetzungen, Dunkelkontraste 60° - $Zn(g)$ -Versetzungen, bzw. Schraubenversetzungen

Da die kompressiv verspannten Schichten mit zunehmender Schichtdicke während des Relaxationsprozesses ihre Gitterkonstante bis zur Volumengitterkonstante von *ZnSe* vergrößern, ist davon auszugehen, dass die {111} Netzebenen in Wachstumsrichtung nicht fortgesetzt werden. Damit liegen die Linienrichtungen aller 60°-*Se(g)*-Versetzungen falls diese parallel zur Grenzfläche liegen parallel zur $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ Achse, entsprechend liegen die Linienrichtungen der 60°-*Zn(g)*-Versetzungen orthogonal dazu parallel $\langle 110 \rangle$ ⁸.

Aus den KL-Aufnahmen kann die Entwicklung des polaren Misfit-Versetzungsnetzwerkes im Verlauf des Schichtwachstums deutlich verfolgt werden. Die Schichten bis 105nm Dicke ($h_c=150\text{nm}$ [Pin98]) besitzen eine hohe kristalline Qualität. Besonders bei der geringen Schichtdicke von 50nm sollten, wenn vorhanden, die vom *GaAs* in die *ZnSe* Schicht aufsteigenden Durchstoßversetzungen als Dunkelkontraste zu erkennen sein, unabhängig vom Versetzungstyp besitzen Versetzungen im *GaAs* ausschließlich nichtstrahlende Rekombinationswirksamkeit. Die aus den Aufnahmen Abbildung 6.1.4a und 6.1.4b ermittelten Punktkontrastdichten für Durchstoßversetzungen für die unterschiedlichen Versetzungssysteme liegen bei ungefähr $<10^4\text{cm}^{-2}$. Ab 165nm 6.1.4c tritt ein außergewöhnlich hoher richtungsabhängiger Sprung in der Versetzungsdichte auf. Die Hellkontraste können als 60°-*Se(g)*-Misfit-Versetzungen mit Linienrichtung parallel $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ und mit einer Kontrastdichte $D_\alpha = 2.4 \cdot 10^3\text{cm}^{-1}$ identifiziert werden. Bei ca. 500nm ändern sich die Verhältnisse wiederum. Zusätzlich zu den Versetzungen im *Se(g)*-Versetzungsgleitsystem mit der Kontrastdichte $D_\alpha = 1.5 \cdot 10^3\text{cm}^{-1}$ wird jetzt auch das *Zn(g)*-Versetzungsgleitsystem aktiviert. Es treten vermehrt dunkle Liniendefekte parallel $\langle 110 \rangle$ mit einer Dichte $D_\beta = 1.9 \cdot 10^3\text{cm}^{-1}$ auf 6.1.4d. Jenseits 1µm sind kaum noch 60°-*Se(g)*-Linien-, sondern nur noch punktförmige Hellkontraste zu beobachten 6.1.4e. Dies lässt entweder auf kurze Versetzungssegmente schließen oder auf einen Wechsel der Linienrichtung. Das bedeutet im zweiten Fall, dass die Versetzungen bei geringen Schichtdicken parallel zur Heterogrenzfläche (Misfit-Versetzungen) liegen und bei größeren Schichtdicken in die Schicht aufsteigen (Durchstoßversetzungen). Der Nachweis hierfür wird jedoch erst durch die polarisationsaufgelösten PL-Untersuchungen der Y-Lumineszenz in Abhängigkeit von der Schichtdicke erbracht (\rightarrow KAPITEL 7, Abschnitt 7.2.1). Nach wie vor ist die *Zn(g)*-Versetzungskontrastdichte mit $D_\beta = 2.3 \cdot 10^3\text{cm}^{-1}$ relativ hoch. Wie aus Abbildung 6.1.4f und 6.1.4g ersehen werden kann, kennzeichnen dunkle Punktkontraste die Schichten mit großer Schichtdicke oberhalb 1.8µm. Dabei handelt es sich höchstwahrscheinlich um eine Vielzahl von die Oberfläche durchstoßenden Versetzungen.

Die bisher für die Untersuchungen zur Verfügung stehenden Proben wurden bereits 1995 am Lehrstuhl EPIII der Universität Würzburg mit Hilfe der Molekularstrahlepitaxie gewachsen. Es stellt sich nun die Frage, ob es sich bei den erzielten Untersuchungsergebnissen um einen einmaligen oder um einen generellen Effekt des MBE Wachstums handelt. Zu Klärung dieser

⁸ Im Gegensatz dazu drehen sich bei einem tensil verspannten (001) Kristallwachstum die Linienrichtungen der α - und β -Versetzungssysteme um 90°. In diesem Fall können die polaren Versetzungsgleitsysteme direkt aus lokalen plastischen Deformationen ermittelt werden. In dieser Arbeit werden jedoch ausschließlich kompressiv verspannte Schichten betrachtet.

Problematik werden hier die Untersuchungsergebnisse von Proben aus einer anderen MBE Anlage herangezogen. In der folgenden Abbildung 6.1.5 sind die Ergebnisse der Kathodolumineszenzuntersuchung von Proben aus der MBE Anlage der Universität Regensburg gezeigt.

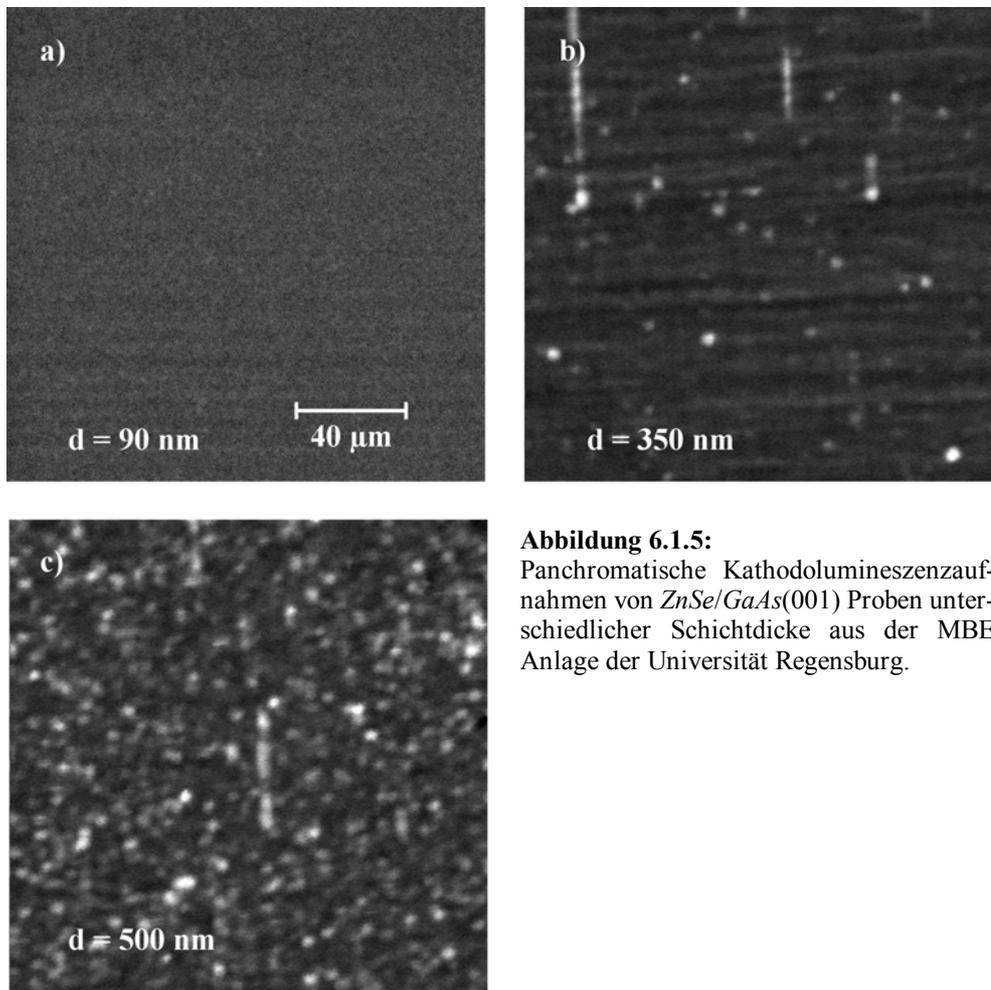


Abbildung 6.1.5: Panchromatische Kathodolumineszenzaufnahmen von $ZnSe/GaAs(001)$ Proben unterschiedlicher Schichtdicke aus der MBE Anlage der Universität Regensburg.

Die Proben zeigen in Abhängigkeit von der Schichtdicke qualitativ das gleiche Verhalten wie die Würzburger Proben. Allerdings wird schon bei geringeren Schichtdicken eine wesentlich höhere Dichte sowohl von hellen als auch von dunklen Punktkontrasten festgestellt. Da schon bei der Probe mit 350nm Schichtdicke im $Zn(g)$ -Versetzungsgleitsystem dunkle Kontraste zu beobachten sind, lässt sich hier eine kritische Schichtdicke für diesen Versetzungstyp zu $\leq 350\text{nm}$ abschätzen.

Die bei diesen Proben festzustellende höhere Versetzungsdichte bei geringen Schichtdicken kann auf die unterschiedliche Historie der Schichten zurückgeführt werden. Entscheidend für die kristalline Qualität von $ZnSe$ Schichten unterhalb der kritischen Dicke ist weniger die Wachstumstemperatur (250°C - 310°C) als die Vorbehandlung der Substratoberfläche [Pre95]. Während des Anwachsens von $ZnSe$ auf $GaAs$ entstehen unterhalb 1 ML Schichtbedeckung Inseln, die beim Zusammenwachsen häufig Defekte vom Typ der Frank'schen Partialversetzungen mit eingeschlossenen dreieckigen Stapelfehlern bilden [Kuo93, Kuo94]. Dabei spielen die chemische Zusammensetzung der II-VI/III-V Grenzfläche und der Wachstumsmodus der Epitaxieschicht (2D Lagen- oder 3D Inselwachstum) eine entscheidende Rolle. Ein Zusam-

menhang mit Oberflächendefekten der *GaAs* Substrate konnte durch systematische TEM-Untersuchungen der gewachsenen Grenzfläche gezeigt werden [Pre95]. Die minimale durch Variation der Substratvorbehandlung (Ätzbedingungen, H_2 -Plasma Vorbehandlungszeit und *Zn* Exposition vor Wachstumsstart) erzielte Dichte von Frank'schen Partialversetzungen liegt bei $6.0 \cdot 10^6 \text{cm}^{-2}$ in den Proben der Univ. Regensburg. Da sich diese Defekte in die aufwachsende Schicht fortpflanzen, kommt es mit den während des Relaxationsprozesses einwachsenden Misfit-Versetzungen zu Versetzungsreaktionen. TEM-Untersuchungen an Proben von Wafern der hier untersuchten Schichten [Ros96] belegen, dass eine Versetzungsreaktion einer Frank'schen Partialversetzung mit einer Shockley'schen Partialversetzung die häufigste Ursache für die Bildung einer vollständigen 60° -Misfit-Versetzung ist.

Eine vergleichende TEM-Untersuchung von *ZnSe* Epitaxieschichten der Universität Würzburg hat ergeben, dass durch das Aufwachsen einer ca. 150nm dicken *GaAs* Pufferschicht vor dem II-VI Wachstumsstart von Wachstumsbeginn an ein ausgeprägtes 2D Lagenwachstum von *ZnSe* beobachtet wird [Spa97]. Für den Fall, dass die anschließend abgeschiedene *ZnSe* Schicht (bis 20nm) undotiert ist, kann schließlich die Dichte der Frank'schen Partialversetzungen nochmals um mehr als eine Größenordnung verringert werden [Beh97]. Es wird daher vermutet, dass die höhere Güte der Würzburger Proben auf ein optimiertes Herstellungsverfahren zurückzuführen ist.

Als Ergebnis der KL-Mikroskopie-Untersuchungen am *ZnSe/GaAs(001)* Heteroepitaxiesystem ist festzuhalten:

- Es konnte erstmals eine unterschiedliche Rekombinationswirksamkeit von Gleitversetzungen in *ZnSe* nachgewiesen werden. Aus der Defektanordnung nach plastischer Nanodeformation wurde gezeigt, dass ausschließlich die polaren *Se(g)*-Versetzungssegmente für die Y-Lumineszenz verantwortlich sind. Die 60° -*Zn(g)*-Versetzungen sind als Zentren nichtstrahlender Rekombination identifiziert worden.
- Es wurde gefunden, dass polare 60° -*Se(g)*- und 60° -*Zn(g)*-Versetzungen maßgeblich zu der plastischen Relaxation bei der (001) Wachstumsrichtung von *ZnSe* beitragen. Beim Überschreiten der kritischen Schichtdicke nukleiert der *Se(g)*-Versetzungstyp bevorzugt bei ca. 150nm Schichtdicke. Der *Zn(g)*-Versetzungstyp nukleiert erst bei einer größeren Schichtdicke von ca. 350nm.

6.1.3 Elektronische und optische Eigenschaften von verspannten II-VI Epitaxieschichten

6.1.3.1 Theoretische Vorbetrachtungen

Offensichtlich ist die plastische Relaxation von (001) gewachsenen *ZnSe* Schichten durch Gleitversetzungen besonders im Bereich geringer Schichtdicken stark anisotrop. Zur Charakterisierung der Anisotropie wird im Folgenden auf der Basis der theoretischen KAPITEL 2 und 4 ein Formalismus weiterentwickelt, wie von RAMMOHAN *et al.* [Ram95] für tensil verspannte *In_xGa_{1-x}As* Schichten vorgeschlagen wurde.

Da die plastische Relaxation durch polare 60°-Gleitversetzungen erfolgt, diese jedoch zueinander orthogonale Linienrichtungen besitzen, wird Gleichung 4.4 und 4.5 für den anisotropen Spannungsabbau durch unterschiedliche Versetzungsdichten herangezogen. Mit den Substitutionen:

$$\varepsilon_+ = f_0 + b'/2(D_\alpha + D_\beta) \quad \text{und} \quad \varepsilon_- = b'/2(D_\alpha - D_\beta) \quad (6.1)$$

können durch die elastischen Randbedingungen, die an eine partiell anisotrop relaxierte Schicht gestellt werden müssen, die Elemente des Deformationstensors in einer (001) Basis errechnet werden:

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_+ \quad , \quad \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx} = \varepsilon_- \quad , \quad \varepsilon_{zz} = -2\varepsilon_+ C_{12}/C_{11} \quad \text{und} \quad \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{zx} = \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zy} = 0.$$

Mit den Komponenten des Deformationstensors lautet der Hamiltonoperator für die verzerrungsabhängige Änderung der Bandkanten nach Gleichung 2.3.4 und 2.3.5 in Matrixschreibweise:

$$H_S^{VB} = 2(a_c - a_v) \left(1 - 2 \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \hat{I} \cdot \varepsilon_+ + b \left(1 + 2 \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \varepsilon_+ + d/4 \begin{pmatrix} 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \varepsilon_- \quad (6.2)$$

mit C_{ij} : elastische Konstanten, siehe Tabelle 6.1.

Im Hamiltonoperator 6.2 sind die ersten beiden Summanden proportional ε_+ . Das bedeutet, dass eine homogene Versetzungsdichte zu einer hydrostatisch induzierten Energieverschiebung der Bänder führt. Der zweite Term bewirkt eine Aufhebung der Entartung des Γ_8 -Bandes in ein **hh**- und **lh**-artiges Band. Der letzte Summand proportional zu ε_- führt zu einer Polarisation der in Wachstumsrichtung emittierten Lumineszenz, sobald eine Differenz der Versetzungsdichten in den α - und β -Versetzungssystem auftritt. Das Lösen der Schrödingergleichung mit dem Hamiltonoperator 6.2 führt auf die Energieverschiebung der optischen Übergänge in Abhängigkeit von den Verzerrungsparametern 6.1.

$$\begin{aligned}\Delta E_{u_{v1}} &= 2(a_c - a_v) \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \varepsilon_+ - \sqrt{4b^2 \left(\frac{1}{2} + \frac{C_{12}}{C_{11}}\right)^2 \varepsilon_+^2 + \frac{d^2}{64} \varepsilon_-^2} \\ \Delta E_{u_{v2}} &= 2(a_c - a_v) \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \varepsilon_+ + \sqrt{4b^2 \left(\frac{1}{2} + \frac{C_{12}}{C_{11}}\right)^2 \varepsilon_+^2 + \frac{d^2}{64} \varepsilon_-^2}\end{aligned}\quad (6.3)$$

Für isotrope Versetzungsdichten, also $\varepsilon_- \rightarrow 0$, geht die Energieverschiebung der Niveaus, wie durch Gleichung 6.3 beschrieben, in das bekannte Verhalten der Leicht- und Schwerlochbänder für biaxial symmetrisch verzerrte Schichten über [Asa83, Sha88, Loz91]⁹.

	C_{11} [GPa]	C_{12} [GPa]	Autor
<i>ZnSe</i>	85.9	50.6	[Lee70]
<i>CdTe</i>	53.3	36.5	[Row74]

Tabelle 6.1 : Elastische Konstanten für *ZnSe* und *CdTe* (Zimmertemperatur).

In isotroper Näherung und nach Einsetzen der Materialparameter in die Gleichungen 6.3 aus den Tabellen 2.3.2 und 6.1 erhält man unter Vernachlässigung der Temperaturabhängigkeit der elastischen Konstanten, für die Änderung der Übergangsenergien des **hh/lh** Dupletts bei pseudomorph verspannten *ZnSe* Heteroepitaxiesystemen im Vergleich zu einem unverspannten *ZnSe* Kristall :

$$\Delta E_{hh} = -0.82\text{eV} \cdot \varepsilon_+ \quad \text{und} \quad \Delta E_{lh} = -4.27\text{eV} \cdot \varepsilon_+. \quad (6.5)$$

Das Auftreten von anisotropen Versetzungsdichten im Bereich der kritischen Schichtdicke h_c führt zu einer asymmetrischen Verzerrung $\varepsilon_- > 0$ und damit im Hamiltonoperator 6.2 zum Auftreten von Nebendiagonalelementen. Diese mischen bei einer Diagonalisierung die **hh**- und **lh**-Zustände $|3/2, \pm 3/2\rangle$ und $|3/2, \pm 1/2\rangle$ miteinander. Damit verlieren die Wellenfunktionen ihren eindeutigen Charakter als schweres und leichtes Loch. Die neuen Eigenzustände des Hamiltonoperators, entwickelt in der alten Basis, besitzen die Form:

$$\begin{aligned}|u^{v1}\rangle \uparrow &= c_{hh} |3/2, +3/2\rangle + ic_{lh} |3/2, -1/2\rangle \\ |u^{v2}\rangle \uparrow &= c_{hh} |3/2, +1/2\rangle - ic_{lh} |3/2, -3/2\rangle \\ |u^{v2}\rangle \downarrow &= c_{hh} |3/2, -1/2\rangle - ic_{lh} |3/2, +3/2\rangle \\ |u^{v1}\rangle \downarrow &= c_{hh} |3/2, -3/2\rangle + ic_{lh} |3/2, +1/2\rangle\end{aligned}$$

Für den Fall einer vollständigen plastischen Relaxation durch *Se(g)*-Versetzungen in der Richtung orthogonal zu deren Linienrichtung, d.h. $D_\alpha = 5 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$ und $D_\beta = 0$, findet man

⁹ Beachte Vorzeichenkonvention!

$c_{hh} \approx 0.98$ und $c_{lh} \approx 0.20$ nach Einsetzen der Zahlenwerte für die elastischen Konstanten und die Verzerrungsparameter¹⁰ $\varepsilon_+ = -2.5 \cdot 10^{-3}$ und $\varepsilon_- = 2.5 \cdot 10^{-3}$.

Die optischen Übergänge der spinentarteten, hauptsächlich **hh**-artigen Eigenzustände $|u^{V1}\rangle \uparrow$ und $|u^{V1}\rangle \downarrow$ besitzen eine bevorzugte Polarisationsrichtung mit einem elektrischen Feldvektor parallel zur $\langle 110 \rangle$ Achse. Die hauptsächlich **lh**-artigen Übergänge $|u^{V2}\rangle \uparrow$ und $|u^{V2}\rangle \downarrow$ sind bevorzugt parallel zur $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ Achse polarisiert. Dies geht aus den optischen Auswahlregeln in Tabelle 3.1 hervor.

Die Charakterisierung der Nebendiagonalelemente ε_- des Deformationstensors beim Auftreten von anisotropen Versetzungsdichten kann über den linearen Polarisationsgrad (*DLP* degree of linear polarization)

$$DLP = \frac{I_{\langle 1\bar{1}0 \rangle} - I_{\langle 110 \rangle}}{I_{\langle 1\bar{1}0 \rangle} + I_{\langle 110 \rangle}} \quad (6.6)$$

der Emissionslinien erfolgen [San99]. Hierbei entspricht im Experiment $I_{\langle 110 \rangle}$ der gemessenen Intensität für den Linearpolarisator parallel bzw. $I_{\langle 1\bar{1}0 \rangle}$ der Intensität senkrecht zur $\langle 110 \rangle$ Achse. Die analytische Beschreibung der Polarisation nach Gleichung 6.6 liefert für **hh**-artige Subkomponenten des Exzitons

$$DLP = \frac{4c_{lh}^2 - (\sqrt{3}c_{hh} + c_{lh})^2}{4c_{lh}^2 + (\sqrt{3}c_{hh} + c_{lh})^2} \approx -85\%. \quad (6.7)$$

Die in Abschnitt 6.1.1 durch die KL-Mikroskopie untersuchten Proben wurden anschließend durch Photolumineszenzuntersuchungen charakterisiert, unter Berücksichtigung einer möglichen Vorzugsrichtung des elektrischen Feldvektors der emittierten Lumineszenz. Die Ergebnisse dieser Untersuchung sind im Folgenden zusammengestellt.

Da die (001) Halbleiterschichten und die ebenfalls so orientierten Wafer bevorzugt entlang den $\langle 110 \rangle$ Richtungen spalten, wurde im Mikroskop vor der PL-Untersuchung die Richtung der Hell- und Dunkelkontraste bezüglich der Probenkanten bestimmt. In den Photolumineszenzmessungen war somit die $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ Achse von Proben mit ausgeprägten Linienkontrasten bekannt.

¹⁰ Das Ergebnis sollte den maximal zu erwartenden *DLP* für eine anisotrope Relaxation durch unterschiedliche Versetzungsdichten widerspiegeln.

6.1.3.2 Lumineszenzcharakterisierung der *ZnSe* Epitaxieschichten

In Abbildung 6.1.6 sind die polarisationsaufgelösten Photolumineszenzspektren im Bereich der Matrixlumineszenz der *ZnSe* Schichten wiedergegeben.

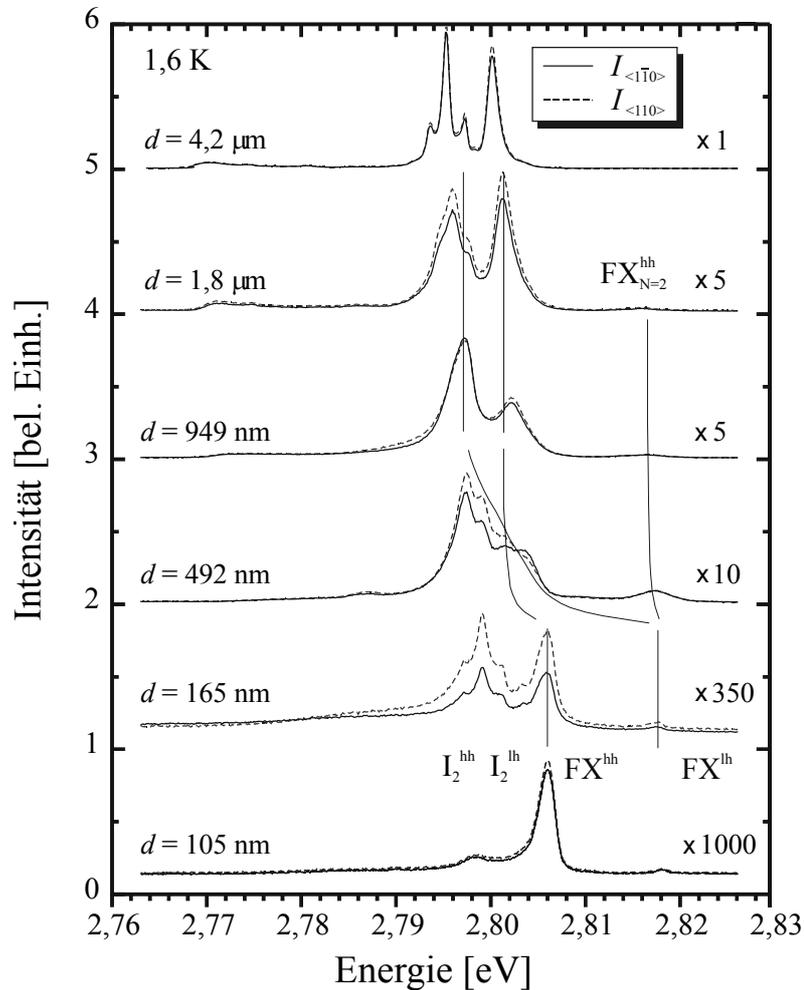


Abbildung 6.1.6 : Polarisationsaufgelöste Photolumineszenzspektren *ZnSe* Proben bei $T=1.6\text{K}$. Die gestrichelten Linien deuten die Verschiebung der *hh*-/*lh*-Komponenten des freien Exzitons in Abhängigkeit von der Schichtdicke an.

Bei jedem der Spektren sind mehrere Emissionslinien zu beobachten, deren energetische Lage mit der Verzerrung in unterschiedlich dicken Schichten variiert. Aufgrund der vorhergehenden Betrachtungen können die Linien eindeutig identifiziert werden. Da eine Verzerrung die Kristallsymmetrie erniedrigt, ist jede der Linien als Teil eines aufgespaltenen *hh/lh*-artigen Dupletts aufzufassen, mit einem ungefähren Intensitätsverhältnis von jeweils 3:1. Die geringe Anzahl der Linien weist die Proben als qualitativ hochwertig aus.

Schichtdicke : Dem Normierungsfaktor der Spektren kann entnommen werden, dass die Intensität mit sinkender Schichtdicke abnimmt. Dieser Effekt wird besonders an dünnen Schichten deutlich, da hier das Anregungsvolumen sehr gering ist. Hiervon ist besonders die Probe mit 50nm Schichtdicke betroffen, da aber das Spektrum nicht mehr Information

beinhaltet als das der analog vollverspannten Probe mit 105nm Dicke, kann auf eine Darstellung verzichtet werden.

Dotierung : Bei allen Proben ist ca. 8meV unterhalb des Grundzustandes des *hh*-artigen Exzitons (2.806eV bei der noch vollständig verspannten Probe) ein flacher donatorartiger Zustand I_2 zu erkennen. Als sein chemischer Ursprung ist eventuell Chlor (*Cl*) oder Aluminium zu vermuten [Gut91]. Die Dotierung war nicht beabsichtigt. Wahrscheinlich handelt es sich hierbei um Chlor, da dieses Element üblicherweise bei der Herstellung anderer Schichten als n-Dotierung verwendet wurde. Die Proben gelten als nominell undotiert.

Verspannung : Die Energiepositionen der Linien und die Polarisation parallel zur $\langle 110 \rangle$ Achse weisen fast alle Übergänge als hauptsächlich *hh*-artig aus. Bei den dünnen Schichten ist 13meV über dem Grundzustand der angeregte Zustand des *hh*-artigen Exzitons zu beobachten. Diese hochenergetischen Linien sind aufgrund der niedrigen Temperatur der Ladungsträger von schwächerer Intensität.

Bei den Spektren der Proben mit 165nm und 495nm Dicke, die den Schichten mit der größten anisotropen Versetzungsdichte entsprechen, ist eine deutliche Vorzugsrichtung in der Polarisation der emittierten Lumineszenz zu beobachten, wobei eine erhöhte Lumineszenzintensität der meisten Linien senkrecht zu den in den KL-Abbildungen gefundenen *Se(g)*-Versetzungslinienkontrasten festgestellt wird. Die Polarisation eines bestimmten *lh* Übergangs ist im vorliegenden Fall der Heterostruktur *ZnSe/GaAs(001)* relativ schwer zu beobachten. Speziell bei der 165nm dünnen, quasi in einer Richtung noch vollverspannten Schicht fällt die energetische Lage des *lh*-Exziton in etwa mit dem angeregten Zustand des *hh*-artigen Exzitons zusammen. Die Schichten mit kleineren oder wesentlich größeren Dicken sind entweder isotrop verspannt oder schon symmetrisch relaxiert und es tritt erwartungsgemäß keine Polarisation der Übergänge auf. Ein deutlich *lh*-artiger Übergang ist jedoch aufgrund seiner $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ Vorzugsorientierung bei der Schicht mit 500nm Dicke bei 2.804eV zu erkennen.

Die vergleichenden Photolumineszenzmessungen an den Proben aus Regensburg unter gleichen Messbedingungen lieferte dieselbe Vorzugsrichtung der Polarisation der optischen Übergänge, wie der Abbildung 6.1.7 entnommen werden kann.

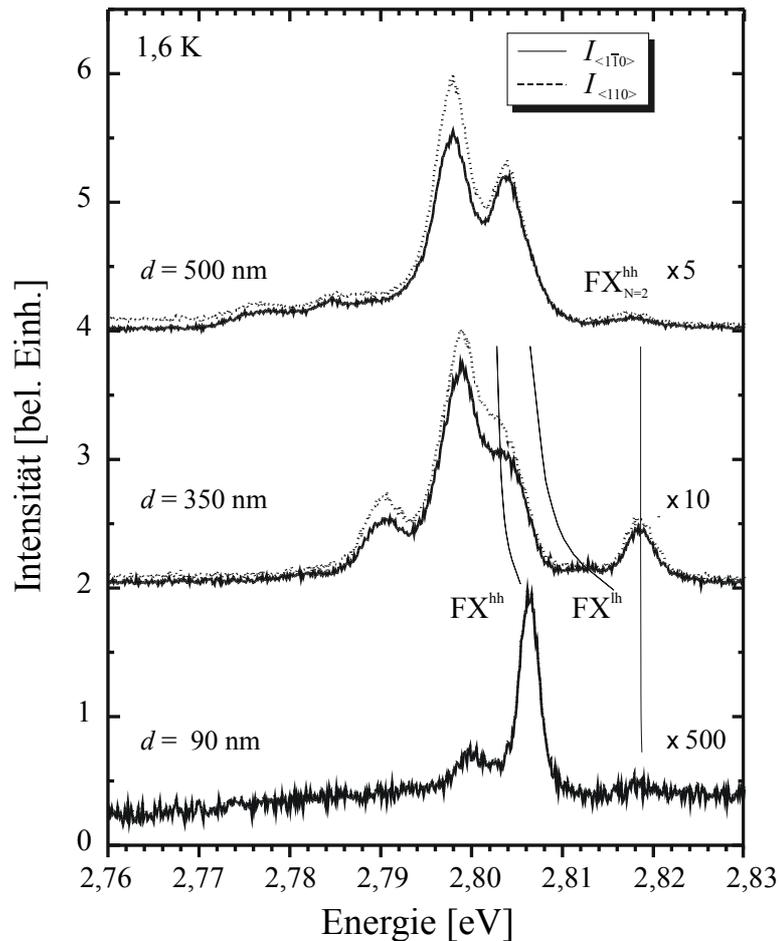


Abbildung 6.1.7: Polarisationsaufgelöste Photolumineszenzspektren der *ZnSe* Schichten aus Regensburg.

Die Photolumineszenzspektren bescheinigen diesen Schichten gleichfalls eine hohe Qualität. Sie sind abgesehen von einem flachen Donatorzustand bei der gleichen Übergangsenergie ebenfalls als nominell undotiert anzusehen. Die Proben sind hinsichtlich der plastischen Relaxation vergleichbar mit den zuvor untersuchten Proben aus Würzburg.

6.1.4 Plastische Relaxation von *ZnSe*(001) auf *GaAs*(001) Substrat

Aus der Energieverschiebung der *lh/hh* Komponenten der Linien des freien Exzitons lässt sich unter Benutzung von Gleichung 6.4 der Verzerrungsparameter ε_+ in der Näherung für biaxial verspannte Schichten ($\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$) ermitteln. Das Ergebnis dieser Auswertung ist in Abbildung 6.1.8 dargestellt.

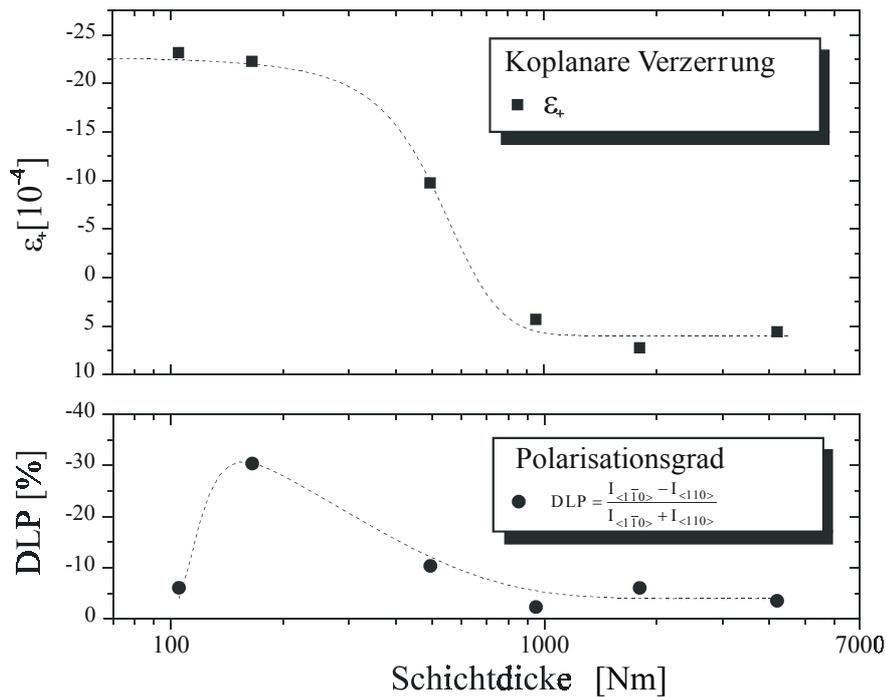


Abbildung 6.1.8: Oberer Teil der Abbildung : biaxiale Verzerrung der Schichten in Abhängigkeit von der Schichtdicke, ermittelt aus Gleichung 6.5.
 Unterer Teil der Abbildung: Dazu korrelierter *DLP* des *hh*-artigen Übergangs (*FX*).

Wie man aus dem Verlauf der Messpunkte im oberen Teil der Abbildung 6.1.8 erkennt, gibt es unterhalb von 165nm keinen Abbau der biaxialen Verzerrung der Schichten, das bedeutet, die 105nm Schicht ist noch kohärent aufgewachsen. Bei ungefähr 500nm Schichtdicke ist schon ein deutliches Absinken der Verzerrung zu erkennen. Ab ungefähr 1000nm haben die Schichten faktisch ihre natürliche Gitterkonstante erreicht und der Verzerrungsparameter ändert sich kaum noch mit der Schichtdicke. Dass ε_+ dabei einen positiven Wert annimmt, hat dabei mit der bei der Messtemperatur von ca. 1.6K thermisch induzierten Verspannung zu tun, weil die biaxiale Verzerrung

$$\varepsilon_+ = \varepsilon(T_{gr}) - (\alpha_{Schicht} - \alpha_{Substrat})\Delta T \quad (6.8)$$

mit $\varepsilon(T_{gr})$: Gitterverzerrung bei der Wachstumstemperatur,
 $\alpha_{Substrat}$: thermischer Ausdehnungskoeffizient von *GaAs*
 $\alpha_{Schicht}$: " " " von *ZnSe*

temperaturabhängig ist. Wenn die Schicht von Wachstumstemperatur ($\varepsilon(T_{gr}) \approx -0,31\%$, bei $T_{gr} \approx 300^\circ\text{C}$) auf Messtemperatur abgekühlt wird, ändert sich die Gitterkonstante der Schicht infolge des Verhältnisses der thermischen Ausdehnungskoeffizienten stärker als die des Substrates ($\alpha_{Schicht} > \alpha_{Substrat}$). Die thermisch induzierte Verzerrung ist der Gitterfehlpassung entgegengerichtet. Jedoch sind pseudomorph aufgewachsene *ZnSe* Schichten bei Messtemperatur immer noch effektiv kompressiv verspannt. Hat die Schicht ihre Volumengitterkonstante erreicht, dominiert nur noch die thermisch induzierte Verzerrung mit tensilem Charakter, die dann

unabhängig von der Schichtdicke ist. Das beobachtete Verhalten der PL-Linien von verspannten *ZnSe* Schichten ist bekannt und in der Literatur dokumentiert [Ohk88].

Der Verlauf des *DLPs* in Abhängigkeit von der Schichtdicke (unterer Teil der Abb. 6.1.8) spiegelt den Grad der anisotropen Relaxation in den *ZnSe* Schichten wider. Ein *DLP* nahe Null ist ein sicheres Indiz für symmetrisch verzerrte wie auch symmetrisch relaxierte Schichten. Bei der Probe mit 165nm ist durch das bevorzugte Auftreten von *Se(g)*-Versetzungen die anisotrope Verspannung aufgrund des daraus resultierenden stark asymmetrischen Versetzungsnetzwerks am größten. Die Messergebnisse weisen die Probe als partiell relaxiert parallel der [110] Richtung aus. Der durch die Messung ermittelte *DLP* Wert von ca. -30% ist vom Betrag her kleiner als der durch die analytische Betrachtung hergeleitete Wert für eine volle Relaxation gemäß Gleichung 6.7.

6.1.5 Spannungsgradienten innerhalb der Schicht und deren Beeinflussung durch unterschiedliche Dotierung

Nutzt man die Tatsache, dass bei optischer Anregung mittels Laserstrahl die spektroskopische Information aus Schichttiefen im Bereich der Anregungswellenlänge stammt, kann mit Hilfe eines sukzessiven Ätzabtrags an einer dicken Schicht und mit korrelierenden, polarisationsaufgelösten PL-Messungen ein Tiefenprofil der Spannungsrelaxation erstellt werden [Wor98].

Zu diesem Zweck wurde eine Serie von mit Stickstoff dotierten *ZnSe* Schichten mit verschiedener Schichtdicke durch polarisationsaufgelöste Photolumineszenz untersucht. Anschließend wurde von der 2500nm dicken *ZnSe* sukzessive in Schritten von 400nm die Oberfläche durch nasschemisches Ätzen abgetragen und nach jedem Ätzschritt der lineare Polarisationsgrad bestimmt. Aufgetragen in der nachfolgenden Abbildung 6.1.9 ist nun das Intensitätsverhältnis $I_{<110>} / I_{<1\bar{1}0>}$ für das Maximum der I_1-N -Linie, die mit der Rekombination eines am Stickstoffakzeptor gebundenen Exzitons assoziiert wird.

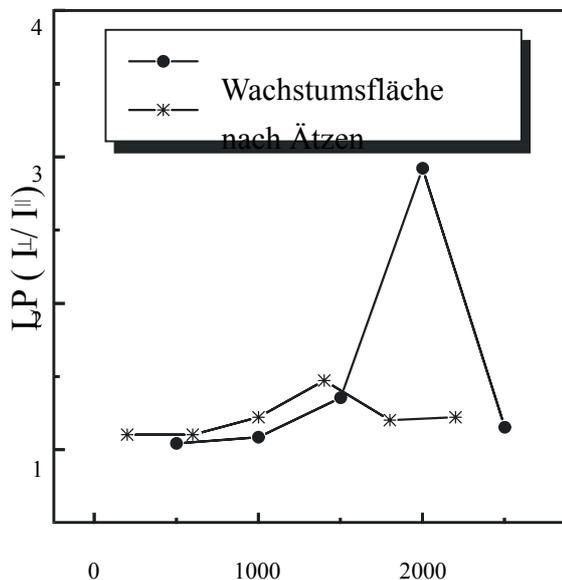


Abbildung 6.1.9: Lineare Polarisation $LP = I_{<110>} / I_{<1\bar{1}0>}$ als Funktion der Schichtdicke für die mit dem am Stickstoffakzeptor gebundenen Exziton assoziierte I_1-N -Linie. Punktsymbole repräsentieren die LP an der gewachsenen Oberfläche von Schichten unterschiedlicher Dicke. Sternsymbole stehen für die LP an der Schicht, für die jeweils die Oberfläche in Schritten von 400nm abgetragen wurde.

An den Proben mit gewachsener Oberfläche (Punkt-Symbole) sind mit zunehmender Schichtdicke stetige Zuwächse der LP Werte bis zu einer Dicke von ungefähr 2000nm festzustellen. Für diese Probe konnte eine LP von 3 beobachtet werden. Hingegen ist bei einer Schichtdicke von 2500 nm der LP Wert wieder auf den Ausgangswert abgefallen.

Für die Messserie an der ursprünglich 2500nm dicken Schicht, bei der die Oberfläche in Schritten von 400nm abgetragen wurde (Stern-Symbole), ist eine deutliche Abweichung vom Verlauf der LP Werte an den Proben mit gewachsener Oberfläche zu erkennen. Auch für die LP Werte der geätzten Schicht ist ein Maximum bei ungefähr 1400nm festzustellen.

Die Interpretation für das gefundene Tiefenprofil der LP Werte ist wie folgt :
Aufgrund der Tatsache, dass die lineare Polarisation der Lumineszenz gebundener Exzitonen ein höchst sensitives Maß für eine homogen gemittelte anisotrope Schichtverzerrung ist (→ KAPITEL 7, Abschnitt 7.1.1), spiegelt der Verlauf der Messwerte in Abbildung 6.1.9 die Differenz der Versetzungsdichten im α - und β -Versetzungssystem wider.

Bei der Untersuchung der Wachstumsoberfläche sind bei dünnen Schichten in beiden Versetzungssystemen keine Versetzungen vorhanden. Folglich ist das Verhältnis der beiden Intensitäten mit orthogonaler Polarisationsrichtung gleich Eins. Die bevorzugt nukleierenden $Se(g)$ -Misfit-Versetzungen induzieren eine Spannungsrelaxation in $[110]$ Richtung. Damit ist eine Polarisation aller hh -artigen Übergänge parallel dazu verbunden. Bei der Probe mit 2000nm Schichtdicke ist die Asymmetrie der $Se(g)$ - und $Zn(g)$ -Versetzungsdichten am größten.

Anders als an der Wachstumsoberfläche sind beim sukzessiven Abätzen die Versetzungsdichten in den Subsystemen sogar noch bis zu einer Schichthöhe von 1800nm gleich. Ebenso hat sich das Maximum in der Asymmetrie der $Se(g)$ - und $Zn(g)$ -Versetzungsdichten zu niedrigeren Werten der Schichthöhe verschoben. Das bedeutet :

- Sowohl $Se(g)$ - als auch $Zn(g)$ -Versetzungen nukleieren nahe der Oberfläche während des Wachstumsprozesses in der MBE Anlage und breiten sich anschließend durch Volumengleitprozesse in Richtung der Heterogrenzfläche aus.

Aus den PL-Spektren in den vorherigen Abbildungen 6.1.6 und 6.1.7 können analog zum DLP des freien Exzitons die LP -Werte der Rekombinationslinie des am Chlor-Donator gebundenen Exzitons ermittelt werden. Das Ergebnis dieser Auswertung ist als Funktion der Schichtdicke in der folgenden Abbildung 6.1.10 aufgetragen.

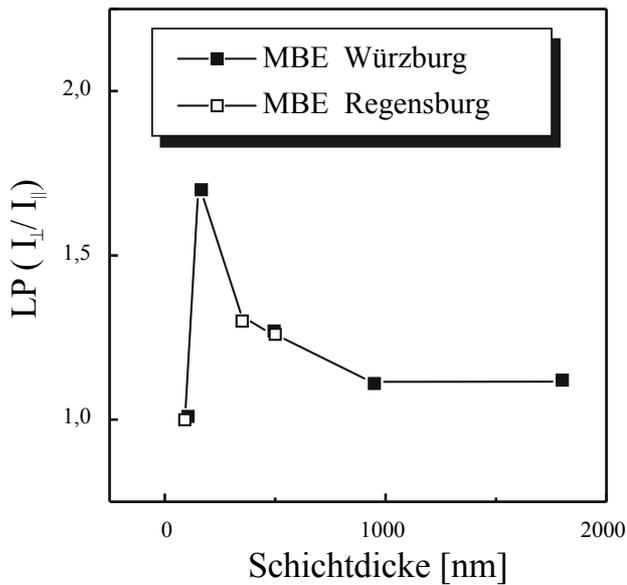


Abbildung 6.1.10: Lineare Polarisation als Funktion der Schichtdicke. Bestimmt wurde die LP an der gewachsenen Oberfläche für den (D^0, X) Übergang der mit Chlor verunreinigten Proben. Geschlossene Symbole entsprechen den ermittelten Werten für die MBE Proben aus Würzburg. Offene Symbole sind Werte der LP für die Proben aus der MBE Anlage der Universität Regensburg.

Bei Schichten unterhalb der kritischen Schichtdicke ist der Wert für die lineare Polarisation der Lumineszenz wie erwartet $LP = 1$. Nach dem Überschreiten der kritischen Schichtdicke springt der LP -Wert im Rahmen der zur Verfügung stehenden Proben auf den Maximalwert 1,7. Mit zunehmender Schichtdicke ist schließlich ein allmähliches Abklingen der LP -Werte festzustellen. Bei ungefähr 1000nm hat das Verhältnis der polarisierten Intensitäten wieder den konstanten Wert von $LP = 1$ erreicht.

Für den Fall der an einem Störstellenübergang bestimmten LP der Lumineszenz an der Wachstumsoberfläche der Proben unterscheidet sich das für die nominell undotierten Schichten erhaltene Ergebnis (Abb. 6.1.10) offensichtlich von den mit Stickstoff dotierten Proben (Abb. 6.1.9). In beiden Fällen spiegelt der LP -Wert für das an eine substitutionelle Störstelle gebundene Exziton den anisotropen Verzerrungszustand der Schicht wider. Bei den mit Chlor verunreinigten $ZnSe$ Schichten ist schon bei wesentlich geringeren Schichtdicken eine anisotrope Relaxation durch $Se(g)$ -Versetzungen festzustellen als bei den mit Stickstoff dotierten.

Eine Erklärung für den differenzierten plastischen Relaxationsprozess unterschiedlich dotierter $ZnSe$ Schichten ist der Einfluss von Selbstkompensationseffekten. Während die Nettodonorkonzentration linear mit dem auf einem Se Platz inkorporierten Chlor bis zu ungefähr 10^{-19}cm^{-3} ansteigt [Pöy98a], ist es eine bekannte Tatsache, dass eine effektive p -Dotierung von $ZnSe$ mit Stickstoff technologisch schwer zu realisieren ist. II-VI Halbleiter besitzen im Verhältnis zu den weniger ionischen III-V Verbindungen einen hohen Grad an Selbstkompensation. Die Akzeptoreigenschaft des Stickstoffs wird durch Bildung von Defektkomplexen mit entgegengesetzter elektronischer Wirksamkeit kompensiert oder teilweise sogar überkompensiert. Als intrinsische Defekte für die Komplexbildung werden die Selenvakanz bzw. ein Zinkatom auf einem Zwischengitterplatz diskutiert. Die entsprechenden Defektkomplexe besitzen niedrige Bildungsenergien. Stickstoff und seine assoziierten Komplexe induzieren eine starke negative Gitterverzerrung in der Umgebung der Defekte [Pöy98b]. Makroskopisch wurde durch Röntgenbeugungsexperimente eine Verkleinerung der Gitterkonstante des $ZnSe$ Kristalls [Pet93] mit steigender Konzentration der N Dotierung festgestellt. Dieses Verhalten führt bei mit Stickstoff

dotierten Epitaxieschichten zu einer Verkleinerung der Gitterfehlanpassung, was ebenso spektroskopisch gezeigt werden konnte [Wor98]. Eventuelle Alterungseffekte aufgrund unterschiedlichen Herstellungsdatums der mit Cl und N dotierten Proben können ausgeschlossen werden, da sich die gefundenen Effekte selbst in Proben unterschiedlicher Herkunft quantitativ einem Verlauf zuordnen ließen. Allerdings ist nicht bekannt, in welchem Maße eine Beeinflussung der Versetzungsdynamik durch die Absenkung des Fermi-niveaus in den mit Stickstoff dotierten Proben den gleichen Effekt erzielt, und darf daher nicht vernachlässigt werden.

- Aus den Untersuchungen der linearen Polarisation der Lumineszenz substitutioneller Störstellen kann geschlossen werden, dass das Maximum der anisotropen Spannungsrelaxation sich mit abnehmender Fehlanpassung, also mit zunehmender Stickstoffdotierung, zu größeren Schichtdicken verschiebt.

6.1.6 Untersuchung von $CdTe(001)$ auf $GaAs(001)$ Substrat

Es stellt sich nun die Frage, ob die gefundenen Effekte intrinsische Eigenschaften von Zinkselenid sind oder ob eine Verallgemeinerung auf andere II-VI Heteroepitaxiesysteme möglich ist. Zu diesem Zweck wurde eine $1.5\mu\text{m}$ dicke $CdTe(001)$ Schicht auf $(001)GaAs$ Substrat untersucht. Die relativ große kompressive Gitterfehlanpassung beträgt bei diesem Schichtsystem bei Raumtemperatur $f_0 = 0.137$.

Das in der Abbildung 6.1.11a dargestellte polarisationsaufgelöste PL-Spektrum der Probe zeigt eine Reihe von Lumineszenzlinien im exzitonischen Energiebereich oberhalb 1.58eV und im sich anschließenden Bereich der direkten Ladungsträgerrekombinationen zwischen 1.53eV und 1.57eV . Die Linien lassen sich, bis auf eine Ausnahme bei 1.566eV , die mit „?“ gekennzeichnet ist, verschiedenen bekannten Rekombinationsmechanismen zuordnen [Kuh92].

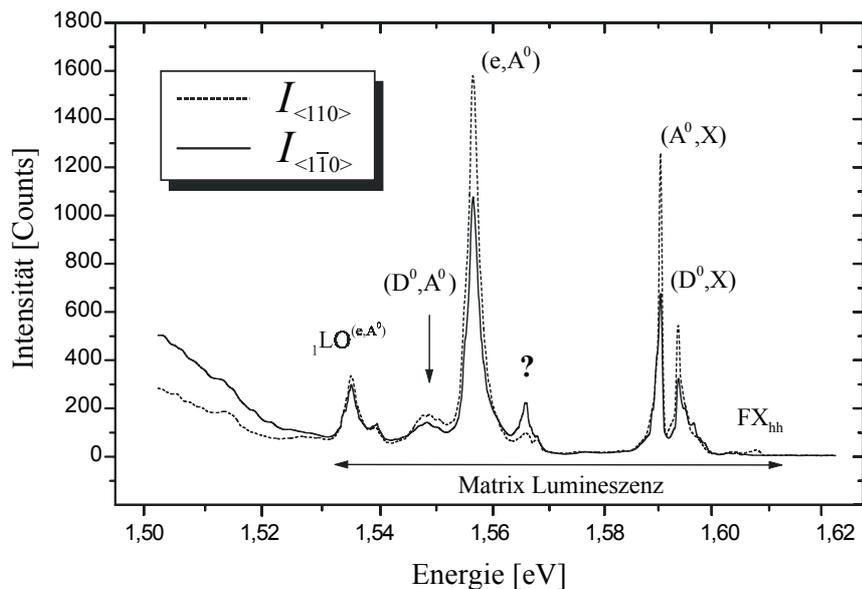


Abbildung 6.1.11a: Polarisationsaufgelöstes Photolumineszenzspektrum der Probe im Bereich der Matrixlumineszenz.

Alle Übergänge zeigen eine deutliche lineare Polarisation. Interessant ist die Rekombinationslinie des donatorgebundenen Exzitons (D^0, X) und des akzeptorgebundenen Exzitons (A^0, X). Bei dem Donator handelt es sich um ein substitutionelles *Cl* Atom auf einem *Se* Platz, beim Akzeptor um ein so genanntes A-Zentrum. In *CdTe* ist das A-Zentrum ein Beispiel für einen durch Selbstkompensation bedingten Defektkomplex. Dieser besteht aus einem *Cl* Atom auf einem *Se* Platz, welcher durch eine angelagerte Cadmiumvakanz überkompensiert wurde. Das Intensitätsverhältnis des (A^0, X) zum (D^0, X) Übergang von ca. 2.5:1 ist ein sicherer Indikator dafür, dass seit der Herstellung der Probe die Selbstkompensation weit fortgeschritten ist. Diese multiplen Linien sind wie im *ZnSe* auf *hh*-artige Übergänge zurückzuführen. Ihre Energiepositionen unterscheiden sich nur wenig von denen im Volumenhalbleiter. Ein höherenergetischer *lh*-artiger Übergang bei 1.596eV ist mit entgegengesetzter Polarisation ebenfalls zu beobachten.

- Analog wie in den asymmetrisch relaxierten *ZnSe* Schichten findet sich in (001) gewachsenem *CdTe* eine starke anisotrope Polarisation der exzitonischen Lumineszenz. Somit unterliegt das *CdTe/GaAs*(001) Heteroepitaxiesystem demselben plastischen Relaxationsprozess wie kompressiv verspanntes *ZnSe*. Da die PL-Linien der Matrixlumineszenz der untersuchten Probe trotz der hohen Gitterfehlpassung und der großen Schichtdicke deutlich polarisiert sind, ist zu vermuten, dass analog zu den *N* dotierten *ZnSe* Schichten Selbstkompensationseffekte einen großen Einfluss auf die Dynamik der plastischen Relaxation ausüben.

In der folgenden Abbildung 6.1.11b ist das polarisationsaufgelöste PL-Spektrum derselben Probe im Energiebereich zwischen 1.57eV und 1.40eV dargestellt. Dies ist *CdTe* der Energiebereich, in dem die Lumineszenz mit Versetzungen assoziiert wird.

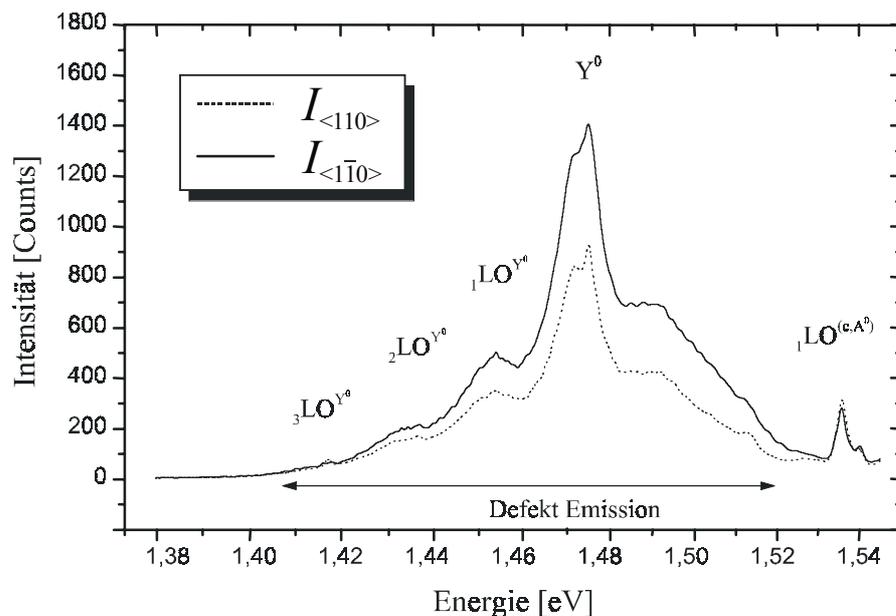


Abbildung 6.1.11b: Polarisationsaufgelöstes Photolumineszenzspektrum im Bereich der Defektemission der 1.5 μm dicken *CdTe/GaAs*(001) Epitaxieschicht. Das Maximum der Y-Lumineszenz ist senkrecht zur Matrixlumineszenz polarisiert.

Die im Spektrum zu erkennende Lumineszenz mit einem Doppelmaximum bei 1.475eV ist identisch mit der erstmals von DEAN [Dea84] publizierten Y-Lumineszenz in *CdTe*. Da die Halbwertsbreite der nullten Phononenordnung vergleichbar der Phononenenergie von 21.3meV ist, verschmilzt die Lumineszenzlinie mit den niederenergetischen Phononenrepliken zu einer relativ breiten Bande. Deutlich ausgeprägt ist jedoch eine höherenergetische Schulter bei ca. 1.49eV. Die Lumineszenzbande ist ebenfalls linear polarisiert. Wie aus dem Vergleich der PL-Spektren in Abbildung 6.1.11a und 6.1.11b zu erkennen ist, liegt der elektrische Feldvektor der Y-Lumineszenz senkrecht zur Polarisationsrichtung der Matrixlumineszenz, also parallel zur $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ Achse. Dies ist die Linienrichtung der Misfit-Versetzungssegmente. Die mit „?“ gekennzeichnete Linie im Spektrum der Matrixlumineszenz 6.1.11a mag aufgrund ihrer gleichen Vorzugsrichtung der Polarisation ebenfalls mit Versetzungen assoziiert werden.

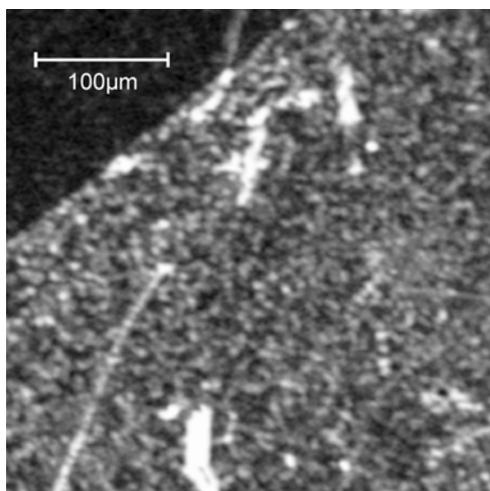


Abbildung 6.1.12: Panchromatische Kathodolumineszenzaufnahme einer 1.5 μm dicken *CdTe/GaAs(001)* Epitaxieschicht, $T=72\text{K}$.

Auf der linken Seite in Abbildung 6.1.12 ist eine panchromatische Kathodolumineszenzaufnahme der Probe zu sehen. Eine nicht dargestellte SE-Aufnahme der Probenoberfläche belegt, dass am linken oberen Rand des untersuchten Bereichs der Probe sich ein Teil der Schicht vom Substrat abgelöst hat. Im Bereich der *CdTe* Schicht sind homogen verteilte punktförmige Hell- und Dunkelkontraste zu sehen. Die Kontraste weisen auf kurze Versetzungssegmente hin. Durchstoßversetzungen als Ursache der Punktkontraste sind weniger wahrscheinlich, da die Versetzungslumineszenz sonst unpolarisiert sein sollte (\rightarrow KAPITEL 7, Abschnitt 7.2.1). Durch monochromatische

KL-Abbildungen kann gezeigt werden, dass die von Phononensatteliten begleitete Lumineszenzbande bei Energien kleiner als 1.52eV ausschließlich von den punktförmigen Hellkontrasten stammt. Durch Photolumineszenzmessungen an Versetzungen, die auf Proben von *CdTe* Volumenmaterial induziert wurden, ist sichergestellt, dass es sich hierbei eindeutig um Versetzungslumineszenz handelt [Hil97, Sch01].

Die wichtigen experimentellen Befunde für die Versetzungslumineszenz in *CdTe* zusammengefasst :

- Es ist erstmals eine lineare Polarisation der Y-Lumineszenz in einer MBE gewachsenen *CdTe/GaAs(001)* Epitaxieschicht festgestellt worden. Die Vorzugsrichtung dieser Polarisation ist orthogonal zur linearen Polarisation der Lumineszenz der Kristallmatrix.

6.1.7 Strukturelles Relaxationsmodell für die (001) Wachstumsoberfläche von kompressiv verspannten II-VI Epitaxieschichten durch polare Gleitversetzungen

Der im oberen Teil in Abbildung 6.1.8 durch eine spektroskopische Methode festgestellte Verlauf der symmetrischen Verzerrung in Abhängigkeit von der Schichtdicke liegt in sehr guter Übereinstimmung mit dem von DODSON *und* TSAO 1987 vorgeschlagenen Modell für die Dynamik der Spannungsrelaxation von Epitaxieschichten [Dod87].

Die Energieposition der Linien in den PL-Spektren zeigt bis 105nm Schichtdicke noch eine kohärente Schichtverspannung an. Erst nach dem Überschreiten der kritischen Schichtdicke findet eine Nukleation von Versetzungen statt. Die anfängliche Generation von Versetzungen ist noch relativ ineffektiv, weil die Schichten im Bereich der kritischen Schichtdicke relativ wenig mechanische Energie aufgebaut haben. Erst bei größer werdender Schichtdicke und steigender Verzerrung erhöhen sich die Versetzungsgeschwindigkeiten und die Versetzungslinienlängen. Vermehrte Interaktionen zwischen Versetzungen, insbesondere mit neuentstandenen Durchstoßversetzungen, führen zu Versetzungsmultiplikationseffekten¹¹. Eine exponentielle Zunahme der Anzahl neuer Versetzungen führt nun zu einem massiven Abbau der Schichtverzerrung. Dieser Schichtdickenbereich ist durch einen großen Gradienten im Verlauf des ε_+ -Graphen über der Schichtdicke gekennzeichnet, wie er bei etwa 500nm Schichtdicke zu erkennen ist. Der relaxierte Gleichgewichtszustand wird anschließend nur asymptotisch erreicht, da die Versetzungsgeschwindigkeiten mit der effektiven Verzerrung der Schicht nachlassen und die Multiplikationseffekte langsam verschwinden.

Jedoch sind durch die KL-Untersuchungen und polarisationsaufgelösten PL-Messungen zwei wesentlich neue Ergebnisse erhalten worden, denen in einem erweiterten Dodson-Tsao-Modell Rechnung getragen werden muss :

- Anisotrope Relaxation der Verspannung durch unterschiedliche polare Versetzungsdichten bezüglich $\langle 110 \rangle$ und
- anisotrope Spannungsgradienten in Abhängigkeit von der Schichtdicke.

Besonders im Bereich der kritischen Schichtdicke besitzen diese Effekte entscheidende Relevanz, da ausschließlich ein polarer Versetzungstyp auftritt.

Im Folgenden wird daher zur Erklärung der lumineszenzspektroskopisch festgestellten Effekte der plastischen Relaxation ein für die II-VI Halbleiter alternativer Nukleationsmechanismus von Misfit-Versetzungen in Epitaxieschichten diskutiert.

Für die Erklärung der „initialen“ Bildung von Misfit-Versetzungen in Epitaxieschichten wird in der Literatur üblicherweise das MATTHEWS *und* BLAKESLEE Modell [Mat74] herangezogen.

¹¹ Einen guten Überblick über die so genannten „sekundären Generationsmechanismen“ von Misfit-Versetzungen liefert der Übersichtsartikel von V.I. VDOVIN [Vdo99].

Darin sind vom Substrat in die Schicht aufsteigende Durchstoßversetzungen essentielle Vorbedingung für die Entstehung von Misfit-Versetzungen. Die in dieser Arbeit erhaltenen Ergebnisse legen jedoch nahe, dass eine notwendige Quelldichte von Durchstoßversetzungen für eine vollständige Spannungsrelaxation in modernen II-VI Heteroepitaxiesystemen nicht vorhanden ist. Kommerziell erhältliche *GaAs*(001) Substrate besitzen eine Dichte an eingewachsenen Versetzungen von rund $5 \times 10^3 \text{ cm}^{-2}$ [12], dies ist etwa eine Größenordnung zu wenig um eine pseudomorph verspannte *ZnSe* Epitaxialschicht trotz der geringen Gitterfehlpassung mit dem Substrat vollständig durch Quergleiten von Durchstoßversetzungen zu relaxieren.

Ein alternatives Modell für die Entstehung von Misfit-Versetzungen durch Nukleation von Versetzungshalbschleifen an der Oberfläche wurde von MATTHEWS *und* JESSER [Mat67] vorgeschlagen. Hierzu sind erst jüngst von WAGNER für die ternären III-V Verbindungshalbleiterschichten $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{P}$ und $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ auf *GaAs*(001) bzw. *InP*(001) Substraten detaillierte elektronenmikroskopische Analysen und theoretische Betrachtungen publiziert worden [Wag98, Wag99].

Um alle erhaltenen experimentellen Ergebnisse hinreichend beschreiben zu können, insbesondere den Spannungsgradienten innerhalb der Schicht, muss für kompressiv verspannt gewachsene II-VI Halbleiter eine Nukleation von polaren Versetzungshalbschleifen an der (001) Wachstumsoberfläche angenommen werden. Hierfür wird das Strukturmodell in Abbildung 6.1.13 vorgeschlagen.

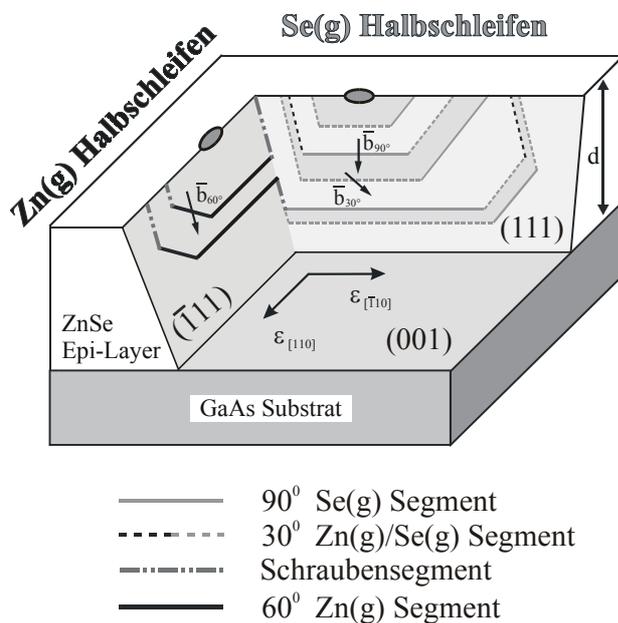


Abbildung 6.1.13: Schematische Darstellung zur plastischen Relaxation von (001) ZnSe Heteroepitaxiesystemen durch Nukleation und Ausbreitung von polaren Gleitversetzungssegmenten. Dissoziierte *Se(g)*- und *Zn(g)*-Versetzungshalbschleifen entstehen an Quellen in der Nähe der freien Oberfläche und breiten sich anschließend in Richtung Interface aus. (*Zn(g)* zur Vereinfachung als vollständige Segmente dargestellt)

In Abbildung 6.1.13 ist eine schematische Darstellung der Nukleation und Ausbreitung von Versetzungen in einer *ZnSe/GaAs*(001) Heterostruktur dargestellt. Es sind an Oberflächenquellen, nukleierende *Se(g)*- und *Zn(g)*-Versetzungshalbschleifen dargestellt, wie sie auf den Rückseiten der Doppeleneben in die Schicht hineingleiten. In einem modifizierten Dodson-

¹² <http://www.fcm-germany.com/> (Freiberger Compound Materials GmbH)

Tsao-Modell für die Spannungsrelaxation könnte ebenfalls der homogenen jedoch nicht isotropen Entstehung von polaren Halbschleifen Rechnung getragen werden. Unter dem Einfluss der biaxialen Schichtverspannung werden jeweils zwei Gleitsysteme, für die $Se(g)$ -Versetzen das $(111)[\bar{1}10]$ und $(\bar{1}\bar{1}1)[1\bar{1}0]$ Gleitsystem sowie für die $Zn(g)$ -Versetzen das $(\bar{1}11)[110]$ und $(1\bar{1}1)[\bar{1}\bar{1}0]$ Gleitsystem, aktiviert. In der Initialphase, d.h. beim Erreichen der kritischen Schichtdicke nukleieren hochmobile 90° - $Se(g)$ -Partialversetzungen, die durch oberflächenparallele Gleitung ausgedehnte Misfitsegmente mit einer führenden 30° -Partialversetzung erzeugen. Diese gleiten anschließend in das Halbleitervolumen in Richtung Heterogrenzfläche hinein (Volumengleitung von Versetzungshalbschleifen). Erst bei wesentlich größeren Schichtdicken, ungefähr das Doppelte der kritischen Schichtdicke, nukleieren die weit weniger mobilen $Zn(g)$ -Versetzen. Vorstellbar ist ebenfalls eine Oberflächennukleation oder eine Entstehung durch Versetzungsmultiplikation. Zum Beispiel wären hier Quergleitprozesse an den nun in ausreichend großer Dichte vorhandenen Schraubenversetzungen denkbar.

6.2 Defektstruktur in $CdTe(111)$ Epitaxieschichten auf As passiviertem $Si(111)$ Substrat

Die im Folgenden untersuchten $CdTe(111)$ Schichten auf $Si(111)$ Substrat stammen ebenfalls aus der MBE Anlage der Universität Würzburg. Silizium besitzt bei Zimmertemperatur eine kubische Gitterkonstante von 5.43095\AA [God74]. Derartig gewachsene Epitaxieschichten sind daher mit einer Gitterfehlpassung von $f_0 = 0.177$ stark kompressiv verspannt, ähnlich wie $CdTe(001)$ Schichten auf $GaAs(001)$ Substrat. Wiederum besteht auch bei dieser Materialkonstellation die Problematik der thermischen Fehlanpassung. Die erheblich differierenden thermischen Ausdehnungskoeffizienten von $CdTe$ und Si sind $4.8 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ und $2.6 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ bei $T=300\text{K}$ [Smi75, Iba69]. Dies bedeutet, dass auch bei diesem Heteroepitaxiesystem bei einer Abkühlung unter Wachstumstemperatur (200°C - 300°C) die mechanisch in der Schicht gespeicherte Energie abnimmt und sowohl vorhandene Versetzungen immobilisiert als auch Versetzungsquellen inaktiviert werden. Die geometrische Lage der $Te(g)$ - und $Cd(g)$ -Versetzungssysteme wie sie in Projektion auf die (111) Wachstumsoberfläche von $CdTe$ Epitaxieschichten zu erwarten wäre¹³ kann der Abbildung 6.1.1, dem panchromatischen Mikrographen eines Mikrohärteeindrucks auf einem $(111)\bar{B}$ orientierten $CdTe$ Volumeneinkristall, entnommen werden.

Die zwei Epitaxieverfahren von $CdTe(111)\bar{B}$ auf Silizium, die in der Literatur publiziert sind, bedürfen im Folgenden einer kurzen Erläuterung.

Der eine Herstellungsprozess ist die Epitaxie von $CdTe(111)\bar{B}$ auf einem mit einer Monolage Stickstoff bedeckten $Si(001)$ Substrat. Die Besonderheit dieses Heteroepitaxiesystems ist die unterschiedliche Gittersymmetrie von Schicht und Substrat an der gemeinsamen Grenzfläche. Silizium besitzt bezüglich der geometrischen Lage der Bindungen an einer nichtrekonstruierten Grenzfläche eine vierfach symmetrische Oberfläche. Verglichen dazu sind die freien Bindungen an einer $(111)\bar{B}$ Oberfläche von $CdTe$ dreifach symmetrisch. Hierdurch gibt es für die Schicht vier Möglichkeiten aufzuwachsen, nämlich durch die Bildung von Zwillingen und Doppeldomänen. Diese ausgedehnten Kristallbereiche besitzen eine $\{111\}$ Richtung parallel zur Wachstumsrichtung, sind jedoch im Gegensatz zum Wirtskristall um 180° im Fall der Zwillingsdomäne beziehungsweise um jeweils $\pm 90^\circ$ im Falle der Doppeldomäne verdreht. Die Bildung von Zwillingsdomänen ist ein allgemeines Problem von $\{111\}$ orientierten $CdTe$ Schichten. Zwillings- und Doppeldomänen treten simultan auf, wenn zum Beispiel die Symmetrie der Oberfläche von der des Substrates abweicht, also im Fall von $CdTe(111)$ auf $Si(100)$ [Che95, Sch99].

Noch ein weiteres Wachstumsverfahren $\{111\}$ orientierter $CdTe$ Schichten ist bekannt [Pei98]. Bei diesem Verfahren wird eine dünne Schicht mittels Molekularstrahlverfahren auf ein gleichfalls $\{111\}$ orientiertes Si Substrat gewachsen. Die entstehende Schicht ist aufgrund der großen Gitterfehlpassung und des auftretenden dreidimensionalen Wachstumsmodus in vielen

¹³ Unter Berücksichtigung, dass sich bei kompressiv verspannten Schichten die Linienrichtungen wie Gleitsysteme im Verhältnis zu den an Eindrucksversuchen ermittelten Richtungen invertieren.

Fällen polykristallin [Set00]. Darüber hinaus neigt die *Cd* terminierte Oberfläche im Gegensatz zur *Te* terminierten Oberfläche stark zur Einlagerung von Vakanzen. Dies führt dazu, dass *CdTe* Schichten in $(111)\bar{A}$ Orientierung als Substratmaterial für ein weiteres heteroepitaktisches Wachstum ungeeignet sind. Zur strukturellen Optimierung von auf *Si*(111) Substraten gewachsenen Schichten wurde im Rahmen einer Diplomarbeit mit unterschiedlichen Variationen der Wachstumsparameter experimentiert [Sch99a]. Unter anderem wurde nach der durchgehend gleichen Vorbehandlung der *Si* Substrate (nasschemische Reinigung der Oberfläche und Entfernung der natürlichen Oxidschicht) die Passivierung der Siliziumoberfläche durch Aufbringen einer Monolage Arsen ausprobiert. Das hauptsächliche Ergebnis der Passivierung der *Si* Substratoberfläche mit Elementen aus der VI Hauptgruppe ist, dass die *CdTe* Schicht definiert in \bar{B} Orientierung aufwächst. Zurückzuführen ist dies auf die Tatsache, dass die *As* (oder *N*) Oberflächenatome vollständig elektronisch abgesättigt sind [Olm86]. Die verbleibenden Bindungskräfte zwischen der anschließend aufwachsenden II-VI Schicht und der passivierten Oberfläche sind hauptsächlich ionischer Natur. Es wurde von Wachstumsbeginn an ein zweidimensionales Lagenwachstum beobachtet [Sch99a]. Das Wachstum beginnt mit Atomen aus der II. Hauptgruppe des Periodensystems und die Oberfläche der entstehenden Schicht ist aus Stöchiometriegründen \bar{B} terminiert.

Das verbleibende, aus technologischer Sicht interessante Phänomen ist die Bildung von Zwillingsdomänen, welches Gegenstand der durchgeführten Untersuchungen ist. Bisher wurde vermutet, dass die Bildung von Zwillingen in $(111)\bar{B}$ orientierten II-VI Heteroepitaxiestrukturen spontan in der Schicht geschieht [Dur97]. Ein Zusammenhang mit der Rekonstruktion der $(111)\bar{B}$ Oberfläche wurde hierfür als Ursache angenommen [See94]. Bekannt von den Schichten auf *Si*(001) Substrat war, dass Zwillingsdomänen durch Brechung der Oberflächensymmetrie der Substrate wirkungsvoll unterdrückt werden können [Che95]. Dies wurde ebenfalls durch Röntgendiffraktometrie(XRD)-Untersuchungen an Probenexemplaren der hier untersuchten *CdTe*(111)/*Si*(111):*As* Schichten gefunden [Sch99b]. Daher wurde als alternatives Modell die Entstehung von Zwillingen an Stufen der Substratoberfläche vorgeschlagen [Sch99].

In Abbildung 6.2.2a und 6.2.2b sind panchromatische KL-Aufnahmen von jeweils 1.5 μm dicken *CdTe* Schichten dargestellt. Das Substrat der in Abbildung 6.2.2a gezeigten Schicht ist bezüglich einer $\langle 110 \rangle$ Richtung um 0° , das Substrat der in Abbildung 6.2.2b gezeigten Schicht um 3° bezüglich einer $\langle 110 \rangle$ Richtung fehlorientiert. Die Fehlorientierung führt zu einer Erhöhung der Stufendichte auf der Substratoberfläche. Die Linienrichtungen dieser Stufen verlaufen entlang einer $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ Richtung. Eine atomistische Betrachtung des Problems ergibt, dass auf einer $\{111\}$ Silizium-Substratoberfläche zwei verschiedene Stufentypen mit einer unterschiedlichen Anzahl freier Bindungen existieren. So genannte (111)-artige Stufen besitzen pro Atom ein freies atomares Orbital, (100)-artige Stufen zwei freie Orbitale pro Atom. Es wird jedoch vermutet, dass diese unterschiedlichen atomistischen Konfigurationen eine ebenfalls unterschiedliche Bildungsenergie besitzen, so dass die eine bei Wachstumstemperaturen bevorzugt entsteht [Sch99a, Sch99b].

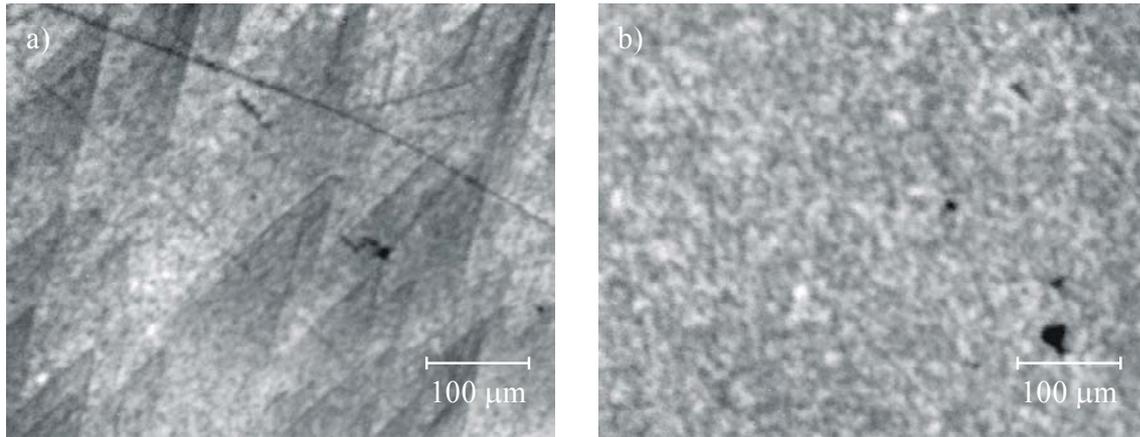


Abbildung 6.2.1a : Panchromatische KL-Abbildung der Oberfläche einer 1.5 μm dicken $\text{CdTe}(111)$ Epitaxieschicht auf $\text{Si}(111):\text{As}$ Substrat, mit 0° Substratverkipfung bezüglich einer $\langle 110 \rangle$ Richtung.

Abbildung 6.2.1b : Panchromatische KL-Abbildung der Oberfläche einer 1.5 μm dicken $\text{CdTe}(111)$ Epitaxieschicht auf $\text{Si}(111):\text{As}$ Substrat, mit einer um 3° von der (111) Oberflächennormalen abweichenden Substratverkipfung bezüglich einer $\langle 110 \rangle$ Richtung, bei gleichem niedrigen Vergrößerungsfaktor.

In Abbildung 6.2.1a, der panchromatischen KL-Aufnahme der leicht verkratzten Probenoberfläche der CdTe Schicht, die auf quasi unverkipptem Substrat aufgewachsen ist, werden ausgedehnte dunkle dreieckige Kontraste festgestellt. Es fällt auf, dass der Kontrastwert in Richtung der Spitze zunimmt, während die ca. über 100 μm lateral ausgedehnte Basis der Dreiecke im Kontrast nicht zu erkennen ist. Die spezifischen dreieckigen KL-Dunkelkontraste sind homogen über die ganze Oberfläche verteilt. Es werden ebenfalls überlappende Bereiche im KL-Kontrast aufgelöst. Des Weiteren sind den ausgedehnten dreieckigen Kontrasten auf einer um zwei Zehnerpotenzen kleineren lateralen Skala Fluktuationen der panchromatischen Intensität überlagert.

In Abbildung 6.2.1b, der panchromatischen KL-Aufnahme der CdTe Schicht, die auf 3° verkipptem Substrat aufgewachsen ist, fehlen die spezifischen dreieckigen Dunkelkontraste vollständig. Die Aufnahme zeichnet sich nur durch homogen verteilte Fluktuationen der Intensität aus. Die mittlere Halbwertsbreite der Fluktuationen im Kontrast liegt bei etwa 1 μm .

Da stark davon auszugehen ist, dass die Dunkelkontraste mit den Zwillingsdomänen in Zusammenhang stehen, sind an diesen Proben TEM-Untersuchungen in Querschnittspräparation durchgeführt worden. Die Ergebnisse dieser Untersuchung sind in den Abbildungen 6.2.2a und 6.2.2b festgehalten.

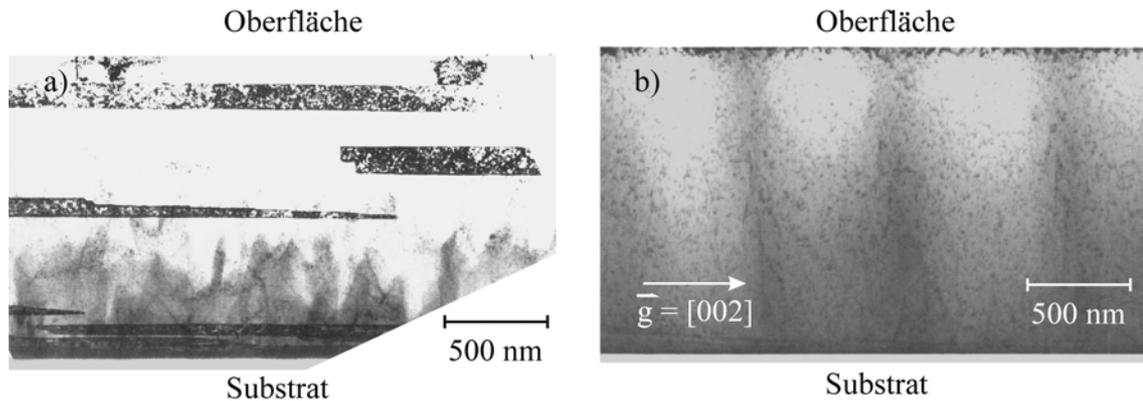


Abbildung 6.2.2a : TEM-Aufnahme einer Querschnitt-Präparation der Probe mit 0° Substratverkipfung. In der Schicht befinden sich ausgedehnte Zwillingslamellen.

Abbildung 6.2.2b : TEM-Aufnahme einer Querschnitt-Präparation der Probe mit 3° Substratverkipfung. Die Zwillingslamellen in der Schicht fehlen vollständig.

In Abbildung 6.2.2a ist eine TEM-Aufnahme des Querschnitts der *CdTe* Schicht auf unverkipptem *Si(111):As* Substrat gezeigt. Man sieht deutlich, dass hier in der gesamten Schicht ausgedehnte lamellenartige Domänen scheinbar parallel zur Probenoberfläche entstanden sind. Versetzungen sind keine zu beobachten, das bedeutet, die Versetzungsdichte liegt bei rund 10^6cm^{-2} , ein angesichts der extrem großen Fehlanpassung sehr niedriger Wert. Nahe dem hell abgebildeten Substrat ist bei genauer Betrachtung ein dunkler Streifen zu erkennen. Beide *CdTe* Schichten wurden auf eine 60 Monolagen dicke *BeTe* Pufferschicht aufgewachsen. Das Aufwachsen von *BeTe* Pufferlagen geschah vor dem Hintergrund, die Einflüsse des Substrates auf die mechanischen Eigenschaften der Schicht zu erforschen. *BeTe* besitzt im Vergleich zu *Si* eine größere Steifigkeit. Ebenso wie in den XRD-Untersuchungen zeigte es sich jedoch auch in den durchgeführten KL- und TEM-Untersuchungen, dass eine eventuell vorhandene Pufferschicht nicht der entscheidende Faktor für die wirksame Unterdrückung von Zwillingslamellen ist. Es wurde hingegen festgestellt, dass die Bildung von Zwillingen nahezu unabhängig von einer vorher auf dem Substrat abgeschiedenen Pufferschicht stattfindet.

Im Gegensatz dazu sind in Abbildung 6.2.2b der Querschnitts – TEM-Aufnahme von der auf 3° verkipptem *Si(111):As* Substrat gewachsenen Schicht weder Zwillingslamellen noch Versetzungen zu erkennen. In den Aufnahmen sind jedoch zahlreiche Kontrastfluktuationen festzustellen, die in Abhängigkeit von den Beugungsbedingungen abgebildet werden können.

In den TEM-Untersuchungen sind derartige Kontrastfluktuationen in allen Proben, unabhängig von der Substratverkipfung, gefunden worden [Rich99]. Als Ursprung dieser Kontraste sind vermutlich Segregationen beziehungsweise Fluktuationen der lokalen Elementverteilung verantwortlich. Im Vergleich zu den KL-Aufnahmen ist deren Dichte in den TEM-Aufnahmen wesentlich höher, trotzdem besitzen die Kontraste höchstwahrscheinlich denselben Ursprung, da in den TEM-Aufnahmen keine Versetzungen nachgewiesen wurden. Es wird vermutet, dass in den KL-Abbildungen die Verteilung der Ausscheidungen auf einer größeren lateralen Skala abgebildet wird. Alle Schichten sind nach Angabe des Herstellers unter *Cd* reichen Bedingungen gewachsen [Sch99c].

Die bereits oben erwähnten XRD-Untersuchungen, die der Herstellung der Schichten folgten, bescheinigen der in Abbildung 6.2.2b vorgestellten Schicht eine sehr hohe kristalline Qualität. Der prozentuale Volumenanteil an Zwillingsdomänen liegt in Proben dieser Schicht bei 1.5%, dem kleinsten bisher erreichten Wert. Der Zwillingsanteil in Proben der in Abbildung 6.2.2a gezeigten Schicht liegt bei ungefähr 12% [Sch99d].

Eine genaue TEM-Analyse des Bereiches der Grenzfläche des Heteroepitaxiesystems $CdTe(111)/Si(111):As$ zeigt Abbildung 6.2.3. Dargestellt sind die Untersuchungsergebnisse an einer Probe, bei der die Schicht direkt, ohne $BeTe$ Puffer, auf um 3° verkipptem Si Substrat aufgewachsen ist.

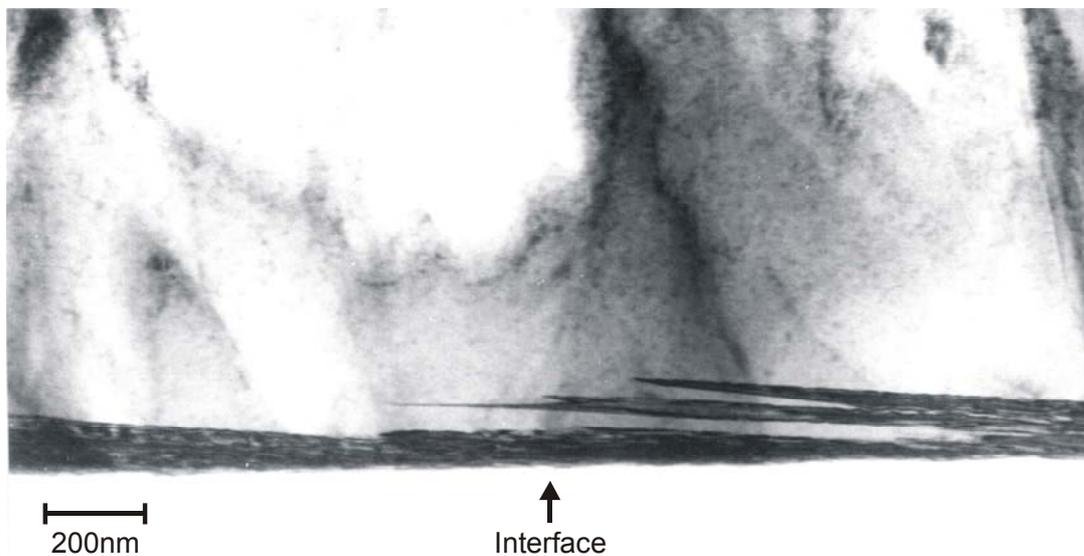


Abbildung 6.2.3 : TEM-Aufnahme einer Querschnitt-Präparation einer Probe mit 3° Substratverkipfung und ohne $BeTe$ Puffer. Die Zwillingsdomänen begrenzen sich auf den Bereich nahe der Grenzfläche zum Substrat. Der Neigungswinkel der Lamellen entspricht in etwa der Substratverkipfung.

Aus der Abbildung 6.2.3 geht hervor, dass sich bei einer Substratverkipfung die Zwillingslamellen auf einen Bereich nahe der Grenzfläche zum Substrat beschränken. Sie besitzen hier eine wesentlich kleinere Ausdehnung und liegen in einer größeren Dichte vor als in der unverkippten Schicht. Der Neigungswinkel der Lamellen ist ungefähr gleich dem Verkipfungswinkel des Substrates. Dieses Resultat ist ein direkter experimenteller Nachweis für die Entstehung der Zwillingslamellen an Stufen der Substratoberfläche.

Mit diesem Befund lässt sich ebenfalls der spezifische KL-Kontrast der dreieckigen Strukturen in Abbildung 6.2.1a erklären :

Die in den KL-Aufnahmen nicht zu erkennende Basis der dreieckigen Kontraste beginnt an $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ parallelen Stufen an der Grenzfläche zum Substrat, sie liegt in $1.5\mu\text{m}$ relativer Schichttiefe in Bezug auf die Probenoberfläche. Die wesentlich schärfer abgebildeten Spitzen der Dreiecke befinden sich unterhalb der Probenoberfläche. Die Anregungsbedingungen bei dem in Abbildung 6.2.1a (bzw. Abb. 6.2.1b) dargestellten KL-Mikrographen waren $U_b = 10\text{kV}$ und $I_s = 1.5\text{nA}$. Aufgrund der verhältnismäßig moderaten Beschleunigungsspannung und der größeren

mittleren Ordnungszahl von *CdTe* ($OZ=50$) im Vergleich zu *ZnSe* ($OZ=32$) liegt das Maximum der Tiefengenerationsverteilung der Ladungsträger in der *CdTe* Epitaxieschicht nur wenige 100 Nanometer unterhalb der Probenoberfläche. Oberflächennahe Defektstrukturen werden durch die Elektronensonde im KL-Kontrast wesentlich deutlicher abgebildet, als diejenigen in Schichtbereichen nahe der Grenzfläche zum Substrat (→ KAPITEL 5).

Der gefundene Sachverhalt, dargestellt in Form einer Kurzzusammenfassung:

- Die plastische Relaxation von (111) gewachsenen *CdTe* Epitaxieschichten erfolgt vorzugsweise über die Bildung von ausgedehnten Zwillingslamellen und nicht über Versetzungen.
- Die Bildung der Zwillingslamellen erfolgt an Stufen an der Grenzfläche zum Substrat. Die wesentlich höhere Stufendichte auf einer verkippten *Si*(111) Substratoberfläche führt einerseits zu einer größeren Dichte der Domänen im Bereich der Heterogrenzfläche, andererseits zu einer kleineren Strukturgröße und weiterhin zu einem wesentlich schnelleren Auswachsen mit der Schichtdicke. Die Ergebnisse konnten zum ersten Mal die Wirkungsweise einer gezielten Verkipfung des Substrates, in der Literatur referiert als ISA (ISA = Interface Step Alignment), als effektive Maßnahme zur Reduktion von Zwillingsdomänen erklären.

7 ELEKTRONISCHE UND STRUKTURELLE EIGENSCHAFTEN VON α -VERSETZUNGEN IN II-VI HALBLEITERSCHICHTEN

Die elektronische Wirksamkeit von Versetzungen ist sehr stark von ihrer Kernstruktur und der Wechselwirkung mit Punktdefekten des Wirtsgitters abhängig. Die Schwierigkeit dabei ist, zwischen den intrinsischen und den extrinsischen Eigenschaften zu unterscheiden. Dieses Kapitel beschäftigt sich damit, detaillierte Einsichten über die elektronische Wirksamkeit eines ausgezeichneten optisch aktiven Versetzungstyps zu gewinnen. Spektroskopische Methoden erlauben es hierbei zerstörungsfrei strukturelle Eigenschaften abzuleiten.

Zunächst wird auf eine neuartige lumineszenzspektroskopische Methode zur Strukturanalyse von Defekten mit ausgezeichneter Symmetrie eingegangen. Am Beispiel der α -Versetzung in ZnSe wird gezeigt, dass hierdurch detaillierte Aussagen zur elektronischen Wirksamkeit möglich sind [7]. Die Untersuchungsergebnisse lassen auf einen im weitreichenden Verzerrungsfeld der α -Versetzung lokalisierten exzitonischen Zustand schließen. Dieser Zustand besitzt niederdimensionalen Quantencharakter [4].

Nach einer detaillierten Untersuchung der versetzungsgebundenen Y-Lumineszenz im ersten Abschnitt des Kapitels werden im zweiten Teil Merkmale dieser Lumineszenz vorgestellt, die eindeutig der Defektstruktur zuzuordnen sind. Es können Aussagen getroffen werden sowohl zur geometrischen Lage des Defekts im Kristall als auch zur konkreten Kernstruktur von Einzeldefekten. Es wird ein Modell zur Entstehung von Versetzungsbündeln in dünnen II-VI Heteroepitaxiestrukturen vorgeschlagen [1].

7.1 Optische und elektronische Eigenschaften von α -Versetzungen

Wie bereits im KAPITEL 3 vorgestellt, ist es möglich, durch die lineare Polarisation der Lumineszenz von ZnSe Schichten vertikale Verspannungsgradienten zu identifizieren. Es war eine wesentliche Aufgabe dieser Arbeit herauszustellen, dass es möglich ist, durch ortsaufgelöste Lumineszenzverfahren laterale Verspannungsgradienten aufzulösen und diese mit Einzeldefekten zu korrelieren. In diesem Abschnitt wird die Wechselwirkung von Ladungsträgern mit 60° - α -Versetzungen untersucht. Hierbei wird mit einer Diskussion der linearen Polarisation der Versetzungslumineszenz begonnen. Anschließend werden die genauen Mechanismen diskutiert, die zu einer strahlenden Rekombination von Ladungsträgern an α -Versetzungen führen.

7.1.1 Optische Charakterisierung von Versetzungen

Aufbauend auf den ersten spektroskopischen Untersuchungen der D-Lumineszenzlinien an Silizium und Germanium, entwickelte GÜTH [Güt72] bereits 1972 im Rahmen eines „tight binding“-Ansatzes ein Modell für strahlende Rekombination von Ladungsträgern an Versetzungen. Er ging darin von stark lokalisierten Lochzuständen im zugverspannten Bereich nahe dem Versetzungskern aus. Dazu betrachtete er auf atomarer Skala die Bindungen der ersten

Atomreihe die den Kern einer Stufenversetzung bilden. Unter der Annahme, dass diese stark in Richtung des Burgersvektors verzerrten Bindungen eine lineare Kette bilden, leitete er einerseits innerhalb der Bandlücke ein Energieniveau für Löcher und andererseits eine lineare Polarisation des damit verbundenen optischen Übergangs ab. Die Vorzugsrichtung in der Polarisation des optischen Übergangs wird in diesem Modell durch die räumliche Orientierung der Atombindungen in der Kette vorgegeben. Sie liegt in Richtung der größten Verzerrung, also parallel zum Burgersvektor \vec{b} .

Durch spektroskopische und strukturelle Untersuchungen an makroskopisch plastisch deformierten *Si* Volumenkristallen werden für die Versetzungslumineszenz relativ niedrige Polarisationsgrade zwischen 20 und 30 Prozent gefunden [Ste93, Web94]. Bei einer makroskopischen plastischen Deformation liegen die verschiedenen Versetzungstypen in unterschiedlichen Linienrichtungen vor. Trotz der Tatsache, dass die plastische Deformation entlang ausgezeichneter kristallographischer Richtungen durchgeführt wird, ist bisher keine eindeutige Bestimmung des optisch aktiven Versetzungstyps und eine Zuordnung des Polarisationsvektors zu den Versetzungsparametern \vec{s} oder \vec{b} gelungen.

Eine ähnliches Modell zur Erklärung strahlender Rekombinationen von Ladungsträgern legten GRÖHLICH und TEICHLER [Grö86, Teich85] für Versetzungen in *CdTe* zugrunde. Sie errechneten numerisch mittels „tight binding“-Methode, unter der Prämisse eines nicht rekonstruierten Versetzungskerns, (\rightarrow KAPITEL 4) für lokalisierte Elektronen- und Lochzustände Energieniveaus innerhalb der Bandlücke. Unter der in Verbindungshalbleitern zwingend notwendigen Berücksichtigung der Polarität des Versetzungskerns [Abr72, Pet80, Osi86] ermittelten sie Energien für die 30°- und 90°- α -Partialversetzungen zwischen 0.1eV und 0.4eV oberhalb des Valenzbandes und für die 30°- und 90°- β -Partialversetzungen entsprechend 0.4eV bis 0.65eV unterhalb des Leitungsbandes. Auf eine mögliche Polarisation der optischen Übergänge wurde nicht eingegangen.

Legt man dieses Modell jedoch tatsächlich für die Y-Lumineszenz zugrunde, wäre eine Vorzugsrichtung der Polarisation des optischen Übergangs senkrecht zur Versetzungslinie zu erwarten, weil der lokalisierte Dipolübergang an raumfest orientierten, atomaren Orbitalen stattfindet (vgl. Abb. 4.1.4). In der bereits untersuchten *CdTe* Epitaxieschicht kann zwar die lineare Polarisation der Y-Lumineszenz durch die anisotrope Spannungsrelaxation der Schicht der Versetzungslinienrichtung zugeordnet werden. Leider ist hier jedoch wegen der hohen Fehlanpassung keine weitreichende Ordnung der Versetzungskonfiguration festzustellen. In den folgenden Abbildungen 7.1.1a und 7.1.1b sind daher die kombinierten Ergebnisse der KL- und PL-Messungen an der 165nm dicken *ZnSe* Schicht zusammengestellt :

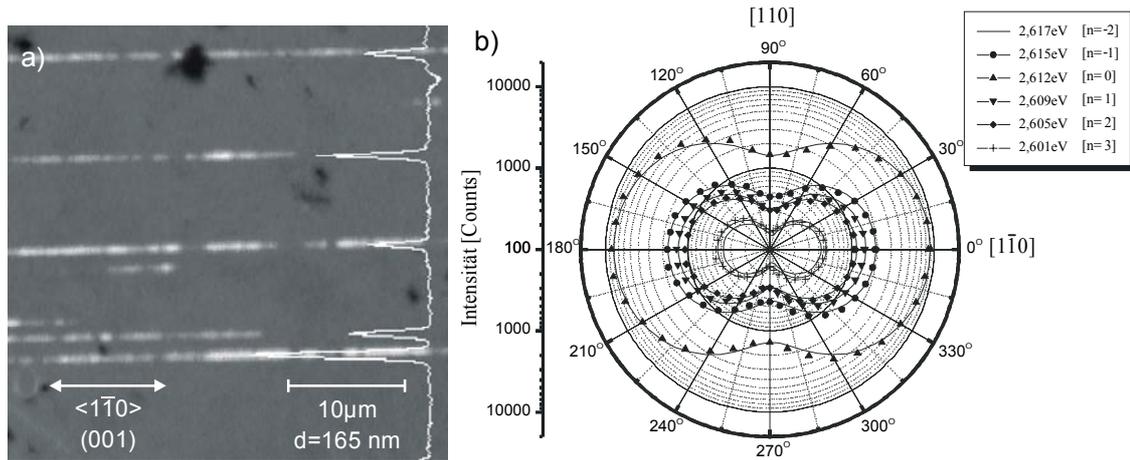


Abbildung 7.1.1a: Panchromatische Kathodolumineszenzaufnahme der 165nm *ZnSe* Schicht, mit integrelem Linienscan über die Hellkontraste. Trotz der relativ hohen Messtemperatur von $T=72\text{K}$ besitzt der Defekt eine um über eine Größenordnung höhere Quanteneffizienz als die Lumineszenz der Kristallmatrix.

Abbildung 7.1.1b: Winkel-Indikatrix, nach IVCHENKO und PIKUS [Ivc97]. Intensität des optischen Übergangs ($T=1.6\text{K}$) bei verschiedenen Emissionsenergien in Abhängigkeit vom Winkel des elektrischen Feldvektors der Lumineszenz im Bezug zur Linienrichtung des Defekts, dargestellt in Polarkoordinaten (Punktsymbole). Anpassungen nach Gleichung 3.2.5 ergibt $\chi_{lh}=0.8$, $\chi_{hh}=0.6$ für alle Messreihen (geschlossene Linien).

Die Polarisation der Y-Lumineszenz parallel zur $[1\bar{1}0]$ Richtung in *ZnSe* Epitaxieschichten ist durch TEM-CL Untersuchungen bestätigt worden [Tad97]. In den polarisationsaufgelösten PL-Spektren ist die Orientierung der Hellkontraste bezüglich der Probenkanten bekannt. Da die Polarisierungseffekte in der Probe mit 165nm Lagendicke am besten ausgeprägt sind und eine hinreichende Versetzungsdichte vorhanden ist, wurden die meisten der in diesem Kapitel beschriebenen Untersuchungen an dieser Probe durchgeführt. In dieser *ZnSe* Probe liegt das Hauptmaximum der Lumineszenz, bezeichnet mit Y_0 , im konventionellen Photolumineszenzspektrum bei einer Energie von 2.612eV. Die stark polarisierte Defektemission stammt ausschließlich von den hellen KL-Linienkontrasten, die deutliche Fluktuationen der Intensität längs der Kontraste aufweisen (Abb. 7.1.1a). Bezüglich der Vorzugsrichtung der Polarisation parallel zur Linienrichtung des Defekts (s. Abb. 7.1.1b) bietet sich ein Vergleich mit den optischen Eigenschaften von künstlich geschaffenen eindimensionalen Systemen, den „Quanten-Drähten“, an. Hier liegt die Vorzugsrichtung der Polarisation in Lumineszenzspektren ebenfalls parallel zur ausgezeichneten Achse des Potentials [Lom98]. Eine Polarisation des optischen Übergangs parallel zum Burgersvektor ist im Rahmen der für II-VI Halbleiter anwendbaren *k-p*-Methode der Bandstrukturberechnung (\rightarrow KAPITEL 2) nur für *hh*-artige Übergänge des Wirtsgitters zu erwarten. Dies legt die Vermutung nahe, dass der Y-Lumineszenz ein exzitonischer, hauptsächlich *lh*-artiger Übergang zugrunde liegt.

Ein Modell für ein Versetzungsexziton (DEX = Dislocation Exciton) wurde von REBANE und SHRETER [Reb91] in Zusammenarbeit mit STEEDS [Ste91] im Jahr 1991 für die II-VI Halbleiter vorgeschlagen. In deren Ansatz wird im Rahmen der *k-p*-Methode das kontinuumsmechanische Verzerrungsfeld der Versetzung als bindend für Ladungsträger angesehen. Im Rahmen dieses Ansatzes wurde die Beeinflussung eines Exzitons durch das Deformationspotential einer

vollständigen Schraubenversetzung [Reb93a] als auch einer Versetzung mit einem Stufenanteil des Burgersvektors abgeleitet. [Shr93, Shr96]. Im Folgenden muss daher die Frage beantwortet werden, welcher Versetzungstyp aus dem Spektrum der Gleitversetzungen für die Y-Lumineszenz verantwortlich zu machen ist. Diese Argumente sind entscheidend :

Aus den Experimenten der Nanoindentierung (→ KAPITEL 6) folgt bereits, dass die polare 60° - α -Versetzung mit hoher Wahrscheinlichkeit in Frage kommt, und dass der elektrisch neutrale Stapelfehler ausgeschlossen wird. Eine 60° -Versetzung ist in eine 90° - und eine 30° -Partialversetzung dissoziiert. Beide dieser Versetzungstypen sind unterschiedliche Mischformen von vollständigen Schrauben- und vollständigen Stufenversetzungen.

Eine detaillierte Symmetrieanalyse¹⁴ des kontinuumsmechanischen Verzerrungsfeldes einer Schraubenversetzung ergibt, dass dieses nur eine Γ_5 -Symmetrie besitzt und daher ausschließlich mit dem Drehimpuls der Löcher im Γ_8 -Band koppelt. Das Verzerrungsfeld einer Schraubenversetzung stellt jedoch für beide Ladungsträgertypen kein weitreichendes attraktives Potential dar. Nach KAWAMURA [Kaw78] existiert bei einer vollständigen Schraubenversetzung nur eine lokale Interaktion zwischen den halbzahligen Drehimpulsen der hh/lh -Komponenten und der Versetzungslinie (Singularität im Kontinuum).

Bei einer Versetzung mit Stufenanteil des Burgersvektors kommen zur Γ_5 -Symmetrie der Schraubenversetzung noch die Γ_1 - und die Γ_3 -Symmetrie des Deformationstensors der Stufenversetzung hinzu. Weitreichende, tensil deformierte Bereiche im Verzerrungsfeld eines solchen gemischten Versetzungstyps sollten sowohl für Elektronen als auch für Löcher ausgedehnte attraktive Potentiale darstellen. Diese könnten dann im Nahbereich der Versetzung möglicherweise zu lokalisierten eindimensionalen Zuständen führen. Die Bindungsenergie des Exzitons wäre im Wesentlichen durch die hydrostatische Symmetriekomponente einer gemischten Versetzung beeinflusst.

Im KAPITEL 6 wurde bereits ortsunabhängig die plastische Relaxation in Abhängigkeit von der Schichtdicke durch Ausnutzen der Polarisierung der Matrixlumineszenz charakterisiert. Nach dem Erfolg der dort vorgestellten Methode ist es nun ein konsequenter Schritt, den verantwortlichen Defekt selbst durch seine unmittelbar lokale Wirkung auf das Wirtsgitter zu charakterisieren. Wie bereits analytisch demonstriert, ist die mit dem Stufenanteil einer Versetzung projiziert auf die Grenzfläche verbundene Verzerrung in Größe und Richtung durch die energetische Lage und den Polarisationsgrad der Schwerlochkomponente des freien Exzitons in Lumineszenzspektren erfassbar (→ KAPITEL 6, Abschnitt 6.1.3.1).

Mikroskopische Inhomogenitäten oder gar dynamische Fluktuationen der Gitterverzerrung müssen zuverlässig durch eine ortsabhängige Registrierung der polarisationsabhängigen Intensitäten der hh -Komponente des Exzitons und Berechnung des DLP abzubilden sein. Dies muss selbst für einzelne Versetzungen zutreffen.

Im Bereich knapp oberhalb der kritischen Schichtdicke, bei der $ZnSe$ Probe mit 165nm Schichtdicke, ist die anisotrope α -Versetzungsdichte hinreichend, um mit der Auflösung eines optischen Mikroskops erfasst zu werden. In Abbildungen 7.1.2 bis 7.1.3a und 7.1.3b ist das

¹⁴ Analyse der Symmetrie der Deformationstensoren für verschiedene Versetzungstypen im ANHANG A1.

Ergebnis eines PL-Linienscans über einige der in den KL-Abbildungen aufgelösten Defekthellkontraste zu sehen. Dargestellt ist in Abbildung 7.1.2 das Prinzip der mikropolarisationsaufgelösten Photolumineszenz (μ -pol-PL). Hierbei werden wie bei der Mikrospektroskopie über einem lateralen Scanbereich Lumineszenzspektren aufgenommen. Jedoch wurde im Gegensatz zur herkömmlichen Methode der Scan mit Hilfe einer Polarisationsoptik und mehrmals durchgeführt. Aufgetragen ist die Lumineszenzintensität als Funktion des Ortes und der Energie im Bereich der Y-Linie für zwei Polarisationsrichtungen.

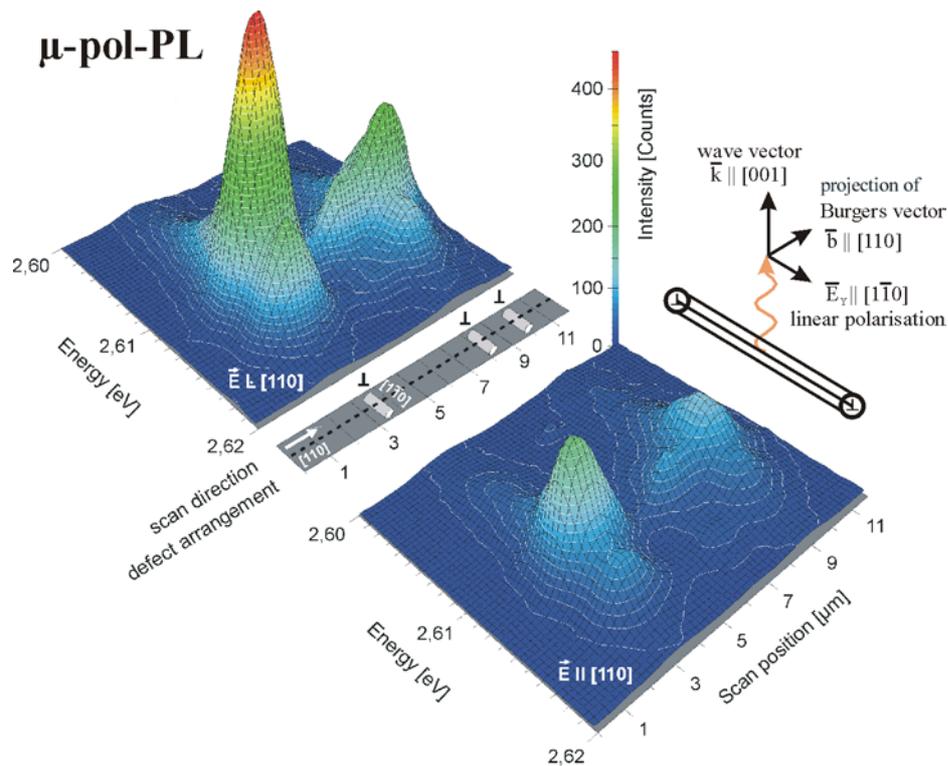


Abbildung 7.1.2: Dreidimensionale Darstellung eines Linienscans, senkrecht und über einige Versetzungskontraste. Dargestellt ist die laterale und spektrale Verteilung der Intensität $I \parallel [1\bar{1}0]$ und $I \perp [1\bar{1}0]$ der Polarisation des Hauptmaximums der Y-Linie.

Entlang eines Scanpfades der Länge von $11,5\mu\text{m}$ sind für beide Polarisationsrichtungen der Y-Linie deutlich drei verschiedene Defektkontraste zu erkennen, die sich jeweils auf einen Bereich ΔX mit etwa $(2,5 \pm 0,5)\mu\text{m}$ Halbwertsbreite beschränken. Man sieht ebenfalls, dass die polarisationsabhängig aufgenommene Intensität der Y-Linie mit Feldvektor $\vec{E} \perp [110]$, also parallel zu den KL-Defektkontrasten, deutlich erhöht ist. Spektral gesehen wirkt das Intensitätsabbild bis auf eine höherenergetische Schulter vor dem Hauptmaximum Y_0 dagegen relativ strukturlos.

Zur Durchführung dieses Experiments wurde die Probe auf einem Kryostatentisch in einem speziellen He Durchflusskryostaten montiert [Ram97]. Dabei wurde sowohl der anregende Laserstrahl als auch die Lumineszenz durch ein Mikroskop-Objektiv geführt. Das gesammelte Lumineszenzlicht wurde bei einem mehrmaligen Scan, jeweils zwei Mal für die Versetzungs- und die Kristallmatrixemission, über die angegebenen Ortskoordinaten polarisationsaufgelöst detektiert. Die Abweichung in der Winkellage des Scans vom Lot $\perp [1\bar{1}0]$ zur Versetzungs-

linienrichtung \bar{s} kann mit der zu Vergleichszwecken durchgeführten Messung, dargestellt in Form einer Winkel-Indikatrix (Abb. 7.1.1b), mit etwa 15° abgeschätzt werden.

In Abbildung 7.1.3a ist nun aus einem Detailausschnitt des Intensitätsabbildes (Abb. 7.1.2) für das am stärksten ausgeprägte Kontrastprofil der Polarisationsgrad DLP der Y-Lumineszenz als Funktion der Energie extrahiert und dargestellt. Lateral korreliert dazu ist in Abbildung 7.1.3b der DLP im Spektralbereich der Lumineszenz freier und an Punktdefekten gebundener Exzitonen gezeigt.

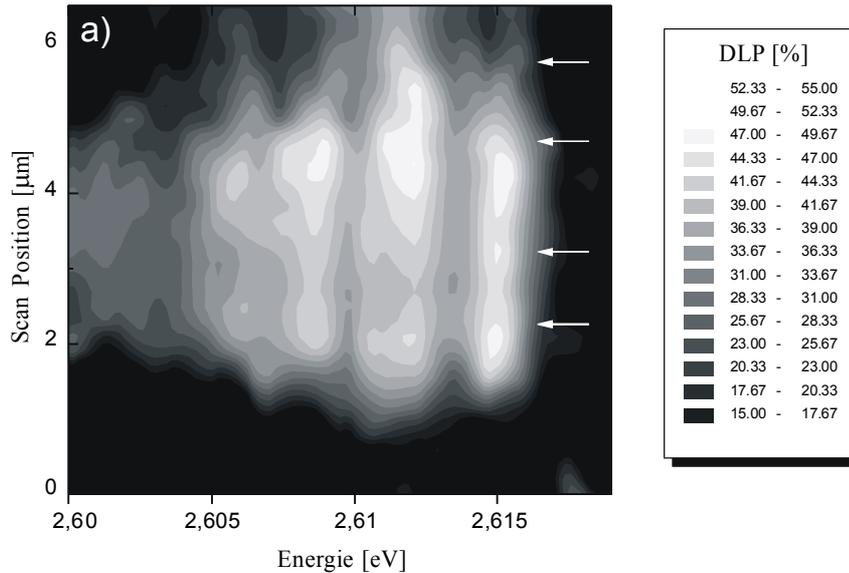


Abbildung 7.1.3a: Polarisationsabbildung der Y-Lumineszenz senkrecht zum Defekt. Detailausschnitt aus der dreidimensionalen Darstellung der Intensität aus Abbildung 7.1.2 mit größerer lateraler und spektraler Auflösung. Hier ist der DLP der dort gezeigten Spektren als Funktion der Scanposition und der Energie dargestellt.

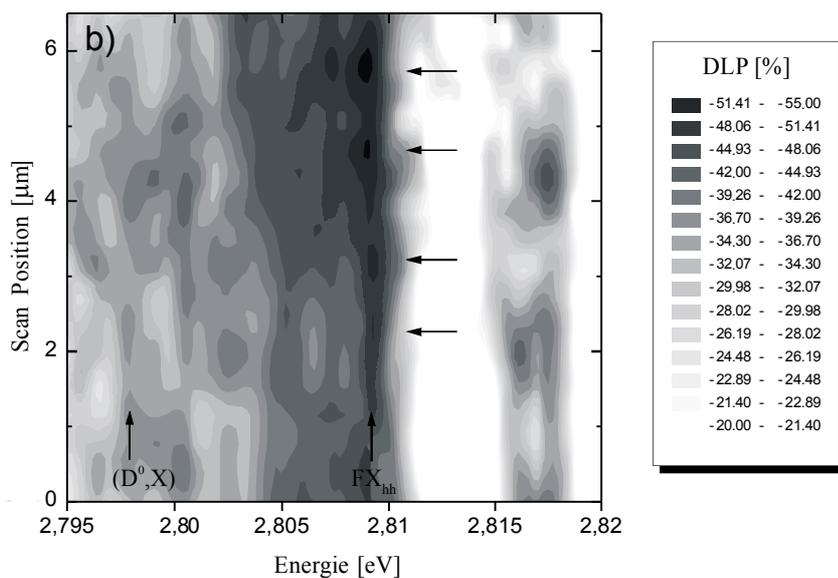


Abbildung 7.1.3b: Polarisationsabbildung der Lumineszenz des Wirtsgitters. Gleicher lateraler Abbildungsbereich wie oben, jedoch spektrale Verteilung des DLP der Lumineszenz der Kristallmatrix im Bereich freier und an Punktdefekten gebundener Exzitonen.

Wie schon bei der *CdTe* Probe zu beobachten, ist die Y-Lumineszenz in *ZnSe* senkrecht zur Lumineszenz des Wirtsgitters polarisiert, ersichtlich an den unterschiedlichen Vorzeichen des *DLP*. Als Folge davon zeigt die Y-Lumineszenz im Gegensatz zur Lumineszenz des Wirtsgitters in den Abbildungen ein invertiertes Verhalten.

Auf der Ortsskala ist zu erkennen, dass innerhalb eines Kontrastprofils der Y-Lumineszenz mehrere kleinere Defektprofile vorhanden sind. Diese sind durch weiße Pfeile markiert. Sie konnten im Intensitätsabbild nicht aufgelöst werden. Der für den Ladungsträgereinfang verantwortliche effektive Defektradius ist also kleiner als die Halbwertsbreite ΔX des Lumineszenzkontrastes.

Darüber hinaus zeigt diese Messung, dass im *DLP* eine spektrale Feinstruktur der Y-Linie abgebildet werden kann. Sie konnte vorher in den Spektren (Abb. 7.1.2) nicht beobachtet werden. Die spezifischen Subkomponenten der Y-Linie werden im Folgenden mit Y_0^n bezeichnet¹⁵. Die maximalen *DLP* Werte der Y-Lumineszenz treten an den Scanpositionen bei 2.2 μm , 3.1 μm , 4.7 μm und 5.7 μm auf. Genau an diesen Stellen besitzt der *DLP* der Matrixlumineszenz (Abb. 7.1.3b) für eine Wellenlänge des *hh* Übergangs (2.808eV) lokale Maxima (schwarze Markierungen). An diesen Stellen ist die *ZnSe* Schicht lokal relaxiert. Es können laterale Verspannungsgradienten beobachtet werden. Der $DLP \geq -0.55$ des *hh*-artigen Übergangs übersteigt die global für die Schicht ermittelten Werte um das Dreifache. Dieser Wert stimmt mit dem theoretisch berechneten Wert $DLP = -0.85$ für eine vollkommen uniaxial relaxierte *ZnSe* Schicht hinreichend gut überein.

Die hier vorgestellten Ergebnisse zur lateralen Verteilung des linearen Polarisationsgrades der Versetzungslumineszenz und der Rekombination des freien Exzitons erlauben es :

- Weitreichende Verzerrungsfelder von Versetzungen mit Stufenanteil des Burgersvektors auf einer lateralen Skala von $\Delta X \leq 0.5 \mu\text{m}$ durch ein spektroskopisches Verfahren darzustellen.
- Gebundene, eindimensionale exzitonische Zustände innerhalb dieser Verzerrungsfelder zu identifizieren,
- zu zeigen, dass das exzitonbindende Potential die Form ähnlich der eines Quantendrahtes besitzt, da die lineare Polarisation der Y-Lumineszenz parallel zur Versetzungslinie auftritt und somit
- die gebundenen Zustände intrinsisch flacher Natur sind. Das bedeutet, dass kein direkter Zusammenhang mit den atomaren Coreniveaus („central cell corrections“) besteht, wie sie durch Rekonstruktion oder Rekonstruktionsdefekte des Versetzungskerns oder Kinken verursacht werden könnten. Darüber hinaus kann eine Wechselwirkung der Ladungsträger mit versetzungsnahen Punktdefekten („Cottrellatmosphäre“) als Ursache der Y-Lumineszenz ausgeschlossen werden.

¹⁵ Die Untersuchung und Diskussion der Aufspaltung Y_0^n erfolgt im Abschnitt 7.2.2.

Die lineare Polarisation des optischen Übergangs parallel zur Defektachse erklärt sich analog zum dreidimensionalen Fall. Wie bereits im KAPITEL 6 diskutiert, führt ein Deformationstensor zu einer Mischung der $\hbar\mathbf{h}/\mathbf{l}h$ Lochwellenfunktionen. Der Unterschied ist nur, dass im Falle der Versetzung die Elemente ortsabhängig sind. Damit ist eine starke lineare Polarisation des Übergangs entlang der ausgezeichneten Achse des Potentials verbunden [Boc92, Mci95]. Dieser Effekt lässt weiterführende Interpretationen bezüglich der Orientierung der Versetzungen in den Epitaxieschichten zu und wird im Abschnitt 7.2.1 dieses Kapitels erneut aufgegriffen.

7.1.2 Wechselwirkung von Exzitonen mit α -Versetzungen

Durch Versetzungen induzierte eindimensionale Energieniveaus E_e und E_h und die zugehörigen, eindimensionalen effektiven Massen m_e und m_h der Ladungsträger wurden für *ZnSe* erstmals von REBANE und SHRETER berechnet [Reb91]. Erst in jüngster Zeit ist es FARVACQUE und FRANÇOIS gelungen, diese auch numerisch zu simulieren [Far99, Far01]. Man erhält sie durch eine simultane Diagonalisierung der entsprechenden Hamiltonoperatoren für das Leitungs- und Valenzband (\rightarrow KAPITEL 3) mit einem Verzerrungsfeld einer Versetzung als Störung des kristallperiodischen Potentials. In den eindimensionalen Potentials der Ladungsträger müssen nach den experimentellen Resultaten aus KAPITEL 6 sowohl das Verzerrungs-, das durch Verzerrungen induzierte piezoelektrische als auch das elektrostatische Feld der Versetzung eingesetzt werden. Piezoelektrische Felder spielen als Beitrag zur Gesamtenergie jedoch nur eine untergeordnete Rolle [Far99]. Für das elektrostatische Feld einer Stufenversetzung liegen in der Literatur bisher keine Abschätzungen vor. Es wird jedoch vermutet, dass die unterschiedliche Rekombinationswirksamkeit der α - und β -Versetzungen aus dem Ladungscharakter der polaren Gleitversetzungen hervorgeht.

Die Bindungsenergie eines Versetzungsexzitons im Verzerrungsfeld einer Stufenversetzung wurde von BOZHOKIN *et al.* [Boz82] angegeben:

$$E_{DEX} = (2\mu e^4)/(\epsilon^2 h^2) \cdot [\ln(r_{\parallel}/r_{\perp})]^2 \quad (7.1)$$

Hierbei ist μ die reduzierte Masse des DEX und ϵ die dielektrische Konstante. Für das Verhältnis der longitudinalen und transversalen effektiven Bohrradien in Bezug auf die Versetzungslinienrichtung gilt $\ln(r_{\parallel}/r_{\perp}) \approx 1$ [Shr96]. Werte für die effektiven Massen der eindimensionalen Ladungsträger sind $m_e=0.16m_0$ und $m_h=1.214m_0$ für *ZnSe* beziehungsweise $m_e=0.096m_0$ und $m_h=1.30m_0$ für *CdTe* in Einheiten der Elektronenruhemasse m_0 [Far99, Far01]. Mit diesen Werten lässt sich die Bindungsenergie des DEX in *ZnSe* zu 30.4meV und in *CdTe* zu 19.2meV errechnen ($M_{DEX}^{ZnSe} = 1.374m_0$, $M_{DEX}^{CdTe} = 1.396m_0$, $\mu_{DEX}^{ZnSe} = 0.141m_0$, $\mu_{DEX}^{CdTe} = 0.089m_0$). Der räumlich erhöhte Überlapp der Wellenfunktion im Bereich des niederdimensionalen Potentials vergrößert in jedem Fall die Bindungsenergie des DEX um einen Faktor ρ .

Dieser Effekt sollte sich durch eine temperaturabhängige PL-Messung nachweisen lassen. Bei einer Temperaturerhöhung des Systems steigt die Wahrscheinlichkeit einer inelastischen Exziton-Phonon-Streuung, die zu einer Dissoziation des Exzitons führt. Die anschließende thermisch aktivierte strahlungslose Rekombination der Ladungsträger lässt sich formal nach dem SRH-Modell aus KAPITEL 5 beschreiben. Die Intensität des Übergangs in einem Lumineszenzspektrum sinkt bei Temperaturerhöhung in zunehmendem Maße. Bei einer mittleren Temperatur des Gitters, die der Bindungsenergie des Exzitons im Grundzustand entspricht, ist keine Emission mehr zu registrieren. Die Bindungsenergie des Exzitons entspricht dann dem Schnittpunkt der extrapolierten Geraden durch die Messwerte für die Intensität mit der reziproken Temperaturskala. Die Ergebnisse der Untersuchungen für die Y-Lumineszenz an der 165nm dicken *ZnSe/GaAs(001)* und der bereits in KAPITEL 6 vorgestellten *CdTe/GaAs(001)* Epitaxieschicht sind in Abbildung 7.1.4a und 7.1.4b dargestellt.

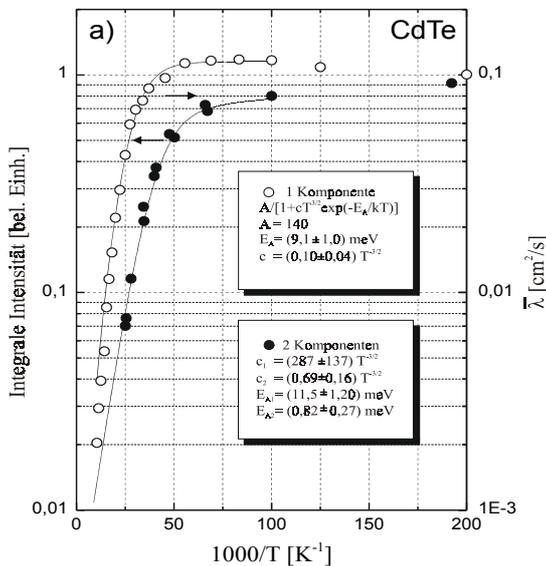


Abbildung 7.1.4a: Bestimmung der thermischen Aktivierungsenergie des DEX in *CdTe* aus temperaturabhängigen Lumineszenzuntersuchungen. Offene Symbole repräsentiert das Ergebnis der Untersuchungen von KL Kontrastprofilen, durchgeführt von HILDEBRAND [Hild98]. Geschlossene Symbole sind die Ergebnisse der eigenen Untersuchungen.

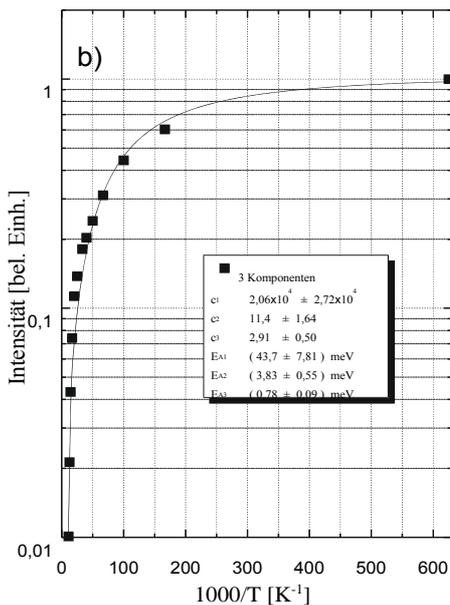


Abbildung 7.1.4b: Bestimmung der thermischen Aktivierungsenergie des DEX in *ZnSe* aus temperaturabhängigen Lumineszenzuntersuchungen. Aufgetragen ist die normierte Intensität des Hauptmaximums Y_0 über der reziproken Temperatur.

Aus einer Analyse der temperaturabhängigen Halbwertsbreiten der Kontraste in Kathodolumineszenzmessungen kann ebenfalls eine thermische Aktivierungsenergie bestimmt werden, die dem Versetzungssexziton zuzuordnen ist [Hild97]. In Abbildung 7.1.4a ist zum Vergleich das Ergebnis dieser Untersuchungen zusammen mit den eigenen Ergebnissen dargestellt. Es ist eine hervorragende Übereinstimmung mit dem aus Photolumineszenzmessungen ermittelten Wert der Bindungsenergie festzustellen. Für das für die Y-Lumineszenz in *CdTe* verantwortliche Versetzungssexziton wird eine mittlere Bindungsenergie von $(10.3 \pm 0.7)\text{meV}$ gefunden. Für das für die Hauptkomponente Y_0 in der *ZnSe* Epitaxieschicht verantwortliche DEX wird eine Bindungsenergie von $(43.7 \pm 7.8)\text{meV}$ gemessen (s. Abb. 7.1.4b).

Der in der Literatur von SHRETER *et al.* für *ZnSe* angegebene experimentell bestimmte Zahlenwert liegt bei 27meV [Shr96]. Für *CdTe* konnten in der Literatur bisher keine Werte für die thermische Aktivierungsenergie des DEX gefunden werden. Dass die Theorie die Messwerte nur relativ ungenau reproduziert, liegt wahrscheinlich in der nur unzureichenden Näherung der eindimensionalen Versetzungspotentiale von FARVACQUE *et al.*. Bisher wurde in den numerischen Simulationen das elektrostatische Feld der Stufenversetzung vernachlässigt. Somit sind die effektiven Massen der eindimensionalen Ladungsträger nur unzureichend genau bekannt.

Im Zusammenhang mit eindimensionalen Energiebändern sind bereits 1995 durchgeführte Photolumineszenz-Anregungsmessungen (PLE) an der Y-Linie in *ZnSe* interessant [Fisc95]. Die Messergebnisse sind, da an der hier untersuchten 165nm dicken Epitaxieschicht erhalten, im ANHANG A.3 reproduziert und diskutiert. Zusammenfassend ist festzuhalten, dass es durch PLE-Messungen möglich ist, die Energieabhängigkeit der Zustandsdichte der Ladungsträger in der Umgebung des Γ -Punktes zu registrieren.

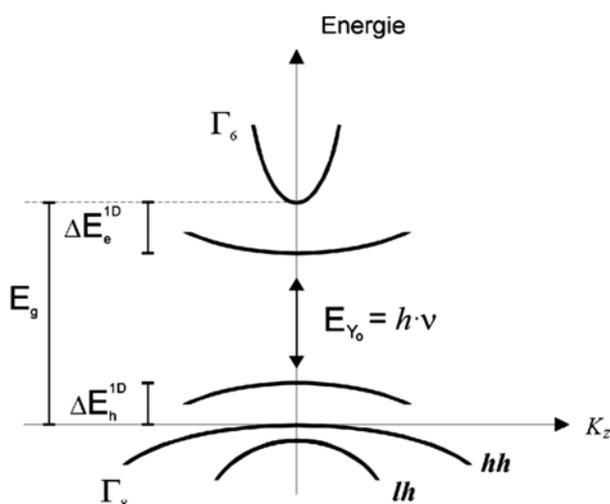


Abbildung 7.1.5 : Schematische Darstellung der Bandstruktur eines Halbleiters (*ZnSe*) mit versetzungsinduzierten eindimensionalen Energieniveaus für Elektronen ($\Delta E_e^{1D} \approx 137\text{meV}$) und für Löcher ($\Delta E_h^{1D} \approx 15\text{meV}$). Mit K_z ist die Komponente des Impulses entlang der Versetzungslinie bezeichnet. Der Graph repräsentiert Gleichung (3.2.4) unter der Berücksichtigung aller Messwerte, insbesondere der Exzitonbindungsenergie ($E_{DEX} \approx 44\text{meV}$) an der Versetzung. Diese lässt sich jedoch keinem der Bänder zuordnen.

Es werden zwei resonant angeregte Übergänge gefunden, die als Übergänge von Elektronen aus dem eindimensionalen Versetzungsenergieniveau ins lh -(A-Linie) und hh -(B-Linie)-artige Valenzband interpretiert werden. Ebenso ist jede einzelne Komponente Y_0^n der Feinstruktur (s. Abb.7.1.3a) in gleicher Weise der Grundzustand von zwei

angeregten Übergängen. Dies bedeutet, dass die Feinstruktur keine elektronische Eigenschaft des Defektpotentials sein kann.

Das Schema in der Abbildung 7.1.5 stellt den schematischen Verlauf der Bandstruktur der durch eine Versetzung induzierten Energiebänder in Abhängigkeit von der Wellenvektorkomponente K_z parallel zur Versetzungslinie dar. Die in der Literatur durch numerische Simulationen gefundenen Zahlenwerte für die eindimensionalen Energieniveaus sind $\Delta E_e^{1D} \approx 88\text{meV}$ für das Elektron und $\Delta E_h^{1D} \approx 53\text{meV}$ für das Loch [Far99]. Allerdings ist zu berücksichtigen, dass FARVACQUE *et al.* für die Simulationsrechnungen das Verzerrungsfeld einer undissoziierten und elektrisch neutralen 60° -Versetzung wählten. Die in dieser Arbeit vorgestellten Eigenschaften zur linearen Polarisation der Y-Linie deuten jedoch darauf hin, dass im Wesentlichen der Stufenanteil der Versetzung und somit die 90° - α -Partialversetzung die elektronischen Eigenschaften des Versetzungssexzitons bestimmt (siehe ANHANG A1).

Schon ein Vergleich der Bindungsenergien mit Volumenexzitonen in den untersuchten II-VI Materialien zeigt einen deutlichen Unterschied der Versetzungssexzitonen in *CdTe* und *ZnSe*. Die temperaturabhängigen Messungen zeigen, dass die Bindungsenergie des Versetzungssexzitons in *CdTe* den 1.2 fachen, hingegen in *ZnSe* den 2.3 fachen Wert der Bindungsenergie des freien Exzitons besitzt. Dies wird dadurch erklärt, dass in *ZnSe* beide Ladungsträgertypen durch die Versetzung in eindimensionalen Defektpotentialen gebunden sind. Im Gegensatz dazu wird angenommen, dass in *CdTe* zunächst das Loch an die Versetzung gebunden wird. Das Elektron erfährt analog dem THOMAS-HOPFIELD-LYNCH-Modell [Hop66] eine attraktive Coulombwechselwirkung aufgrund des gebundenen Lochs. Diese Interpretation ist ebenso im Einklang mit anderen verspannungsinduzierenden Defekten, die in *CdTe* durch Photolumineszenz untersucht worden sind [Wor95]. Im folgenden werden daher Exzitonen, die durch lokalisieren eines Ladungsträgers an eine Versetzung gebunden werden, als DbX (Dislocation bound Excitons) bezeichnet. Weil der jeweils andere Ladungsträgertyp nur durch die Coulombwechselwirkung des stark lokalisierten Teilchens an die Versetzung gebunden wird, liegt im Fall eines DbX die Bindungsenergie in der Größenordnung der Bindungsenergie eines freien Exzitons. Weitere Informationen zur Unterscheidung von DEX und DbX lassen detaillierte Untersuchungen zur rekombinationsinduzierten Defektdynamik insbesondere zum REDG-Effekt erwarten.

7.2 Exzitonen als Sonden für strukturelle Eigenschaften von α -Versetzungssegmenten in *ZnSe*

Aus der genauen Kenntnis der optischen und elektronischen Eigenschaften der innerhalb der Defektpotentiale gebundenen Versetzungsexzitonen ist es nun möglich, die daraus resultierenden Eigenschaften, die lineare Polarisation der Lumineszenz parallel \vec{s} und die spektrale Feinstruktur Y_0^n als empfindliche Indikatoren für strukturelle Defektmerkmale von α -Versetzungssegmenten einzusetzen.

7.2.1 Geometrische Lage des Defekts im Kristall - Nukleation von Versetzungshalbschleifen an der Wachstumsoberfläche

In der Abbildung 7.2.1 sind die Photolumineszenzspektren und der *DLP* von drei Proben unterschiedlicher Schichtdicke dargestellt. Aufgetragen über der Energie ist die Intensität der Y -Lumineszenz mit einem elektrischen Feldvektor parallel und senkrecht der Versetzungslinienrichtung.

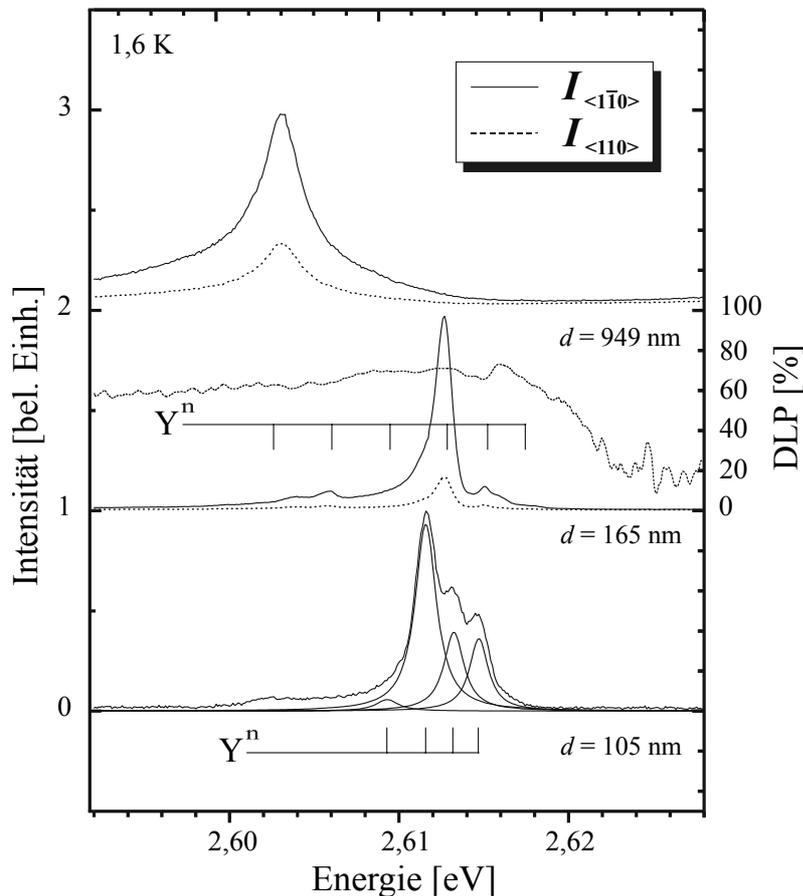


Abbildung 7.2.1: Photolumineszenzspektren für drei Proben unterschiedlicher Schichtdicke, detektiert für zwei orthogonale Polarisationsrichtungen (linke Skala) und der *DLP* für ein Spektrum (rechte Skala). Alle Übergänge sind sehr stark linear parallel der $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ Achse polarisiert. In manchen Spektren ist eine Feinstruktur zu beobachten. Diese wurde für die jeweiligen Spektren nach Gleichung 7.3 angepasst.

Bei der Probe mit der dünnsten Schicht wurde auf eine Darstellung des Spektrums mit der kleineren Intensität verzichtet, statt dessen ist die spektrale Feinstruktur durch eine Serie von

Lorentzkurven simuliert. Es sei konstatiert, dass das Spektrum dieser Probe im Peakmaximum mit 80 Prozent den größten *DLP*-Wert besitzt. Die Feinstruktur Y_0^n , wie auch die Polarisation, verliert sich bei Proben mit größerer Schichtdicke. Deutlich ist hingegen bei allen Spektren die Lorentzform der Spektrallinie zu erkennen. Selbst komplexere Spektren der Y-Lumineszenz, mit bis zu neun Komponenten [Wor99], können durch eine Anpassung mit einer Serie von Lorentzkurven ausgezeichnet reproduziert werden. Die Maxima folgen dabei der später diskutierten Beziehung 7.3. Einzelne Subkomponenten besitzen eine spektrale Halbwertsbreite von ungefähr $\Delta E=(1.2-2.1)\text{meV}$ mit steigender Tendenz zu niedrigeren Übergangsenergien hin.

Die energetische Lage der Peakmaxima verschiebt sich, im Rahmen mit der überlagerten Feinstruktur, mit zunehmender Schichtdicke zu niedrigeren Energien, ein Effekt der Relaxation des Gitters. Die relativ starke energetische Verschiebung der Y_0 -Linie mit der Variation der Hintergrundverspannung des Gitters lässt sich in konsistenter Weise mit einem hauptsächlich *h*-artigen Übergang interpretieren. Da die PL-Spektren die 949nm dicke Schicht als thermisch induziert unverspannt ausweisen, kommt die Energieposition $E=2.606\text{eV}$ der Rekombinationsenergie im Volumenmaterial am nächsten.

Konsequenterweise gibt die Variation des *DLP* mit der Schichtdicke Auskunft über die geometrische Lage des Defekts im Kristall nahe der Oberfläche. Sie konnte durch Bestimmen der polarisationsabhängigen Intensität der Y-Linie für die *ZnSe* Probenserie erschlossen werden. Sowohl die maximale Intensität des Peakmaximums mit linearer Polarisation parallel $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ (offene Symbole linke Skala) als auch der *DLP* ist als Funktion der Schichtdicke (geschlossene Symbole, rechte Skala) in Abbildung 7.2.2 aufgetragen¹⁵.

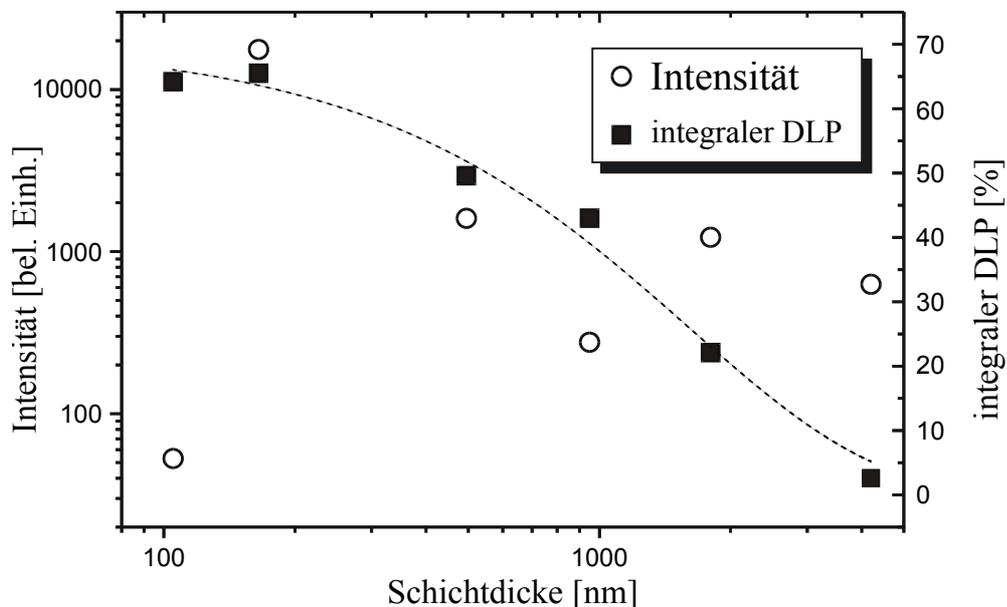


Abbildung 7.2.2: Maximale Intensität des Peakmaximums der Y-Lumineszenz, linke Skala logarithmisch. *DLP* der Lumineszenz rechte Skala linear. Die Anzahl der α -Versetzung im Bereich der Oberfläche ist knapp über der kritischen Schichtdicke maximal, erkennbar an der um mehrere Größenordnungen

¹⁵ Hier ist der integrale *DLP* dargestellt, das bedeutet in diesem Fall die normierte Differenz der Flächen unter den polarisationsaufgelösten Spektren.

überragenden Intensität bei $d=165\text{nm}$. Der DLP nimmt kontinuierlich mit steigender Schichtdicke ab (gepunktete Linie als Augenführung).

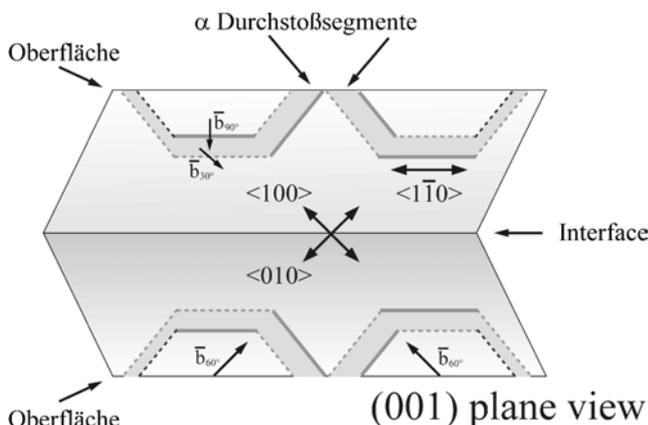
Der Verlauf der Messpunkte (offene Symbole) der maximalen Intensität der Y-Lumineszenz über der Schichtdicke springt beim Überschreiten der kritischen Schichtdicke um circa drei Zehnerpotenzen. Bei Proben mit größeren Schichtdicken fällt die Intensität mehr oder weniger stetig mit steigender Schichtdicke wieder ab.

Die Messwerte für die Intensität lassen sich keinem klaren Muster zuordnen, sie können allenfalls als empfindlicher Indikator für das Überschreiten der kritischen Schichtdicke herangezogen werden. Im Gegensatz dazu korreliert die Variation des DLP als Funktion der Schichtdicke mit dem Verschwinden der linienartigen und dem Auftreten der punktförmigen Hellkontraste in den KL-Aufnahmen. Im Rahmen des Modells zur Oberflächennukleation der Gleitversetzungshalbschleifen gibt es maximal vier mögliche 60° - α -Durchstoßversetzungen (Abb. 7.2.3). Die Linienrichtungen \vec{s} dieser Versetzungen verlaufen in der Projektion auf die (001) Wachstumsoberfläche zueinander unter einem Winkel von 90° . Damit sollte auch unter diesem Gesichtspunkt keine Polarisation zu erwarten sein.

Da die Y-Lumineszenz in einem Energiebereich liegt, in dem die $ZnSe$ Schichten transparent sind, bedeutet eine geänderte geometrische Lage der Versetzungen im Kristall eine Superposition von verschiedenen Polarisationsvektoren. Das heißt, der Übergang von Misfit- zu Durchstoßversetzungen vernichtet in jedem Fall die Vorzugsrichtung in der Polarisation der Y-Lumineszenz. Fazit:

- Die Bestimmung der Vorzugsrichtung der linearen Polarisation der Y-Lumineszenz erlaubt Aussagen zur Linienrichtung \vec{s} von α -Versetzungsschleifen als Bestandteile von hexagonalen Versetzungsschleifen in $\{111\}$ Gleitebenen. Die Untersuchung des Polarisationsgrades der Y-Lumineszenz in Abhängigkeit von der Dicke der Epitaxieschichten unterstützt das in KAPITEL 6 vorgestellte Strukturmodell zur plastischen Relaxation von kompressiv verspannten Epitaxieschichten durch Gleitversetzungen.

Die aus den polarisationsabhängigen Untersuchungen der Y-Lumineszenz in Abhängigkeit von der Schichtdicke erhaltenen Ergebnisse sind in der folgenden Abbildung 7.2.3 schematisch veranschaulicht.



7.2.2 Laterale Verteilung versetzungsgebundener Exzitonen - Ausbildung von Versetzungsbündeln im Bereich der kritischen Schichtdicke

In den vorangegangenen Abschnitten dieses Kapitel wurde schon mehrfach eine Feinstruktur in den Spektren der Y-Lumineszenz festgestellt. Wie in den PL-Spektren in Abbildung 7.2.1 zu sehen ist, formen die einzelnen Subkomponenten Y_0^n eine spektrale Serie mit der Energieposition E_n . Ein Argument dafür, dass die Feinstruktur keine elektronische Eigenschaft des Defektpotentials sein kann, ist bereits im Abschnitt 7.1.2 vorgebracht worden.

Nach dem Modell für ein Versetzungsexziton sollten an eine 90° -Versetzung gebundene eindimensionale Ladungsträgerzustände eine Feinstruktur aufweisen, da das Verzerrungsfeld der benachbarten 30° -Versetzung als Störung wirkt. Gleichung 7.3, welche zur Beschreibung der Feinstruktur aus einem k - p -Hamiltonoperator hergeleitet wurde [Reb95b], beschreibt die strahlende Rekombination eines derartigen DEX.

$$E(n) = E_0 - \Xi / (d_0 - n \cdot k)^2 \quad (7.3)$$

wobei E_0 : Rekombinationsenergie eines Exzitons an einer isolierten 90° -Partialversetzung
 Ξ : Potentialkonstante (deformationsinduziertes, elektrisches und piezoelektrisches Feld)
 d_0 : Gleichgewichtdissoziationsweite von Shockley'schen Partialversetzungen
 $n \cdot k$: Differenz der tatsächlichen Stapelfehlerweite zur Gleichgewichtdissoziationsweite ($k=5.7\text{\AA} \sqrt{3/8}$).

Die Aufspaltungsweite der Partialversetzungen kann sich nur um ganzzahlige Werte n in Multiplen von k verändern. Unterschiedliche Abstände der Partialversetzungen verändern die Größe der Wechselwirkung (Defektpotential aus Deformation und elektrischen Feldern) der Versetzung mit dem DEX.

Die Energieposition der Intensitätsmaxima in den PL-Spektren kann mit Gleichung 7.3 gut reproduziert werden [Wor99]. Die durch eine Anpassung an die Peakserie gefundenen Werte sind $E_0=(2.660\pm 0.005)\text{eV}$, $\Xi=(4.5\pm 0.5)\cdot 10^2\text{eV}\text{\AA}^2$ und $d_0=(10.0\pm 0.5)\text{nm}$. Der hier für die Gleichgewichtdissoziationsweite ermittelte Wert stimmt erstaunlich gut mit dem aus hochauflösenden TEM-Untersuchungen gefundenen Wert von 11nm [Che94] überein.

Zur Überprüfung dieses Modells sind die im Folgenden beschriebenen Messungen durchgeführt worden.

Eine sehr sensitive Methode, kleinste laterale wie spektrale Inhomogenitäten mittels der Kathodolumineszenz-Mode eines Raster-Elektronenmikroskops abzubilden, ist das CLWI-Verfahren (Cathodoluminescence-Wavelength-Imaging) [Chr91]. Hierbei wird ein Scanbereich in einem Punktscanmodus lateral abgerastert. Für jeden Messpunkt wird ein komplettes KL-Spektrum aufgezeichnet. Anschließend kann mit Hilfe eines Auswerteprogramms selektiv

jedem Peakmaximum der Lumineszenz entsprechend seiner Rekombinationsenergie eine Farbe zugeordnet werden. Das Ergebnis dieser Methode im Energiebereich der Y-Lumineszenz ist in Abbildung 7.2.4 dargestellt. Flächen gleicher Farbe bedeuten Bereiche gleicher Übergangsenergie.

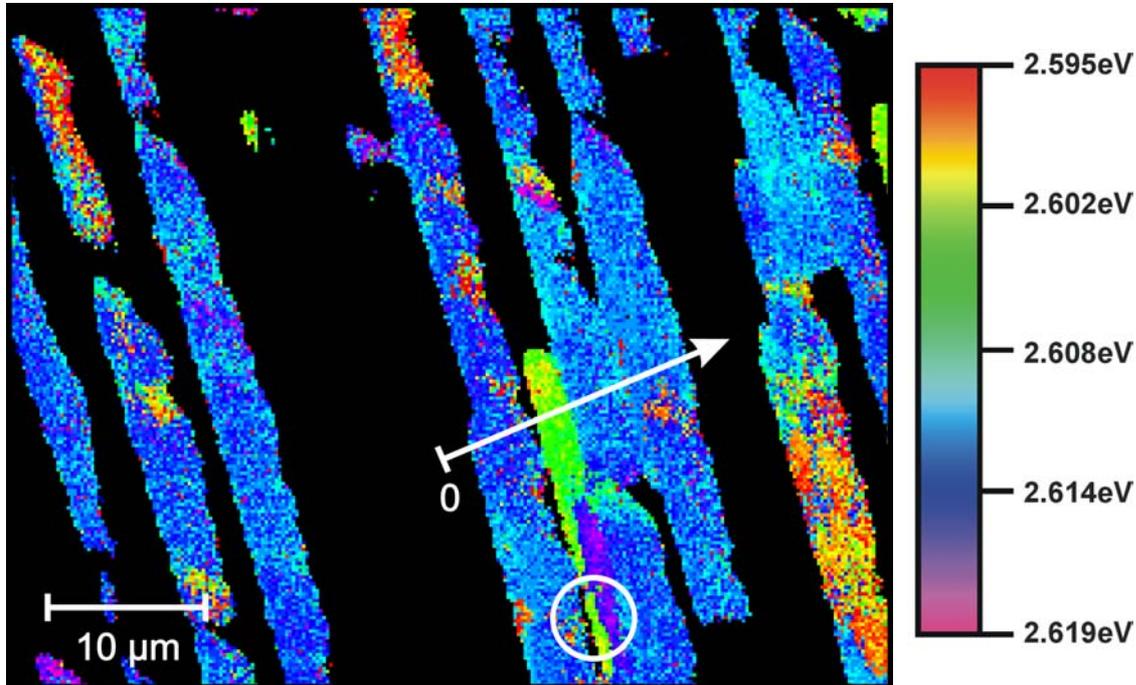


Abbildung 7.2.4: CLWI-Abbildung eines Bereichs mit Misfit-Versetzungen der Probe mit 165nm Schichtdicke, bei ungefähr 4.2K.

Es ist die laterale Verteilung der Energien der Y-Linienmaxima in einem Scanbereich von $(50 \times 35) \mu\text{m}^2$ wiedergegeben. Die Farbskala widerspiegelt die verschiedenen Energiewerte der Peakmaxima der Y-Lumineszenz zwischen 2.595eV und 2.619eV. In der Abbildung bedeuten Flächen gleicher Farbe Bereiche derselben Rekombinationsenergie Y_0^n des Versetzungsexzitons. Schwarze Flächen sind Bereiche, in denen keine Y-Lumineszenz registriert wurde.

Es fällt auf, dass die Lumineszenz ausschließlich in Form von etwa $2 \mu\text{m}$ breiten Kontrastbändern zu finden ist, deren Breite allerdings manchmal um circa $\pm 0.5 \mu\text{m}$ zu variieren scheint. So besitzt der schmalste zu findende Kontrast im Inneren des weißen Kreises etwa diese Breite. Somit könnte es bedeuten, dass die aufgelösten Kontraste aus mehreren Versetzungen bestehen. Die meisten der Kontrastbänder besitzen eine Rekombinationsenergie von 2.612eV, was, wie schon weiter oben festgestellt, dem Hauptmaximum der Y-Linie in einem konventionellen PL-Spektrum dieser Probe entspricht.

Der obere Teil a) der Abbildung 7.2.5 zeigt einen Ausschnitt aus einem solchen PL-Spektrum. Da die Energiepositionen der Subkomponenten Y_0^n diskreten Stapelfehlerweiten n entsprechen sollen, bekommt nun das absolute Maximum im PL-Spektrum willkürlich den Wert Null zugeordnet. Es wird davon ausgegangen, dass Versetzungen mit Gleichgewichtsabstand d_0 am häufigsten präsent sind. Negative n Werte entsprechen dann Versetzungen mit größerer Stapel-

fehlerweite, positive n entsprechen Versetzungen mit kleinerer Stapelfehlerweite als der Gleichgewichtsabstand.

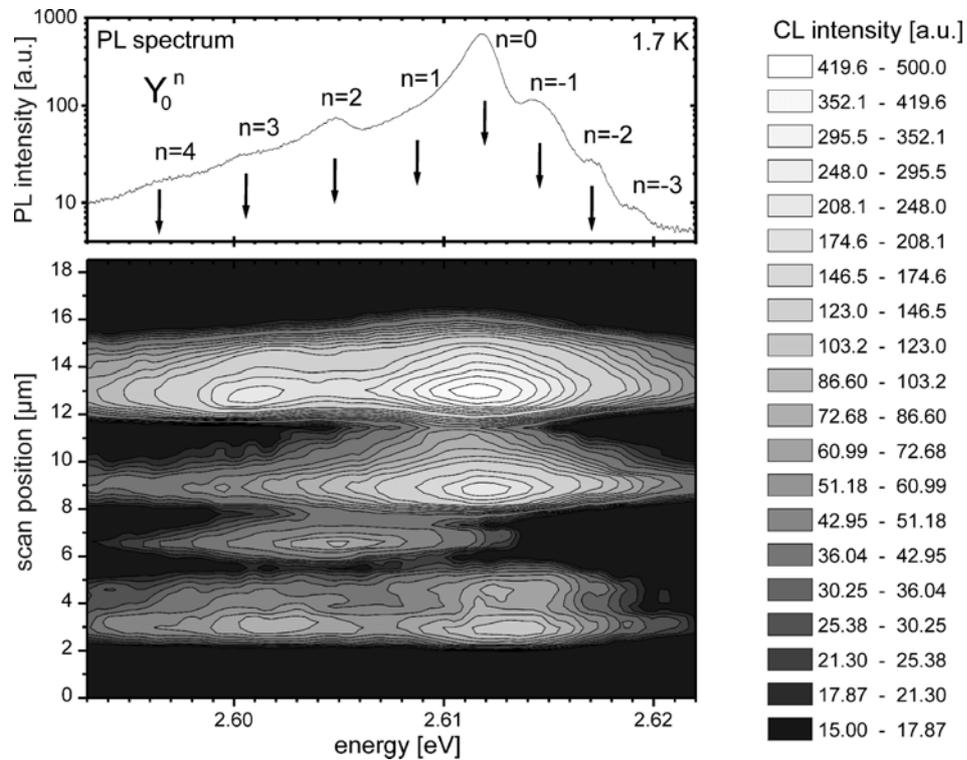


Abbildung 7.2.5a: Detailaufnahme aus einem Photolumineszenzspektrum, es lassen sich sieben Komponenten identifizieren.

Abbildung 7.2.5b: Extrahierter Linienscan über einige Kontrastbänder in der CLWI Aufnahme.

Der untere Teil b) der Darstellung 7.2.5 zeigt die lokal extrahierten Spektren aus dem mit einer weißen Linie markierten Scanpfad in der obigen CLWI-Abbildung. Offensichtlich stimmen verschiedene Energiepositionen der Linienmaxima mit den Subkomponenten Y_0^n im Photolumineszenzspektrum überein. Die Feinstruktur unterscheidet sich beachtlich zwischen einzelnen senkrecht zur Scanrichtung liegenden Kontrastbändern. Aus den verschiedenen Defektbereichen können einzelne Peaks (bei der Scanposition $6.5\mu\text{m}$ wird nur die $n=2$ Komponente beobachtet) oder multiple Komponenten (bei den Scanpositionen $3\mu\text{m}$, $4.5\mu\text{m}$, $9\mu\text{m}$ und $13\mu\text{m}$ werden mehrere Peaks vorzugsweise mit $n=0$ und $n=3$ erkannt) identifiziert werden. Das bedeutet:

- Die Feinstruktur der Y-Lumineszenz ist eine Charakteristik, die keiner einzelnen Versetzung zugeordnet werden kann, sondern sie resultiert statt dessen aus der Inhomogenität eines Ensembles von $Se(g)$ -Versetzungssegmenten mit unterschiedlichen Stapelfehlerweiten.

Es konnte erstmals für dünne $ZnSe$ Schichten beobachtet werden, dass die linienartigen KL-Hellkontraste aus einer Vielzahl von parallel zur Grenzfläche orientierten Segmenten bestehen. Der experimentelle Nachweis von parallelen Versetzungsbündeln wirft ein neues Licht auf den Nukleationsmechanismus von α -Versetzungen. Erscheint die in KAPITEL 6 Abbildung 6.1.4c gezeigte Verteilung von linienartigen Hellkontrasten auf einer lateralen Skala von mehr als

100 μm stochastisch verteilt, so stellen wie in Abbildung 7.2.4 gezeigt, die etwa 2 μm breiten Segmente Versetzungsbündel dar. Es wird daher ein Multiplikationsmechanismus angenommen, der kurz nach dem Überschreiten der kritischen Schichtdicke zu Bündeln von Misfit-Versetzungssegmenten führt. Folgender Mechanismus wäre hierfür vorstellbar :

Als Nukleationsquelle für die Versetzungshalbschleifen kommen Stufen an der Wachstumsoberfläche der Epitaxieschicht in Frage. Diese stellen Zentren erhöhter Verspannungen dar, die beim Erreichen der kritischen Schichtdicke die Bildung von Versetzungshalbschleifen begünstigen [Wag99]. Der Einbau von 60°-Misfit-Versetzungssegmenten führt an der freien Oberfläche eine Änderung der Stufendichte herbei. Bei kompressiv verspannten Schichten mit Zinkblendestruktur bedeutet das eine Entstehung von neuen Stufen, die wiederum Quellen für neue Versetzungshalbschleifen darstellen. Für *ZnSe* Epitaxieschichten ist durch in situ RHEED-Messungen während des Wachstumsprozesses nach dem Überschreiten der kritischen Schichtdicke eine Zunahme der Stufendichte parallel zur $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ Achse bereits beobachtet worden [Ros96]. Dies korreliert mit dem Auftreten einer anisotropen Versetzungsdichte.

Strukturelle Untersuchungen (TEM-CL) an Probenexemplaren der hier untersuchten Epitaxieschichten sollten daher unbedingt angestrebt werden, da sie hierzu wesentliche Beiträge liefern können.

8 ZUSAMMENFASSUNG

Die vorliegende Arbeit umfasst Untersuchungen zu optischen und elektronischen Eigenschaften von Defekten in den II-VI Halbleitern *ZnSe* und *CdTe*.

Ein besonderer Schwerpunkt lag in der Analyse der versetzungsinduzierten plastischen Relaxation der Halbleiterheterostrukturen *ZnSe/GaAs(001)* und *CdTe/GaAs(001)* mit Hilfe hochauflösender Photolumineszenz- und Kathodolumineszenzspektroskopie bei tiefen Temperaturen. In mittels Molekularstrahlepitaxie gewachsenen II-VI Halbleiterschichten war es möglich, auf einer Skala von wenigen 100nm vertikale und laterale Verspannungsgradienten nachzuweisen, sowie durch lateral aufgelöste, zerstörungsfreie Methoden wie Mikroskopie und Mikrospektroskopie den Einbau von Versetzungen zu charakterisieren. Um uniaxiale und biaxiale Verspannungen des Halbleitergitters als auch die linear polarisierte Lumineszenz analytisch zu beschreiben, wurden geeignete Spinoperatoren im Rahmen der Invariantenmethode konstruiert und die jeweiligen Übergangsmatrixelemente berechnet. Auf diese Weise konnten detaillierte Einsichten in die elektronische Struktur von Versetzungen, deren Einbau in das Gitter und Wechselwirkung mit anderen Gitterdefekten gewonnen werden.

Das Ziel der vorliegenden Arbeit war es, Informationen über den Einbau und die elektronische Struktur von Versetzungen durch optische Spektroskopie zu erhalten, sowie die Lokalisierung und die strahlende Rekombination von Elektronen-Loch-Paaren an Versetzungen zu analysieren. Zunächst wurden am Beispiel von *CdTe* und *ZnSe* Gleitversetzungen hinsichtlich ihrer Rekombinationswirksamkeit untersucht. Es konnte im Rahmen dieser Arbeit durch eingehende optische und mikroskopische Methoden gezeigt werden, dass die so genannte Y-Lumineszenz (2.6eV für *ZnSe* bzw. 1.47eV für *CdTe*) ihren Ursprung in der Rekombination von Exzitonen hat, die in den untersuchten II-VI Halbleitern an polaren 60° - α -Versetzungen (*Se(g)*, *Te(g)*) gebunden sind. Im Gegensatz dazu konnte durch plastische Mikrodeformationen in *ZnSe* und *CdTe* eine nichtstrahlende Rekombinationsaktivität von polaren 60° - β -Versetzungen (*Zn(g)*, *Cd(g)*) nachgewiesen werden.

Zur Defektcharakterisierung wurden im Bereich der Y-Lumineszenz neuartige, sowohl lateral als auch spektral hochauflösende, polarisationsabhängige Lumineszenzuntersuchungen durchgeführt. Dadurch konnte ein direkter, experimenteller Beweis erbracht werden, dass weitreichende Verzerrungsfelder von Versetzungen mit einer Stufenkomponente des Burgersvektors senkrecht zur Versetzungslinie für den Einfang von freien Ladungsträgern verantwortlich sind. Es wurde dargelegt, dass hinsichtlich der Lokalisierung von Exzitonen die Wechselwirkung von Ladungsträgern mit vollständigen Schraubenversetzungen eine vergleichsweise untergeordnete Rolle spielt. In *ZnSe* als auch in *CdTe* ist für die Lumineszenz des an der Versetzung gebundenen Exzitons eine lineare Polarisation der Lumineszenz parallel zur

Versetzungslinie gefunden worden. Sowohl die lineare Polarisierung als auch die Bindungsenergie sind in sehr guter Übereinstimmung mit dem theoretischen Modell im Rahmen eindimensionaler Ladungsträgersysteme. Somit werden andere Defekte als mikroskopischer Ursprung der Y-Lumineszenz wie z.B. Kinken, Punktdefekte oder Stapelfehler ausgeschlossen.

Erstmals konnte im Rahmen dieser Arbeit in *CdTe* und in *ZnSe* Schichten eine Feinstruktur in der Y-Lumineszenz aufgelöst werden, die unterschiedliche Weiten des Stapelfehlerbandes von dissoziierten 60° - α -Versetzungen widerspiegelt. Durch lateral aufgelöste Untersuchungen zur Feinstruktur der Y-Linie wurde eine nicht-stochastische räumliche Verteilung von α -Versetzungssegmenten gefunden. Diese Beobachtung wirft ein neues Licht auf den Nukleationsmechanismus von α -Versetzungen, die für dünne Schichten in Versetzungsbündeln auftreten. Eine mögliche Erklärung besteht darin, dass während des Wachstumsprozesses Versetzungshalbschleifen aus Quellen im Bereich der (001) Wachstumsoberfläche entstehen, in die Schicht gleiten und zu einer Bündelung von Versetzungssegmenten parallel der Grenzfläche führen.

In einem weiteren Schritt wurde durch ortsaufgelöste Kathodolumineszenzspektroskopie die Verteilung von mobilen, polaren 60° - α -Versetzungen in Abhängigkeit von der Schichtdicke studiert und der Einfluss unterschiedlicher Wachstumsparameter diskutiert. Es konnte gezeigt werden, dass polare *Se(g)*- und *Zn(g)*-Versetzungen maßgeblich zur plastischen Relaxation von *ZnSe/GaAs*(001) beitragen. Schließlich war es möglich, durch Vergleich der linearen Polarisierung der Y-Linie mit der linearen Polarisierung exzitonischer Lumineszenz, die mit substitutionellen Störstellen und freien Exzitonen assoziiert werden, eine anisotrope Relaxation der Verspannung für (001) gewachsene Schichten mit Zinkblendekristallstruktur nachzuweisen. Diese konnte auf eine asymmetrische Verteilung von α - und β -Versetzungssystemen zurückgeführt werden. Es zeigte sich, dass gerade in dünnen *ZnSe* Schichten im Bereich der kritischen Schichtdicke die Dichte von α -Versetzungen die von β -Versetzungen bei Weitem übertrifft. Dieses Ergebnis hat insofern Bedeutung, da in analytischen Betrachtungen zur Relaxation der Verspannung bei II-VI Halbleitern in der Literatur bisher der Beitrag von α - und β -Versetzungen nicht unterschieden wurde. Die Analyse der anisotrop polarisierten Lumineszenz stellt ein einfaches Verfahren dar, das es zukünftig erlauben könnte, in Schichtanordnungen mit maßgeschneiderten lokalen Verspannungsmodulationen, die z.B. durch Übergitterstrukturen realisiert werden, die Entstehung von Versetzungen in dünnen Halbleiterschichten simultan im Wachstumsprozess zu erfassen. Darauf aufbauend könnte in Zukunft eine geeignete Wachstumsmethode entwickelt werden, die zu einer Unterdrückung von Nukleations- und Multiplikationsprozessen von Versetzungen führt.

Um die beobachtete Abhängigkeit der anisotropen Polarisation der Y-Linie und der Matrixlumineszenz mit zunehmender Schichtdicke zu erklären, wurde folgendes Modell vorgestellt: In sehr dünnen Schichten ist zunächst die Dichte von Versetzungen zu gering, um Relaxationseffekte der Schichtstruktur nachzuweisen. Die Lumineszenz von substitutionellen Störstellen und des freien Exzitons zeigt daher keine Vorzugsrichtung des elektrischen Feldvektors in einer ausgezeichneten Richtung in der (001) Ebene. Die Aufspaltung zwischen Leicht- und Schwerlochkomponente des freien Exzitons wird auf eine pseudomorph, biaxial kompressiv verspannte Schicht zurückgeführt. Ab der kritischen Schichtdicke findet eine Oberflächennukleation von Versetzungen im $Se(g)$ -Subsystem statt, wobei die Versetzungslinien ausschließlich parallel $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ orientiert sind. Damit geht eine anisotrope plastische Relaxation der $ZnSe$ Schicht einher, die zu einer linearen Polarisation der Matrixlumineszenz, d.h. der Störstellenlumineszenz und des freien Exzitons führt. Bei größeren Schichtdicken einsetzende Versetzungsmultiplikationseffekte, die zur Ausbreitung von $Zn(g)$ -Versetzungen entlang $\langle 110 \rangle$ führen, bewirken eine starke Schichtrelaxation und eine Abnahme der linearen Polarisation der Lumineszenzlinien der Kristallmatrix. Schließlich wird ein unverspannter Wachstumsmodus erreicht. Die biaxiale Schichtverspannung wird durch ein dreidimensionales Versetzungsnetzwerk vermittelt. Alle Linien sind in der (001) Ebene unpolarisiert.

Die hier vorgestellten Untersuchungen zeigen zudem, dass die plastischen Relaxationseigenschaften von $ZnSe$ empfindlich von der Art und der Konzentration von Dotierstoffen abhängen. Chlor (n -) und Stickstoff (p -) dotierte $ZnSe$ Schichten zeigen hinsichtlich der plastischen Relaxation in Abhängigkeit von der Schichtdicke eine deutlich unterschiedliche Dynamik. Es zeigte sich, dass $ZnSe$ Schichten gleicher Schichtdicke aber mit unterschiedlicher Dotierung starke Variationen der uniaxialen Verspannung in der (001) Ebene besitzen. Mit Chlor dotierte Schichten neigen zu einer wesentlich stärkeren anisotropen Relaxation bei geringeren Schichtdicken als die mit Stickstoff dotierten. Dies wurde damit erklärt, dass die Dotierung mit Stickstoff eine Reduktion der Gitterkonstanten der $ZnSe$ Schicht bewirkt.

Es wurde ein Strukturmodell für den gerichteten Einbau und die unabhängige Ausbreitung von α - und β -Versetzungen in $ZnSe/GaAs(001)$ Epitaxieschichten vorgeschlagen, das im Einklang mit allen in dieser Arbeit dargestellten, experimentellen Beobachtungen der Verspannungsrelaxation von II-VI Halbleiterschichten steht. Es zeigt sich, dass dieses Modell ebenfalls die Untersuchungsergebnisse zum Einbau von Versetzungen in $CdTe/GaAs(001)$ erklärt. Dies lässt erwarten, dass dieses Modell zur Erklärung des Spannungsabbaus durch Gleitversetzungen auf alle kompressiv verspannten (001) gewachsenen II-VI Zinkblendeheterostrukturen herangezogen werden kann. Aufgrund ausgeprägter linearer Polarisation der Y-Lumineszenz parallel zur Versetzungslinie \bar{s} lässt sich die Vorzugsrichtung von α -Versetzungssegmenten als Bestandteile von hexagonalen Versetzungsschleifen in $\{111\}$ Gleitebenen durch

polarisationsaufgelöste Messungen feststellen. In dünnen Schichten ist das Exziton bindende Potential der 60° - α -Versetzung nicht durch Versetzungsmultiplikationsprozesse gestört. Aufgrund des eindimensionalen Charakters des Versetzungspotentials ist die dazugehörige Lumineszenz parallel zur Versetzungslinie maximal linear polarisiert. Mit steigender Schichtdicke steigt die Dichte der die Oberfläche durchstoßenden Versetzungen, deren Versetzungslinien in Projektion auf die (001) Oberfläche in die zwei $\langle 100 \rangle$ Achsen zeigen und damit zu einem Verschwinden der linearen Polarisation der Y-Lumineszenz führen.

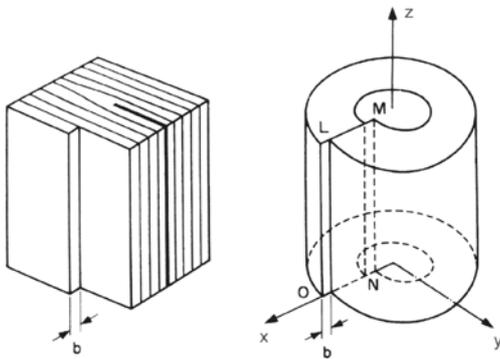
Für die Untersuchung der (111) Wachstumsoberfläche von *CdTe* Epitaxieschichten auf *Si*(111) Substraten ergibt sich im Hinblick auf den Einbau von Versetzungen folgenden Sachverhalt: Die plastische Relaxation erfolgt bei dieser Wachstumsrichtung vorzugsweise über die Bildung von ausgedehnten Zwillingsdomänen und nicht über Versetzungen. Die Domänenbildung erfolgt an Stufen der Substratoberfläche. Hierdurch ist es möglich, die Relaxation durch Verkippen der Substratoberfläche zu kontrollieren. Eine wesentlich höhere Stufendichte auf einer verkippten *Si*(111) Substratoberfläche führt zu einer größeren Dichte der Domänen im Bereich der internen Grenzfläche und zu einem wesentlich schnelleren Auswachsen der Domänen mit der Schichtdicke. Durch Substratverkipfung können im Vergleich zu unverkippten Substraten qualitativ hochwertigere, dünne Schichten hergestellt werden.

Insgesamt konnte gezeigt werden, dass Grenz- und Oberflächeneffekte bei der Defektentstehung in II-VI Halbleiterheterostrukturen in zunehmendem Maße relevant werden. Durch eingehende optische Untersuchungen zur Energieverschiebung, Aufspaltung sowie der linearen Polarisation der Lumineszenz freier Ladungsträgern sowie versetzungsgebundener Exzitonen konnten neue Einsichten in die Entstehung und Ausbreitung von Versetzungen in den II-VI Halbleitern *CdTe* und *ZnSe* gewonnen werden. Die Größe und Richtung mikroskopischer, elastischer Deformationen sind ohne aufwendige Präparationstechniken mit hoher lateraler Auflösung erfasst worden. Die zukünftigen Möglichkeiten der hier neu vorgestellten optischen Untersuchungsmethode liegen unter anderem in der Erforschung der Wechselwirkung von versetzungsinduzierten Gitterverzerrungen bei der Migration von Versetzungen. Somit könnte die Rolle von komplexen Versetzungsmultiplikationsprozessen bei der Ausbreitung von Versetzungen aufgeklärt werden.

ANHANG

A.1 Deformationspotential eines geraden Versetzungssegments

Um aus dem kontinuumsmechanischen Verzerrungsfeld einer geraden Stufenversetzung das Deformationspotential abzuleiten, werden zuerst die Komponenten des Verschiebungsvektors $\bar{v} = (v_x, v_y, v_z)$ der Versetzung benötigt (Hirth, Lothe S.78).



$$\begin{aligned} v_x(x, y) &= \frac{b}{2\pi} \left[\arctan\left(\frac{y}{x}\right) + \frac{xy}{2(1-\nu)(x^2 + y^2)} \right] \\ v_y(x, y) &= \frac{-b}{2\pi} \left[\frac{1-2\nu}{4(1-\nu)} \ln(x^2 + y^2) + \frac{x^2 - y^2}{4(1-\nu)(x^2 + y^2)} \right] \\ v_z(x, y) &= 0 \end{aligned}$$

Abbildung A.1.1 : Schematische Darstellung zur Konstruktion des Verzerrungsfeldes einer vollständigen Stufenversetzung aus einer $\{111\}$ Halbebene.

Wobei das Koordinatensystem für eine Misfit-Versetzung in kompressiv verspannten (001) Epitaxieschichten vorgegeben ist mit

$$x = [\bar{1} \bar{1} 2] , \quad y = [1 1 1] , \quad z = [\bar{1} 1 0]$$

für den Fall, dass sich die Versetzung auf einer $(1 1 1)$ Gleitebene befindet. Mit der Bestimmungsgleichung für die Elemente des Deformationstensors

$$\varepsilon_{ij}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right),$$

findet sich :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{zz}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} &= \varepsilon_{zy}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} = \varepsilon_{yz}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} = \varepsilon_{xz}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} = \varepsilon_{zx}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} = 0 \\ \varepsilon_{xx}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} &= \frac{\partial v_x}{\partial x} , \quad \varepsilon_{yy}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} = \frac{\partial v_y}{\partial y} \\ \varepsilon_{xy}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} &= \varepsilon_{yx}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right). \end{aligned}$$

Diese Darstellung eines Tensors zweiter Stufe lässt sich wie im KAPITEL 2 gezeigt symmetrisieren :

$$\begin{aligned}
 [\varepsilon_{ij}(\Gamma_1)] &= \frac{1}{3} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} + \varepsilon_{yy}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{xx}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} + \varepsilon_{yy}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{xx}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} + \varepsilon_{yy}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} \end{pmatrix} \\
 [\varepsilon_{ij}(\Gamma_3)] &= \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 2\varepsilon_{xx}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} - \varepsilon_{yy}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} & 0 & 0 \\ 0 & 2\varepsilon_{yy}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} - \varepsilon_{xx}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} & 0 \\ 0 & 0 & -\varepsilon_{xx}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} - \varepsilon_{yy}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} \end{pmatrix} \\
 [\varepsilon_{ij}(\Gamma_5)] &= \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_{xy}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} & 0 \\ \varepsilon_{yx}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Eine vollständige Stufenversetzung besitzt also gleichzeitig einen hydrostatischen, einen uniaxialen und einen trigonalen Symmetriecharakter.

In analoger Weise findet sich für eine vollständige Schraubenversetzung mit dem Verschiebungsvektor $\vec{v} = (0, 0, v_z)$ nur ein trigonaler Symmetriecharakter:

$$[\varepsilon_{ij}(\Gamma_5)] = \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_{xy}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} & 0 \\ \varepsilon_{xy}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Bei einer Stufenversetzung erstreckt sich der Bereich größter Zugverspannung in Richtung negativer y -Werte, da in dieser Richtung die (111) Netzebene nicht weiter fortgesetzt wird. Die Wirkung auf die Ladungsträger im Γ_8 -Valenzband kann durch Betrachtung der hydrostatischen Komponente des Deformationspotentials veranschaulicht werden :

$$V^{\Gamma_1} = a_v \left(\varepsilon_{xx}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} + \varepsilon_{yy}^{\langle 1\bar{1}0 \rangle} \right)$$

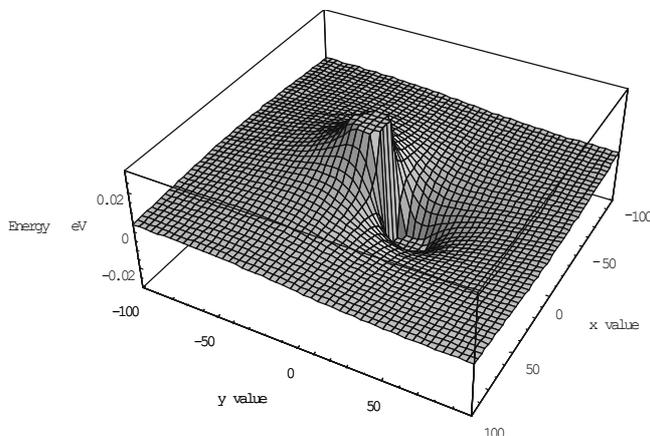


Abbildung A.1.2 :

Hydrostatische Komponente des Deformationspotentials für das Valenzband induziert durch den Stufenanteil des Burgersvektors. (Koordinatenachsen in Einheiten $\bar{b}_{90^\circ}/2\pi$).

A.2 Photolumineszenzanregungsspektroskopie an der 165nm *ZnSe*/ *GaAs*(001) Epitaxieschicht

Um den der Y-Linie zugrunde liegenden Rekombinationsmechanismus zu untersuchen, sind bereits 1995 PLE-Untersuchungen an der undotierten *ZnSe* Schicht durchgeführt worden. Bei einer solchen Untersuchung wird die Probe mit einem Farbstofflaser (Dye-Laser) energieabhängig angeregt. Detektiert wird dabei die Intensität der relevanten Emissionslinien.

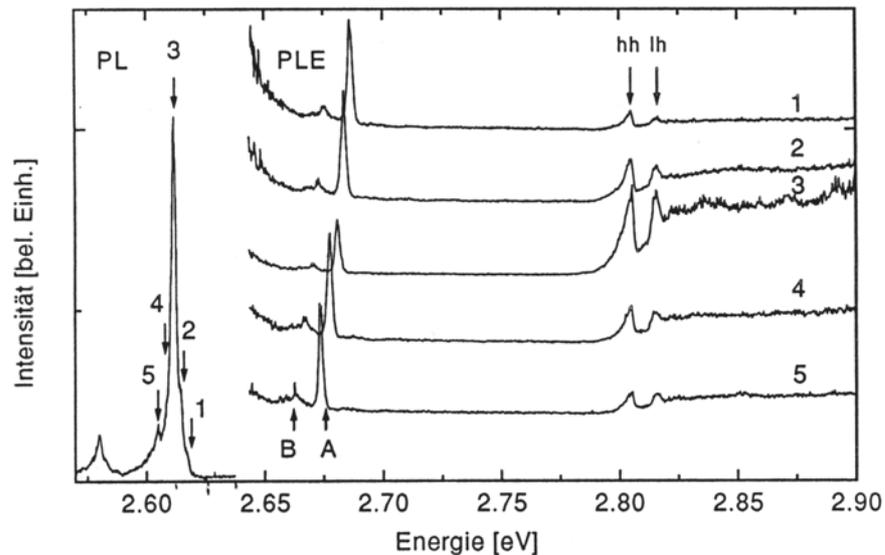


Abbildung A.2.1: Photolumineszenz- und Exzitationsspektren der undotierten 165nm *ZnSe* Schicht. Fünf unterschiedliche Detektionsenergien wurden am Spektrometer so eingestellt (Pfeile), dass sie den energetischen Positionen der fünf Subkomponenten der Y_0 -Linie im Photolumineszenzspektrum entsprechen.

In Abbildung A.2.1 sind im rechten Teil des Graphen die Exzitationsspektren, die Intensität der Rekombination bei fünf unterschiedlichen Detektionsenergien über der Anregungsenergie dargestellt. Detektiert wurde jeweils bei einer Energie entsprechend der Feinstruktur der Lumineszenz (Glg. 7.3), zu sehen im linken Teil des Graphen. Für die Interpretation der Y-Linie als strahlende Rekombination eines gebundenen Exzitons spricht, dass die Y-Linie durch die Bildung freier Exzitonen angeregt wird. Diese Beobachtung passt in das Modell eines Versetzungsexzitons.

Im Exzitationsspektrum tritt zusätzlich bei etwa 2.68eV eine Linie „A“ auf. Deren energetische Position hängt davon ab, bei welcher Komponente der Feinstruktur detektiert wird. Es ist festzustellen, dass die Anregung eines Elektrons in einen Zustand mit der doppelten Energie eines LO-Phonons ($2 \times E_{LO} = 63.2 \text{ meV}$) jedoch nicht zur beobachteten Energiedifferenz der Hauptkomponente von Y_0 zur A-Linie mit 69meV passt. In den PLE-Spektren in Abbildung A.2.1 ist eine zweite Linie „B“, energetisch unterhalb der A-Linie mit etwa der gleichen Energiedifferenz wie zwischen der Leicht- und Schwerlochkomponente des freien Exzitons zu beobachten. Die wesentlich geringere Intensität der B-Linie deutet darauf hin, dass dieser Übergang aufgrund der optischen Auswahlregeln dipolverboten ist.

A.3 Literaturverzeichnis

- [Abr72] M.S. ABRAHAMAS, J. BLANC, and C.J. BUIOCCHI, Appl. Phys. Lett., **21** (5), 185 (1972)
- [All90] J. ALLÈGRE, B. GIL, J. CALATAYUD and H.MATHIEU, J. Crys. Growth **101**, 603 (1990)
- [Asa83] H. ASAI and K. OE, J. Appl. Phys. **54**, 2052 (1983)
- [Asp83] D.E. ASPNES, Surf. Sci. **132**, 406 (1983)
- [Bal73] A. BALDERESCHI and N.O. LIPARI, Phys. Rev. B **8**, 2697 (1973)
- [Ball83] C.A.B. BALL and J.H. VAN DER MERWE, „*Dislocations in Solids*“ vol.6 Edited by F.R.N. Nabarro, (Elsevier Science Publ. Comp. Inc., North Holland Publ. Comp.) p. 121, 1983
- [Bar91] G.A. BARAFF and D.GERSHONI, Phys. Rev. B **43** (5), 4011 (1991)
- [Bas88] G. BASTARD, „*Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*“ (Halsted Press, New York) p.246, 1988
- [Beh97] T. BEHR, Dissertation, Universität Würzburg (1997)
- [Bel77] R.O. BEL, Rev. Phys. Appl. **12**, 391 (1977)
- [Bil55] B.A. BILBY, R. BULLOUGH and E. SMITH, Proc. R. Soc. London Ser. A **231**, 263 (1955)
- [Bir74] G.L. BIR and G.E. PIKUS, „*Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors*“, (John Wiley&Sons, NewYork, Toronto) 1974
- [Boc92] U. BOCKELMANN and G. BASTARD, Phys. Rev. B **45** (4), 1688 (1992)
- [Boz82] S.V. BOZHOKIN, D.A. PARSHIN and V.A. KHARCHENKO, Sov. Phys. Solid State **24**, 800 (1982)
- [Bro89] P.D. BROWN, G.J. RUSSELL, and G. WOODS, J. Appl. Phys. **66** (1), 129 (1989)
- [Car94] PETER Y. YU, MANUEL CARDONA, „*Fundamentals of Semiconductors*“, 2nd Edition, (Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York) p.78, 1994
- [Che94] Y. CHEN, X. LIU, E. WEBER, E.D. BOURRET, Z. LILIENTAL-WEBER, E.E. HALLER, D.J. OLEGO, D.R. DORMAN, J.M. GAINES, N.R. TASKER, Appl. Phys. Lett. **65**, 549 (1994)
- [Chr91] J. CHRISTEN, M. GRUNDMANN, D. BIMBERG, J. Vac. Sci. Technol. B **9**, 2358 (1991)
- [Coo89] B.C. DE COOMAN, C.B. CARTER, KAM TOI CHAN and J.R. SHEALY, Acta metall. **37** (10) 2779 (1989)
- [Dai94] N. DAI, L.R. RAM-MOHAN, H. LOU, G.L. YANG, F.C. ZHANG, M. DOBROWOLSKA and J.K. FURDYNA, Phys. Rev. B **50**, 18153 (1994)
- [Dea81] P.J. DEAN, D.C. HERBERT, C.J. WERKHOVEN, B.J. FITZPATRICK and R.N. BHARGAVA, Phys. Rev. B **23**, 4888 (1981)
- [Dea84] P.J. DEAN, G.M. WILLIAMS and G. BLACKMORE, J. Phys.: Appl. Phys. **17**, 2291 (1984)
- [Dod87] B.W. DODSON and J.Y. TSAO, Appl. Phys. Lett. **51**, 1325 (1987)
- [Dro77] N.A. DROZDOV, A.A. PATRIN, and V.D. TKACHEV, phys. stat. sol. (b) **83**, K137 (1977)
- [Dru70] W.E. DRUMMOND, J.L. MOLL, Appl. Phys. **52**, 5556 (1970)

- [Dur97] K. DUROSE, „*Narrow Gap II-VI Compounds for Optoelectronic and Electromagnetic Applications*“, 1st Edition, Edited by Peter Capper (Chapman and Holt, London), p.341ff., 1997.
- [Eng85] F. ENGELKE, „*Aufbau der Moleküle*“, (B.G. Teubner Stuttgart) p.117, 1985
- [Far99] J.-L. FARVACQUE and P FRANÇOIS, *Physica B*, **273-274**, 995 (1999)
- [Far01] J.-L. FARVACQUE and P FRANÇOIS, *phys. stat. sol. (b)* **223**, 635 (2001).
- [Fel92] P. FELTHAM, R. BANERJEE, *J. Mat. Sci.* **27**, 1626 (1992)
- [Fis95] C. FISCHER, Diplomarbeit, Physikalisches Institut, Universität Würzburg (1995)
- [Fra50] F.C. FRANK and W.T. READ, „*Symposium on Plastic Deformation of Crystalline Solids*“, Carnegie Institute of Technology, Pittsburgh, p.44, 1950
- [Fra88] F.C. FRANK, *phys. stat. sol. (a)* **105**, 21 (1988)
- [Fre38] J. FRENKEL and T. KONTOROVA, *Phys. Z. Sowjetunion* **13**, 1 (1938)
- [Gar88] GARNETT W. BRYANT, *Phys. Rev. B*, **37** (15), 8763 (1988)
- [Geo87] A. GEORGE, J. RABIER, *Phys. Rev.* **79**, 722 (1950)
- [Gil91] B. GIL and D.J. DUNSTAN, *Semicond. Sci. Technol* **6**, 428 (1991)
- [God74] K. GODWOD, R. KOWALCZYK, Z. SZMID, *phys. stat. sol (a)* **21**, 227 (1974)
- [Grö86] M. GRÖHLICH, Dissertation, Universität Göttingen 1986
- [Gut91] J. GUTOWSKI, *Semicond. Sci. Technol.*, **A51**, 6 (1991)
- [Güt72] W. GÜTH, *phys. stat. sol. (b)* **51**, 143 (1972)
- [Hal52] R.N. HALL, *Phys. Rev* **87**, 387 (1952)
- [Heg91] M. HEGGIE, A. UMERSKI, R. JONES, *Philos. Mag. A* **63**, 571 (1991)
- [Hild97] S. HILDEBRANDT, H. UNIEWSKI, J. SCHREIBER and H.S. LEIPNER, *J. Phys. III France* **7**, 1505 (1997)
- [Hild98] S. HILDEBRAND, Habilitationsschrift, Universität Halle (1998)
- [Hir82] J.P. HIRTH and J. LOTHE, „*Theory of dislocations*“, 2nd Edition, (Wiley, New York) 1982
- [Hör01] L. HÖRING, Dissertation, Universität Halle (2001)
- [Hop66] J.J. HOPFIELD, D.G. THOMAS and R.T. LYNCH, *Phys. Rev. Lett.* **17** (6), 312 (1966)
- [Hul84] D. HULL and D.J. BACON, „*Introduction to dislocations*“, (Pergamon Press, Oxford) 1984
- [Iba69] H. IBACH, *phys. stat. sol. (a)* **31**, 625 (1969)
- [Ivc97] E.L. IVCHENKO and G.E. PIKUS, „*Superlattices and Other Heterostructures*“ 2nd Ed., Springer Series in Solid-State Sciences 110, Edited by M. Cardona (Springer Berlin, Heidelberg, NY) p.277, 1997
- [Jai94] S.C. JAIN, „*Germanium-Silicon Strained Layers and Heterostructures*“, Advances in Electronics and Elektron Physics series, Supplement 24 (Academic Press, Boston) 1994
- [Jai97] S.C. JAIN A.H. HARKER, and R.A. COWLEY, *Phil. Mag. A* **75**, 1461 (1997)
- [Jes89] W.A. JESSER and J.H. VAN DER MERWE, „*Dislocations in Solids*“ vol.8 Edited by F.R.N. Nabarro, (Elsevier Science Publishers B.V., Amsterdam, Oxford, NY, Tokyo) p. 421, 1989
- [Jia91] JIAN-BAI XIA, *Phys. Rev. B* **44** (7), 3211 (1991)

- [Jon93] R. JONES, A. UMERSKI, P. SITCH, M.I. HEGGIE, S. ÖBERG, *phys. stat. sol. (a)* **138**, 369 (1993)
- [Kai97] A. KAILER, Y.G. GOGOTSI, K.G. NICKEL, *J. Appl. Phys.* **81** (7), 3057 (1997)
- [Kar74] E.P. KARTHEUSER, S. RODRIGUEZ, and P. FISHER, *phys. stat. sol. (b)* **64**, 11 (1974)
- [Kat93] T. KATO, Y. NAKAZAWA, T. MATSUMOTO, *Japanese Journal of Applied Physics*, 5525, (1993)
- [Kaw78] K. KAWAMURA, *Z. Phys. B* **29**, 101 (1978)
- [Kit93] M. KITTLER, W. SEIFERT, *phys. stat. sol. (a)* **138**, 687 (1993)
- [Kle68] C.A. KLEIN, *J. Appl. Phys.* **39**, 2029 (1968)
- [Kos63] G.F. KOSTER, „*Properties of the Thirty-Two Point Groups*“, MIT-Press Cambridge, Massachusetts (1963)
- [Kön01] B. KÖNIG, Dissertation, Universität Würzburg (2001)
- [Kub96] F. KUBACKI, J. GUTOWSKI, D. HOMMEL, M. HEUKEN, U.W. POHL, *Phys. Rev. B* **54** (3), 2028 (1996)
- [Kuh92] T. KUHN, Dissertation, Universität Würzburg (1992)
- [Kuo93] L.H. KUO, L. SALAMANCA-RIBA, J.M. DE PUYDT, H. CHENG and J. QUI, *APPL. Phys. Lett.* **63**, 3197 (1993)
- [Kuo94] L.H. KUO, L. SALAMANCA-RIBA, J.M. DE PUYDT, H. CHENG and J. QUI, *Phil. Mag. A* **69**, 301 (1994)
- [Kur92] E. KURTZ, Diplomarbeit, Universität Würzburg 1992
- [LanBör] LANDOLT-BÖRNSTEIN New Series III/22a, p. 176-185
- [Law71] P. LAWAETZ, *Phys. Rev. B* **4**, 3460 (1971)
- [Lee70] B.H. LEE, *J. Appl. Phys.* **42**, 2984 (1970)
- [Lel89] Y.S. LELIKOV, Y.T. REBANE, Y.T. SHRETER, *Inst. Phys. Conf. Ser.* **104**, 119 (1989)
- [Lin94] H.T. LIN, D.H. RICH and D.B. WITTRY, *J. Appl. Phys.* **75** (12), 8080 (1994)
- [Lom98] N.V. LOMASOV, V.V. TRANIKOV, S.O. KOGNOVITSKII, S.A. GRUEVICH, S.I. NESTEROV, V.I. SKOPINA, M. RABE and H. HENNEBERGER, *Phys. Solid State* **40** (8), 1413 (2001)
- [Lor99] D. LORENZ, H. JOHANSEN, P. GRAU, *Proc. of 3rd Int. Conf. Micro Materials, Micro Mat 2000 Berlin*, 396 (2000)
- [Lor01] D. LORENZ, Dissertation, Universität Halle (2001)
- [Loz91] H.J. LOZYKOWSKI and V.K. SHASTRI, *J. Appl. Phys.* **69**, 3235 (1991)
- [Lut56] J.M. LUTTINGER, *Phys. Rev.* **102**, 1030 (1956)
- [Mae85] K. MAEDA, S. TAKEUCHI, „*Dislocations in Solids*“ Edited by K. Suzuki *et al.*, (Univ. Press., Tokyo) p. 433, 1985
- [Mar88] H. MARIETTE, F. DAL'BO, N. MAGNEA, G. LENTZ and H. TUFFIGO, *Phys. Rev. B* **38**, 12443 (1988)
- [Mat67] J.W. MATTHEWS and W.A. JESSER, *Acta Metall.* **15**, 595 (1967)
- [Mat74] J.W. MATTHEWS and A.E. BLAKESLEE, *J. Cryst. Growth* **27**, 118 (1974)
- [Mat79] J.W. MATTHEWS, „*Dislocations in Solids*“ vol. **2**, Edited by F.R.N. Nabarro, (North-Holland, Amsterdam) p. 7, 1979

- [McI92] C.R. McIntyre and L.J. Sham, Phys. Rev. B **45** (16), 9443 (1992)
- [Mer82] J.H. VAN DER MERWE, Phil. Mag. A **45**, 145 und 158 (1982)
- [Mic98] T.A. MICHALSKE, J.E. HOUSTON, Acta mater. **46** (2), 391 (1998)
- [Naw80] M. NAWROCKI, A. TWARDOWSKI, phys. stat. sol. (b) **97** K 61(1980)
- [Neu80] G. NEUBERT, S. ROGASCHESKI, phys. stat. sol. (a) **59**, 35 (1980)
- [Ohk88] K. OHKAWA, T. MITSUYU, and O. YAMAZAKI, Phys. Rev. B **38** (17), 12465 (1988)
- [Osi86] YU.A. OSIP'YAN, V.F. PETRENKO, A.V. ZARETSKII, R.W. WHITWORTH, Advances in Physics **35** (2), 115 (1986)
- [Paa80] G. PAASCH, E. CHRISTKE, M. KAUSCH, phys. stat. sol. (b) **97**, 105 (1980)
- [Pei40] R. PEIERLS, Proc. Phys. Soc. **52**, 23 (1940)
- [Pel95] K. PELHOS, S.A. LEE, Y RAJAKARUNANAYAKE and J.L. RENO, Phys. Rev. B **51**, 13256 (1995)
- [Pet80] V.F. PETRENKO and R.W. WHITWORTH, Phil. Mag. A **41** (5), 681 (1980)
- [Pet93] J. PETRUZZELLO, J. GAINES, P. VAN DER SLUIS, D. OLEGO, C. PONZONI, Appl. Phys. Lett. **62** (13), 1496 (1993)
- [Pin98] K. PINARDI, UMA JAIN, S.C.JAIN, H.E. MAES, and R. VAN OVERSTRAETEN, M. WILLANDER, J. Appl. Phys. **83** (9), 4724 (1998)
- [Pon88] R.C. POND, „Dislocations in Solids“ vol.8 Edited by F.R.N. Nabarro, (Elsevier Science Publishers B.V., Amsterdam, Oxford, NY, Tokyo) p. 38, 1988
- [Pöy98a] S. PÖYKKÖ, M.J. PUSKA and R.M. NIEMINEN, Phys. Rev. B **57** (19), 12164 (1998)
- [Pöy98b] S. PÖYKKÖ, M.J. PUSKA and R.M. NIEMINEN, Phys. Rev. B **57** (19), 12174 (1998)
- [Pre95] H. PREIS, Diplomarbeit, Institut für Festkörperphysik II, Universität Regensburg (1995)
- [Rab00] J. RABIER, J.L. DEMENET, phys. stat. sol. (b) **222**, 63 (2000)
- [Ram95] K. RAMMOHAN, Y. TANG and D.H. RICH, R.S. GOLDMAN, H.H. WIEDER and K.L. KAVANAGH, Phys. Rev. B **51** (8), 5033 (1995)
- [Ram97] M. RAMSTEINER, R. HEY, R. KLANN, U. JAHN, I. GORBUNOVA, and K.H. PLOOG, Phys. Rev. B **55** (8), 5239 (1997)
- [Reb91] YU.T. REBANE and YU.G. SHRETER, „Polycrystalline Semiconductors II“, Springer Proceedings in Physics **54**, Editors: J.H. Werner and H.P. Strunk (Springer Berlin) p. 28, 1991
- [Reb93a] Y.T. REBANE and J.W. STEEDS, Phys. Rev. B **48** (20), 14963 (1993)
- [Reb93b] Y.T. REBANE and Y.T. SHRETER, phys. stat. sol. (a) **137**, 603 (1993)
- [Reb95a] Y.T. REBANE, J.W. STEEDS, Phys. Rev. Lett. **75**, 3716 (1995)
- [Reb95b] Y.T. REBANE, Phys. Rev. B **52** (3), 1590 (1995)
- [Rich99] Dr. U. RICHTER, Labor für Elektronenmikroskopie in Naturwissenschaft und Medizin, Halle, private Mitteilung (1999).
- [Rig97] P. RIGBY, Nature (London) **388**, 29 (1997)
- [Roc91] B. ROCKWELL, H.R. CHANDRASEKHAR, A.K. RAMDAS, M. KOBAYASHI and R.L. GUNSHOR, Phys. Rev. B **44**, 11307 (1991)
- [Ros96] A. ROSENAUER, T. REISINGER, F. FRANZEN, G. SCHÜTZ, B. HAHN, K. WOLF, J. ZWECK, and W. GEBHARDT, J. Appl. Phys. **79** (8), 4124 (1996)

- [Row74] J.M. ROW, R.M. NICKLOW, D.L. PRICE, K. ZANIO, Phys. Rev. B **10**, 671 (1974)
- [Sai90] M. SAID, and M.A. KANEHISA, phys. stat. sol. (b) **157**, 311 (1990)
- [San99] P.V. SANTOS, R. NÖTZEL, KH. PLOOG, J. Appl. Phys. **85** (12), 1 (1999)
- [Schr97] J. SCHREIBER, H. UNIEWSKI, S. HILDEBRANDT, L. HÖRING and H.S. LEIPNER, Inst. Phys. Conf. Ser. **157**, 651 (1997)
- [See94] M. SEELMANN-EGGEBERT, „*Properties of Narrow Gap Cadmium based Compounds*“, Edited by Peter Capper, (Published by INSPEC, London, UK) p.300, 1994.
- [Ser81] B. SERMAGE and G. FISHMAN, Phys. Rev. B **23**, 5107 (1981)
- [Ser90] PETER C. SERCEL and KERRY J. VAHALA, Phys. Rev. B **42** (6), 3690 (1990)
- [Set00] S. SETO, S. YAMADA, K. SUZUKI, J. Cryst. Growth, **214/215**, 5 (2000)
- [Sha88] K. SHAHZAD, Phys. Rev. B **38** (12), 8309 (1988)
- [Sho52] W. SHOCKLEY, W.T. READ, JR., Phys. Rev. **87**, 835 (1952)
- [Shr93] YU. G. SHRETER, YU. T. REBANE, and A.R. PEAKER, phys. stat. sol. (a) **138**, 681 (1993)
- [Shr96] Y.G. SHRETER, Y.T. REBANE, O.V. KLYAVIN, P.S. APLIN, C.J. AXON, W.T. YOUNG, J. W. STEEDS, J. Cryst. Growth **159**, 883 (1996)
- [Sit94] P. SITCH, R. JONES, S. ÖBERG, M.I. HEGGIE, Phys. Rev. B **50**, 17717 (1994)
- [Smi75] T.F. SMITH, G.K. WHILE, J. Phys. **C8**, 2031 (1975)
- [Spa97] W. SPAHN, Dissertation, Universität Würzburg (1997)
- [Ste91] J.W. STEEDS, J.L. BATSTONE, YU.T. REBANE and YU.G. SHRETER, „*Polycrystalline Semiconductors II*“, Springer Proceedings in Physics **54**, Editors: J.H. Werner and H.P. Strunk (Springer Berlin) p. 45, 1991.
- [Ste93] E.A. STEINMANN, Solid State Phenomena **32-33**, 303 (1993)
- [Tad97] TADASHI MITSUI and NAOKI YAMAMOTO, J. Appl. Phys., **81** (11), 7492 (1997)
- [Tak84] S. TAKEUCHI, K. SUZUKI and K. MAEDA, Phil. Mag. A **50** (2), 171 (1984)
- [Tei85] H. TEICHLER, M. GRÖHLICH and M.A. OLDFIELD, in „*Dislocations in Solids*“ Yamada Science Foundation (University of Tokyo Press) p.353, 1985
- [Tho53] N. THOMPSON, Proc. Phys. Soc. **66**, 481 (1953)
- [Tre79] H.-R. TREBIN, U. RÖSSLER, R. RANVAUD, Phys. Rev. B, **20** (2), 686 (1979)
- [Twa80] A. TWARDOWSKI, E. ROKITA and J.A. GAJ, Solid State Commun. **36**, 927 (1980)
- [Uni96] H. UNIEWSKI, J. SCHREIBER, S. HILDEBRANDT, H.S. LEIPNER, Mater. Sci Eng. **B42**, 284 (1996)
- [Vdo99] V.I. VDOVIN, phys. stat. sol. (a) **171**, 239 (1999)
- [Ven79] H. VENGHAUS, Phys. Rev. B **19**, 3071 (1979)
- [Wag98] G. WAGNER, Cryst. Res. Technol. **33** (3), 383 (1998)
- [Wag99] G. WAGNER, phys.stat. sol. (a) **173**, 385 (1999)
- [Web94] J. WEBER, Solid State Phenomena **37-38**, 13 (1994)
- [Wol94] K. WOLF, A. NAUMOV, T. REISINGER, M. KASTNER, H. STANZL, W. KUHN, W. GEBARD, J. Cryst. Growth **135**, (1-2), 113 (1994)
- [Wol95] K. WOLF, S. JILKA, H. SAHIN, H. STANZL, T. REISINGER, A. NAUMOV, W. GEBARD, J. Cryst. Growth **152**, (1-2), 34 (1995)
- [Wor95] L. WORSCHER, W. OSSAU, G. LANDWEHR, Phys. Rev. B **52** (19), 13965 (1995).

- [Wor98] L. WORSCHER, W. OSSAU, H.-J. LUGAUER, T. BEHR, A. WAAG, G. LANDWEHR, J. Crystal Growth **184/185**, 500 (1998)
- [Wor99] L. WORSCHER, W. OSSAU, A. WAAG, G. LANDWEHR, U. HILPERT, J. SCHREIBER, Y.T. REBANE, Y.G. SHRETER, Physica B, **273-274**, 895 (1999)
- [Wör97] M. WÖRZ, E. GRIEBL, T. REISINGER, R. FLIERL, B. HASERER, T. SEMMLER, T. FREY and W. GEBHARDT, phys. stat. sol (b) **202**, 805 (1997)
- [Wyc63] R.W.G. WYCKOFF, „*Crystall Structures*”, 2nd Edition, (Interscience, New York) vol.1, p.112, 1963

A.4 Veröffentlichungsverzeichnis

Publikationen in wissenschaftlichen Fachzeitschriften

- [1] „*Spectroscopy of Individual Dislocation Bundles in Thin ZnSe Films*“
U. Hilpert, L. Worschech, J. Schreiber, W. Ossau, J. Christen
physica status solidi (a) **186** No. 1, (2001) R10-R12.
- [2] „*Dyn SEM CL of glide dislocations in GaAs and CdTe*“
J. Schreiber, L. Höring, U. Hilpert
Veröffentlichung als Conference Proceedings DRIP IX
- [3] „*Intrinsic electronic properties of glide dislocations in compound semiconductors as revealed by localised radiative/ non-radiative recombination and REDM effect*“
J. Schreiber, L. Höring, U. Hilpert
Veröffentlichung als Conference Proceedings ICDS XXI in *Physica B, Condensed Matter*
- [4] „*Radiative 1D exciton recombination at B(g)-type dislocations in ZnSe and CdTe*“
J. Schreiber, U. Hilpert, L. Höring, L. Worschech, M. Ramsteiner
Veröffentlichung als Conference Proceedings MSM XII in *Inst. Phys. Conf. Ser*
- [5] „*SEM CL in-situ observation during dislocation motion in GaAs and CdTe*“
L. Höring, J. Schreiber, U. Hilpert
Solid State Phenomena, **78-79** (2001) 139-145
- [6] „*Optical characterization of single misfit dislocations and their interaction with pointdefects in thin ZnSe films*“
U. Hilpert, L. Worschech, L. Höring, M. Ramsteiner, B. König, J. Schreiber, W. Ossau, and G. Landwehr
Proceedings of the 25th International Conference on the Physics of Semiconductors (2)
Springer Proceedings in Physics **87** (2000) 1545-1546
Editors: N. Miura and T. Ando
(Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, NY)
- [7] „*Optical characterisation of isolated Se(g)-type misfit dislocations and their influence on strain relief in thin ZnSe films*“
U. Hilpert, J. Schreiber, L. Worschech, L. Höring, M. Ramsteiner, W. Ossau, and G. Landwehr
J. Phys.: Condens. Matter **12** (2000) 10169-10174
- [8] „*Heteroepitaxy of CdTe(111)B on Si(111):As*“
H. Schick, F. Bensing, U. Hilpert, U. Richter, L. Hansen, J. Wagner, V. Wagner, J. Geurts, A. Waag, G. Landwehr
Journal of Crystal Growth **214/215** (2000) 1-4
- [9] „*Luminescence studies on plastic stress relaxation in ZnSe/GaAs(001)*“
J. Schreiber, U. Hilpert, L. Höring, L. Worschech, W. Ossau, A. Waag, G. Landwehr
physica status solidi (b) **222** (2000) 169
- [10] „*REM KL in-situ Beobachtung von Versetzungsbewegungen in GaAs und CdTe*“
L. Höring, J. Schreiber, U. Hilpert
Veröffentlichung als Conference Proceedings 32. Kolloquium des Arbeitskreises für Elektronenmikroskopische Direktabbildung und Analyse von Oberflächen, Saarbrücken, Germany, 18.-20.09.2000

- [11] „*Study on plastic relaxation of layer stress in ZnSe/GaAs(001) heterostructures*“
J. Schreiber, U. Hilpert, L. Höring, L. Worschech, B. König, W. Ossau, A. Waag,
G. Landwehr
Inst. Phys. Conf. Ser. **164**, Microsc. Semicond. Mater. Conf., Oxford, UK (1999) 299-304
Editors: A.G. Cullis and R. Beanland
(Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia)
- [12] „*Anisotropic polarization of dislocation-related luminescence in thin ZnSe films*“
L. Worschech, W. Ossau, A. Waag, G. Landwehr, U. Hilpert, J. Schreiber, Y.T. Rebane,
Y.G. Shreter
Physica B, Condensed Matter **273-274** (1999)
- [13] „*Chemical surface modification of porous silicon with various silanes*“
J. Linsmeier, H. Pröbstle, U. Hilpert, J. Fricke,
Joint Int. Meeting, Electrochem. Soc., Paris, (1997)
- [14] „*Chemical surface modification of porous silicon using tetraethoxysilane*“
J. Linsmeier, K. Wüst, H. Schenk, U. Hilpert, W. Ossau, J. Fricke, R. Arens-Fischer
Thin Solid Films **297** (1997) 26-30
- [15] „*Sol-Gel Synthesis and Spectroscopic Properties of Thick Nanocrystalline CdSe Films*“
V. Ptatschek, B. Schreder, K. Herz, U. Hilpert, W. Ossau, G. Schottner, O. Rahäuser, T.
Bischof, G. Lermann, A. Materny, W. Kiefer, G. Bacher, A. Forchel, D. Su, M. Giersig, G.
Müller and L. Spanhel
J. Phys. Chem. B **101** (44) (1997) 8898-8906

Vorträge und Posterpräsentationen auf wissenschaftlichen Konferenzen

- [16] J. Schreiber, L. Höring, U. Hilpert
„*Dyn SEM CL of glide dislocations in GaAs and CdTe*“
DRIP IX, 9th International Conference on Defects - Recognition, Imaging and Physics in
Semiconductors, Rimini (Italy) September 24-28, 2001
- [17] „*Structural and optical properties of II-VI heteroepitaxial layers*“
U. Hilpert, J. Schreiber, L. Worschech, A. Waag and G. Landwehr
10th International Conference on II-VI Compounds, Bremen (Germany),
September 9-14, 2001
- [18] J. Schreiber, L. Höring, U. Hilpert
„*Intrinsic electronic properties of glide dislocations in compound semiconductors as
revealed by localised radiative/ non-radiative recombination and REDM effect*“
ICDS XXI, 21st International Conference on Defects in Semiconductors, Giessen
(Germany), July 16 - 20, 2001
- [19] U. Hilpert, L. Worschech, L. Höring, M. Ramsteiner, B. König, J. Schreiber, W. Ossau,
and G. Landwehr
„*Optical characterization of single misfit dislocations and their interaction with point
defects in thin ZnSe films*“
ICPS 25, 25th International Conference on Physics of Semiconductors, Osaka (Japan),
September 17-22, 2000

- [20] U. Hilpert, L. Höring, J. Schreiber, B. König, L. Worschech, A. Waag, G. Landwehr
"Study on plastic relaxation of layer stress in ZnSe/GaAs(001) heterostructures"
Workshop of II-VI Semiconducting Materials, Würzburg (Germany), April 1999.
- [21] J. Schreiber, U. Hilpert, L. Worschech, L. Höring, A. Waag, G. Landwehr
"Study on plastic relaxation of layer stress in Zn/GaAs(001) heterostructures"
XIth Int. Conf. Microscopy of Semiconducting Materials, Oxford (UK), March 1999.
- [22] J. Schreiber, S. Hildebrandt, L. Höring, U. Hilpert, H. Uniewski
"Analysis of radiative and nonradiative recombination activity of glide dislocations in GaAs and CdTe"
BIADS98 Wulkow (Germany), August 1998

Danksagung

Ich möchte mich bei allen, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben, herzlich bedanken.

Mein Dank geht an Herrn Prof. Dr. G. Dräger für die interessante Themenstellung und sein Interesse am Fortgang meiner Arbeit.

Herrn Dr. J. Schreiber danke ich für die gute Betreuung und die wertvollen Anregungen.

Sehr herzlich bedanken möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. H.-R. Höche für die Förderung dieser Arbeit im Rahmen des Graduiertenkollegs 415 „Defektstrukturbestimmte physikalische Eigenschaften von Kristallen“.

Besonders hervorheben möchte ich die konstruktive Zusammenarbeit mit Herrn Dr. L. Worschech (Universität Würzburg).

Ebenfalls bedanke ich mich bei Herrn Dipl.-Ing. H. Mähl. Unter seiner Obhut funktionierten die Rasterelektronenmikroskope stets optimal. Darüber hinaus gilt mein Dank für das gute Arbeitsklima allen weiteren Mitglieder der Arbeitsgruppe Festkörperspektroskopie, den Herren L. Höring, L. Long, S. Vasyov, N. Engler, A. Gansha, N. Rasek, F. Halbig und C. Klose.

Einige der hier vorgestellten Arbeiten sind in Zusammenarbeit mit anderen Gruppen entstanden. Ich bedanke mich

- bei den Herren Dr. B. König, R. Fiederling sowie D. Keller aus der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. W. Ossau (Universität Würzburg) für die Unterstützung bei den PL-Untersuchungen,
- bei den Herren D. Lorenz und A. Zeckzer aus der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. P. Grau (Universität Halle) hinsichtlich der Untersuchungen zur Nanoindentierung,
- bei den Herren Dr. M. Ramsteiner (Paul-Drude-Institut, Berlin) für die Unterstützungen bei den μ -pol-PL-Messungen,
- bei Herrn Dipl.-Phys. D. Rudloff aus der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. J. Christen (Universität Magdeburg) für die Zusammenarbeit bei den CLWI-Untersuchungen,
- bei Herrn Dr. U. Richter für elektronenmikroskopische Untersuchungen an den CdTe-Epitaxieschichten.

Die hier präsentierten Ergebnisse wären sicherlich nicht ohne ausgezeichnete Halbleiterschichten möglich gewesen. Mein Dank geht daher an Dipl.-Phys. H. Schick und Prof. Dr. G. Landwehr (Universität Würzburg), Prof. Dr. A. Waag (Universität Ulm) und Herrn Dr. H. Preis (Universität Regensburg) für die Bereitstellung von II-VI Halbleiterepitaxieschichten hoher struktureller Güte.

Mein größter Dank gilt meiner Familie allen voran meinen Eltern, die mich stets unterstützten, sowie meinem Bruder Stefan für anregende Diskussionen.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Geboren: 20. September 1969 in Kitzingen
Familienstand: ledig

Schulbildung

Grund- und Hauptschule: 1976-1981 in Kitzingen
Gymnasium: 1981-1990 Armin-Knab-Gymnasium in Kitzingen
Abitur: Juni 1990

Studium

Physikstudium: 1990 –1997 an der Bayerischen Julius-Maximilians-Universität Würzburg

Examina: Mai 1993 Diplom-Vorprüfung
Juli 1997 Diplomprüfung

Promotion: 8.1.1997-1.2.2001 Promotionsstipendium gefördert durch die DFG (GRK 415) an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

Wissenschaftliche Hilfstätigkeit: 1.11.1998-31.12.1998 Zentrum für Materialwissenschaft, Halle

Seit Juni 2001
Wissenschaftlicher Mitarbeiter
FG Experimentelle Physik V
Prof. Dr. G. Dräger,
Universität Halle

Halle S., den 24.10.2001

Eidesstattliche Erklärung

Ich versichere, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig und nur unter Verwendung der angegebenen Quellen und Hilfsmittel angefertigt habe. Alle Ausführungen, die wörtlich oder sinngemäß übernommen wurden, sind als solche gekennzeichnet.

Diese Arbeit wurde bisher weder im In- noch im Ausland in dieser oder ähnlicher Form in einem Prüfungsverfahren vorgelegt.

Halle S., den 24. 10. 2001

Uwe Hilpert